## UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

## JOCELAINE CARGNELUTTI

# SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM CANAIS COM OBSTÁCULOS SUBMERSOS POR MEIO DO MÉTODO DO RETICULADO DE BOLTZMANN

CURITIBA

## JOCELAINE CARGNELUTTI

# SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM CANAIS COM OBSTÁCULOS SUBMERSOS POR MEIO DO MÉTODO DO RETICULADO DE BOLTZMANN

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, Área de Concentração em Programação Matemática, dos setores de Tecnologia e Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial para obtenção do título de Doutora em Métodos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Eloy Kaviski

Coorientadora: Profa. Dra. Liliana Madalena

Gramani

**CURITIBA** 

#### Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

Cargnelutti, Jocelaine.

C276 Simu

Simulação do escoamento em canais com obstáculos submersos por meio do método do reticulado de Boltzmann / Jocelaine Cargnelutti. -- Curitiba, 2017.

152f.: il.

Orientador: Eloy Kaviski

Coorientador: Liliana Madalena Gramani

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologias e Ciências Extas, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia.

1. Método do reticulado de Boltzmann. 2. Escoamento em canal. 3. Obstáculos submersos. I. Kaviski, Eloy. II. Gramani, Liliana Madalena. III. Universidade Federal do Paraná. IV. Título.

CDU 519.6

Ficha catalográfica elaborada por Rute Teresinha Schio – CRB 9/1095



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO Setor CIÊNCIAS EXATAS Programa de Pós-Graduação MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA

## TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em MÉTODOS NUMÉRICOS EM
ENGENHARIA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de
JOCELAINE CARGNELUTTI intitulada: SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM CANAIS COM OBSTÁCULOS SUBMERSOS POR
MEIO DO MÉTODO DO RETICULADO DE BOLTZMANN, após terem inquirido a aluna e realizado a avaliação do trabalho, são de
parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.
A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções
solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

Curitiba, 27 de Outubro de 2017.

ELOY KAVISKI Presidente da Banca Examinadora

EUDES JOSÉ ARANTES Avaliador Externo

ADILANDRI MÉRCIO LOBEIRO

Avaliador Externo

MICHAEL MANNICH Avaliador Externo

RUDINEI LUIZ BOGO

Avaliador Externo

Dedico esta tese aos meu pais, Celita Bertoldo Cargnelutti e Selito Cargnelutti, guerreiros e humildes agricultores que tiveram cinco filhos, dos quais três concluiram o curso de doutorado.

### **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus e a Nossa Senhora Medianeira por colocarem luz no meu caminho, me concederem saúde, proteção, sabedoria, serenidade, persistência e força em todos os momentos da minha vida.

Ao meu marido Vanderlei Galina, companheiro de doutorado, de profissão, de pesquisa e de vida. Em 2013, quando ainda éramos noivos, recebi o convite para fazermos o doutorado juntos no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia na Universidade Federal do Paraná. Aceitei imediatamente e hoje, quatro anos depois, finalizamos o curso de doutorado juntos, firmes na nossa pesquisa, na profissão e no companherismo.

Aos meus pais e irmãos, Celita, Selito, Jocelito, Ademir, Joceli e Denise, minha eterna gratidão. Vocês são meus melhores exemplos. Em especial, agradeço a minha mãe, mulher guerreira, iluminada, encantadora e minha grande incentivadora.

Ao meu professor orientador Eloy Kaviski, pela indicação da pesquisa, apoio, contribuições e incentivo na elaboração da tese. Um profissional exemplar, dedicado e comprometido, que possui minha admiração.

À minha coorientadora professora Liliana Madalena Gramani que acreditou no meu potencial e sempre incentivou a pesquisa.

Agradeço à Universidade Federal do Paraná (UFPR) e ao Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE).

À Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), que viabilizou o meu afastamento integral para cursar o doutorado, permitindo a qualificação de seu corpo docente. Sinto-me honrada em fazer parte da equipe UTFPR.

Ao professor Adilandri Mércio Lobeiro, pelas longas conversas e discuções. Grande incentivador, que tornou-se um amigo querido.

Aos professores do PPGMNE, por todo o conhecimento transmitido e aos colegas, por todos os momentos compartilhados.

Agradeço aos colegas de trabalho do Curso de Licenciatura em Matemática da UTFPR do Câmpus Toledo, pelas palavras de apoio. Parabéns ao grupo, pois estão na constante busca da qualificação.

A todos os meus amigos e torcedores do bem. Aos meus queridos padrinhos de casamento Inês Farias Ferreira e Fábio Padilha, amigos de longa data. Obrigada pelo opoio em muitos momentos, pelo insentivo, pelo torcida positiva e pela amizade sincera.

#### **RESUMO**

Esta tese verifica a capacidade do método do reticulado de Boltzmann (LBM - Lattice Boltzmann Method) na simulação numérica bidimensional de trechos do canal da Piracema, construído no parque da usina hidrelétrica de Itaipu, cuja dinâmica é governada pelas equações de águas rasas. O Canal da Piracema possui grande importância para a região. Pode-se perceber os benefícios que esta obra trouxe, permitindo que diversas espécies de peixes existentes na Costa Oeste do Estado, possam transpor a barragem da usina e, assim, voltam a utilizar sua antiga rota migratória para a desova. Foram simulados um trecho do canal de iniciação e o primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira. Estes trechos possuem chicanas submersas, cuja função é reduzir a velocidade da água. A simulação numérica foi realizada por meio do método do reticulado de Boltzmann com múltiplos tempos de relaxamento (MRT - Multiple Relaxation Time). Considerou-se como condições de contorno vazão constante na entrada do canal, altura constante na saída e nãoescorregamento nas paredes do canal. Incorporou-se ao código computacional uma técnica de simulação em grandes escalas (LES - Large Eddy Simulation) e esta permite obter resultados mais próximos do comportamento real do escoamento. Avaliou-se a estabilidade da simulação em todos os pontos da malha para cada passo de tempo e, juntamente com a propriedade da consistência do LBM, obtém-se a convergência da solução. Os resultados apresentados mostram que o modelo desenvolvido foi capaz de reproduzir as condições para a ocorrência da Piracema, ou seja, as velocidades não ultrapassaram 3 m/s nas seções transversais ao longo do trecho analisado, a profundidade da água é superior a 0,8 m e áreas molhadas nas seções transversais superiores a 6 m<sup>2</sup>. Exceto nos primeiros pontos da entrada do canal, o erro relativo é menor do que 0.01%. Este erro atende aos requisitos de precisão da maioria dos problemas em Engenharia Hidráulica.

Palavras-chaves: Simulação numérica. Método do Reticulado de Boltzmann. Equações de águas rasas. Escoamento em canal. Obstáculos submersos.

#### **ABSTRACT**

This thesis looks at the capacity of the Lattice Boltzmann Method (LBM) to perform the numerical simulation of stretches of the Piracema canal, built in the Itaipu hydropower plant park. Its dynamic is governed by shallow water equations. The Piracema canal is very important for the region. It is possible to note the benefits of this work, enabling various species of fishes in the West Coast of the state to pass the plant dam, and thus return to their old spawning migration route. An excerpt of the initiation channel and the first stretch of the feed channel were simulated. These stretches have submerged chicanes to reduce water velocity. Numerical simulation was performed using the Lattice Boltzmann method with multiple relaxation times (MRT). Boundary conditions considered were constant flow at the entry to the channel, constant height at the exit, and non-slipping of the channel walls. A large scale simulation technique (LES) was incorporated to the computer code, and this allows obtaining results that are closer to the real flow behavior. Simulation stability was evaluated at all points of the mesh for each time step and together with the property of LBM consistency, solution convergence is obtained. The results show that the model developed managed to reproduce the conditions for the occurrence of Piracema, ie., the velocities did not surpass 3 m/s in the cross-sections along the stretch analyzed, the water depth is greater than 0,8 m and wetted areas in the cross-sections are greater than 6 m<sup>2</sup>. Except for the initial points at the entry to the channel, the relative error is less than 0.01%. This error fulfills the requirements for precision of most problems in Hydraulic Engineering.

**Key-words**: Numerical simulation. Lattice Boltzmann method. Shallow water equations. Open-channel flow. Submerged obstacles.

# LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura I – Vista panorâmica do canal de alimentação em trincheira 26
Figura 2 — Vista panorâmica do canal de Iniciação
Figura 3 — Elementos geométricos de uma seção de um canal
Figura 4 — Direções de movimento do reticulado D2Q5, com 4 velocidades não nulas $53$
Figura 5 — Modelo de reticulado D2Q7, com 6 velocidades não nulas
Figura 6 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D2Q9 63
Figura 7 — Ilustração de pontos nas paredes superior e inferior do canal
Figura 8 — Ilustração de pontos da malha na entrada e saída do canal 79
Figura 9 — Ilustração de pontos nos cantos da malha na entrada do canal 84
Figura 10 — Ilustração de pontos nos cantos da malha na saída do canal 85 $$
Figura 11 – Escoamento de Poiseuille
Figura 12 — Solução numérica do escoamento com dados na malha
Figura 13 — Solução numérica do escoamento com dados físicos
Figura 14 — Comparação entre a solução analítica e numérica em $x=L_x/2$
Figura 15 — Convergência da velocidade em $(L_x/2,L_y/2)$
Figura 16 — Esquema para simulação do fluxo de maré
Figura 17 — Superfície da água em 10937,5 s
Figura 18 — Velocidade do escoamento em 10937,5 s
Figura 19 — Vista plana do canal com cilíndro no meio $\dots \dots \dots$
Figura 20 — Perfil da profundidade da água no centro do canal
Figura 21 – Profundidade da água com $\tau = 0.60 \dots \dots$
Figura 22 – Velocidade da água na direção do escoamento, $u_x$ com $\tau=0.60$ 107
Figura 23 – Magnitude da vorticidade, com $\tau=0.60.$
Figura 24 – Erro relativo da profundidade da água, com $\tau=0.60.$
Figura 25 – Profundidade da água com $\tau=0{,}5002$
Figura 26 – Velocidade da água na direção do escoamento, $u_x$ com $\tau=0.5002$ 109
Figura 27 — Erro relativo da profundidade da água, com $\tau=0,\!5002.$
Figura 28 – Magnitude do vorticidade, com $\tau=0.5002.$
Figura 29 — Visão geral do parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu
Figura $30$ — Trecho do canal de iniciação no parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu $$ $113$
Figura 31 — Representação computacional do canal de iniciação
Figura 32 – Perfil do canal de iniciação em $(x, ny/2)$
Figura 33 — Profundidade da água no canal com chicanas
Figura 34 — Velocidade da água na direção $x$ no canal de iniciação com chicanas 117
Figura 35 — Velocidade da água na direção $x$ no canal de iniciação sem chicana 117
Figura 36 — Velocidade da água na direção $y$ no canal de iniciação com chicanas 117

Figura 37 — Magnitude dos vórtices no canal de iniciação com chicanas
Figura $38$ — Erro relativo para a profundidade da água no canal de iniciação com chicanas. $118$
Figura 39 – Trecho do canal de alimentação em trincheira
Figura 40 – Representação computacional do canal alimentação em trincheira $$ 122
Figura 41 – Vista plana do canal de alimentação em trincheira
Figura 42 — Profundidade da água no canal de alimentação em trincheira com chicanas. 124
Figura 43 – Velocidade $u$ no canal de alimentação em trincheira com chicana 125
Figura 44 – Velocidade $u$ no canal de alimentação em trincheira sem chicana 125
Figura 45 – Velocidade $v$ no canal de alimentação em trincheira com chicana 126
Figura 46 – Magnitude dos vórtices no canal de alimentação em trincheira com chicana. 126
Figura 47 – Erro relativo no canal de alimentação em trincheira com chicanas $$ 126
Figura 48 – Variação do número de Froude no canal com chicanas
Figura 49 – Representação dos quatro sub-reticulados
Figura 50 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D3Q15 149
Figura 51 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D3Q19. $$ 150
Figura 52 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D1Q3 151
Figura $53$ – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D1Q5 $152$

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Elevação do leito, $z_b(x)$
Tabela 2 –	Características do canal de iniciação
Tabela 3 –	Características do trecho escolhido do canal de iniciação
Tabela 4 –	Parâmetros de simulação para o canal de iniciação
Tabela 5 –	Características reais do trecho do canal de alimentação
Tabela 6 –	Características baseadas no trecho do canal de alimentação 119
Tabela 7 –	Parâmetros de simulação para o canal de alimentação em trincheira. 124

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BGK	Denominação do operador de colisão formulado independentemente por Bhatnagar, Gross e Krook, e por Welander
CA	Autômato Celular - (Cellular Automata)
CFD	Dinâmica de Fluido Computacional - ( $Computational\ Fluid\ Dynamic$ )
DNS	Simulação numérica direta - ( $Direct\ Numerical\ Simulation$ )
DnQm	Modelo de reticulado onde $n$ representa a dimensão e $m$ a quantidade de velocidades do reticulado
D1Q3	Modelo de reticulado unidimensional com três direções de movimento
D1Q5	Modelo de reticulado unidimensional com cinco direções de movimento
D2Q5	Modelo de reticulado bidimensional com cinco direções de movimento
D2Q7	Modelo de reticulado bidimensional com sete direções de movimento
D2Q7X	Modelo de reticulado bidimensional estendido que utiliza os gradientes de velocidade do fluido
D2Q9	Modelo de reticulado bidimensional com nove direções de movimento
D3Q15	Modelo de reticulado tridimensional com quinze direções de movimento
D3Q19	Modelo de reticulado tridimensional com dezenove direções de movimento
D3Q27	Modelo de reticulado tridimensional com vinte e sete direções de movimento
FHP	Modelo de Autômato Celular do tipo Gás em Rede desenvoldido por Frisch, Hasslacher e Pomeau
HPP	Modelo de Autômato Celular do tipo Gás em Rede desenvolvido por Hardy, Pazziz e Pomeau
LBE	Equação do Reticulado de Boltzmann - ( $Lattice\ Boltzmann\ Equation$ )
LBE-BGK	Equação do Reticulado de Boltzmann com operador de colisão BGK
LBE-MRT	Equação do Reticulado de Boltzmann com múltiplos Tempos de Relaxamento

LBM Método do Reticulado de Boltzmann - (	Lattice Boltzmann Method)
---	---------------------------

LBM-BGK Método do Reticulado de Boltzmann com operador de colisão BGK

LBM-MRT Método do Reticulado de Boltzmann com Múltiplos Tempos de relaxa-

mento

LGCA Autômato Celular do tipo Gás em Rede - (Lattice Gas Cellular Auto-

mata)

LES Simulação em grandes escalas - (Large Eddy Simulation)

MHD Magneto-hidrodinâmica (Magnetohydrodynamics)

MRT Múltiplos Tempos de relaxamento - (Multiple Relaxation Time)

SGS Tensor escala sub-malha - (SubGrid-scale Stress)

SRT Um Único Tempo de Relaxamento - (Single Relaxation Time)

TRT Dois tempos de Relaxamento - (Two Relaxation Times)

## LISTA DE SÍMBOLOS

a	Módulo da velocidade relativa
$\vec{a}$	Velocidade relativa
A	Área molhada
c	Celeridade
$C_b$	Coeficiente de atrito com o leito do canal
$c_s$	Velocidade do som
$C_s$	Constante de Smagorinsky
$C_z$	Coeficiente de Chezy
$C_w$	Coeficiente de resistência
D	Dimensão do espaço
$E_i$	Termo de Coriolis
$ec{e}$	Velocidade das partículas no reticulado
$ e\rangle$	Modo de energia
$E_i$	Parâmetro de Coriolis na direção $i$
$\vec{e_{lpha}}$	Velocidades das partículas no LBM em cada uma das direções $\alpha$
f	Função distribuição de partículas na equação do reticulado de Boltzmann
$ec{F}$	Termo de força
$f^{eq}$	Função distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann
$f_c$	Parâmetro de Coriolis
$f_{lpha}^{eq}$	Função distribuição de equilíbrio considerando as direções do reticulado escolhido
$F_r$	Número de Froude
g	Aceleração da gravidade
h	Profundidade do fluido

h angle	Modo de altura
$H_m$	Altura hidráulica ou altura média
i	Índice usado para indicar a direção espacial $\boldsymbol{x}$
$I_0$	Declividade do fundo do canal
$I_{lpha}$	Declividade piezométrica ou declividade da linha d'água
$I_f$	Declividade da linha de energia
$ j_x angle$	Corresponde a componente $x$ do fluxo de massa
$ j_y angle$	Corresponde a componente $y$ do fluxo de massa
j	Índice usado para indicar a direção espacial $\boldsymbol{y}$
$\mathcal J$	Notação para o termo de colisão com aproximação BKG na equação cinética de Boltzmann
k	Constante de Boltzmann
L	Comprimento característico
m	Massa
M	Número de direções no reticulado
$M$ $M_a$	Número de direções no reticulado Número de Mach
$M_a$	Número de Mach São as funções de distribuição de partículas no espaço dos momentos
$M_a$ $m_lpha$	Número de Mach São as funções de distribuição de partículas no espaço dos momentos para cada uma das direções do reticulado escolhido
$M_a$ $m_lpha$ $m_lpha^{eq}$	Número de Mach  São as funções de distribuição de partículas no espaço dos momentos para cada uma das direções do reticulado escolhido  São as funções de distribuição de equilíbrio no espaço dos momentos
$M_a$ $m_lpha$ $m_lpha^{eq}$ $N_lpha$	Número de Mach  São as funções de distribuição de partículas no espaço dos momentos para cada uma das direções do reticulado escolhido  São as funções de distribuição de equilíbrio no espaço dos momentos  Constante estabelecida de acordo com o reticulado escolhido
$M_a$ $m_lpha$ $m_lpha^{eq}$ $N_lpha$ $n_b$	Número de Mach  São as funções de distribuição de partículas no espaço dos momentos para cada uma das direções do reticulado escolhido  São as funções de distribuição de equilíbrio no espaço dos momentos  Constante estabelecida de acordo com o reticulado escolhido  Coeficiente de Manning
$M_a$ $m_lpha$ $m_lpha^{eq}$ $N_lpha$ $n_b$ $n_lpha$	Número de Mach  São as funções de distribuição de partículas no espaço dos momentos para cada uma das direções do reticulado escolhido  São as funções de distribuição de equilíbrio no espaço dos momentos  Constante estabelecida de acordo com o reticulado escolhido  Coeficiente de Manning  Função distribuição de partículas na LGCA
$M_a$ $m_{lpha}$ $m_{lpha}^{eq}$ $N_{lpha}$ $n_b$ $n_{lpha}$ $\langle n_{lpha}  angle$	Número de Mach  São as funções de distribuição de partículas no espaço dos momentos para cada uma das direções do reticulado escolhido  São as funções de distribuição de equilíbrio no espaço dos momentos  Constante estabelecida de acordo com o reticulado escolhido  Coeficiente de Manning  Função distribuição de partículas na LGCA  Médias das funções distribuições de partículas booleanas
$M_a$ $m_{lpha}$ $m_{lpha}^{eq}$ $N_{lpha}$ $n_b$ $n_{lpha}$ $\langle n_{lpha}  angle$	Número de Mach  São as funções de distribuição de partículas no espaço dos momentos para cada uma das direções do reticulado escolhido  São as funções de distribuição de equilíbrio no espaço dos momentos  Constante estabelecida de acordo com o reticulado escolhido  Coeficiente de Manning  Função distribuição de partículas na LGCA  Médias das funções distribuições de partículas booleanas  Pressão

Pressão hidrostática

 $p_H$ 

$ p_{xx} angle$	Corresponde a componente na diagonal de fora da diagonal do tensor de tensões.
$ p_{xy} angle$	Corresponde a componente na diagonal de fora da diagonal do tensor de tensões.
$ q_x angle$	Corresponde a componente $x$ do fluxo de energia
$ q_y angle$	Corresponde a componente $y$ do fluxo de energia
$Q_c$	Vazão calculada
$Q_{in}$	Vazão na entrada do canal
Q	Notação para o termo de colisão integro-diferencial na equação cinética de Boltzmann
$R_e$	Número de Reynolds
$R_h$	Raio Hidráulico
$ec{S}$	Força de corpo
$ec{S}_{lpha}$	Força de corpo considerando as direções do reticulado escolhido
$\widehat{S}$	é uma matriz diagonal, onde os seus valores são definidos de acordo com problema estudado
$S_{0_x}$	Declividade do canal na direção $\boldsymbol{x}$
$S_{0y}$	Declividade do canal na direção $y$
$S_{f_x}$	Declividade da linha de energia direção $\boldsymbol{x}$
$S_{fy}$	Declividade da linha de energia direção $\boldsymbol{y}$
$u_{wi}$	Componente da velocidade do vento na direção $i$
$ec{u}_i$	Velocidade do fluido da direção $i$
$ec{u}_j$	Velocidade do fluido da direção $j$
$ec{x}$	Vetor espacial que fornece a posição dos nós no reticulado
$w_{lpha}$	Pesos associados a cada uma das direções no reticulado
$\alpha$	Índice usado para percorrer todas as direções do reticulado
$\delta_{ij}$	Função delta de Kronecker

 $\Delta t$ Espaçamento entre instantes no domínio temporal  $\Delta x$ Espaçamento do reticulado no domínio espacial Ângulo azimutal ε  $|\varepsilon\rangle$ Está relacionada com o quadrado da energia Viscosidade de bulk Ċ Viscosidade dinâmica do fluido  $\mu$ Viscosidade cinemática ν Viscosidade cinemática turbulenta  $\nu_e$ Viscosidade cinemática total  $\nu_t$ Densidade do fluido Densidade do ar  $\rho_a$ Parâmetro de relaxamento no LBM Parâmetro de relaxamento turbulento  $\tau_e$ Parâmetro de relaxamento total  $\tau_t$ Tensões de viscosidade  $\tau_{ij}$ Tensão de cisalhamento do vento na superfície da água na direção i $\tau_{wi}$ Tensão de cisalhamento com o fundo do canal na direção i $\tau_{bi}$  $\Omega$ Operador de colisão na equação do LBM  $\nabla$ Operador diferencial nabla Frequência de colisão  $\overline{w}$ Densidade de massa  $\partial z_b/\partial x_i$ Declividade do fundo É uma notação para vetor coluna  $|.\rangle$ 

## SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	21
1.1 PROBLEMAS DE PESQUISA	25
1.2 OBJETIVOS	28
1.2.1 Objetivo Geral	28
1.2.2 Objetivos Específicos	28
1.3 JUSTIFICATIVA	28
1.4 ORGANIZAÇÃO DA TESE	29
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	30
3 HIDRÁULICA DE CANAIS E AS EQUAÇÕES DE ÁGUAS RASAS	44
3.1 HIDRÁULICA DE CANAIS	44
3.2 EQUAÇÕES DE ÁGUAS RASAS	45
4 AUTÔMATOS CELULARES E A TEORIA CINÉTICA	<b>5</b> 0
4.1 AUTÔMATOS CELULARES	
4.2 AUTÔMATOS CELULARES DO TIPO GÁS EM REDE	52
4.3 TEORIA CINÉTICA	56
5 MÉTODO DO RETICULADO DE BOLTZMANN	<b>5</b> 9
5.1 LBM COM OPERADOR DE COLISÃO BGK	59
5.1.1 Equação do Método do Reticulado de Boltzmann	
5.1.2 Reticulado $D2Q9$	62
5.1.3 Função Distribuição de Equilíbrio para Águas Rasas e Variáveis Macroscópicas	
5.1.4 Recuperação das Equações de Águas Rasas	67
5.1.5 Estabilidade	69
5.1.6Importância e Considerações sobre o Operador de Colisão BGK	
5.2 LBM COM OPERADOR DE COLISÃO MRT	72
6 CONDIÇÕES DE CONTORNO NO LBM	77
6.1 CONDIÇÃO DE ESCORREGAMENTO	77
6.2 CONDIÇÃO DE NÃO-ESCORREGAMENTO	78
6.3 CONDIÇÃO DE ZOU E HE $\ \ldots \ \ldots \ \ldots \ \ldots \ \ldots$	78
6.3.1 Condição de Vazão Constante na Entrada do Canal	81
6.3.2 Condição de Altura Constante na Saída do Canal	82
6.3.3 Tratamento Especial para os Nós dos Cantos da Malha	83

6.3.3.1 Nós Localizados nos Cantos da Entrada do Canal	83
6.3.3.2 Nós Localizados nos Cantos da Saída do Canal	85
6.3.4 Condição de Pressão Constante na Entrada e Saída do Tubo	86
7 ABORDAGEM DA TURBULÊNCIA NO LBM E ALGORITMOS . 8	89
7.1 MODELOS PARA A ABORDAGEM DA TURBULÊNCIA	89
7.2 TÉCNICA SGS PARA ÁGUAS RASAS	90
7.3 INCORPORANDO A TURBULÊNCIA NO LBM	91
7.4 ALGORITMOS	93
7.4.1 Algoritmo para o LBM-BGK	93
7.4.2 Algoritmo para o LBM-MRT	94
8 APLICAÇÕES	97
8.1 ESCOAMENTO DE POISEUILLE	97
8.1.1 Características do Problema	97
8.1.2 Resultados e Discussões	98
8.2 SIMULAÇÃO DE UMA ONDA NO MAR PRÓXIMO À COSTA	01
8.2.1 Características do Problema	01
8.2.2 Resultados e Discussões	03
8.3 ESCOAMENTO AO REDOR DE UM CILINDRO LOCALIZADO NO CENTRO	
DE UM CANAL	04
8.3.1 Características do Problema	04
8.3.2 Resultados e Discussões	05
9 ESCOAMENTO EM CANAIS COM CHICANAS SUBMERSAS 1	11
9.1 CANAL COM CHICANAS POSICIONADAS DE UMA MARGEM ATÉ A	
OUTRA	12
9.1.1 Características do Problema	12
9.1.2 Resultados e Discussões	14
9.2 CANAL COM CHICANAS DISTRIBUÍDAS ALTERNADAMENTE NAS SUAS	
MARGENS	19
9.2.1 Características do Problema	19
9.2.2 Resultados e Discussões	23
10 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	28
10.1 CONCLUSÃO	28
10.2 RECOMENDAÇÕES PARA PESQUISAS FUTURAS	29

GLOSSÁRIO	140
APÊNDICE A SUB-ROTINAS	142
APÊNDICE B OUTROS RETICULADOS SIMÉTRICOS	146
B.1 Tipos de Reticulados	. 146
B.1.1 Reticulado HPP/ $D2Q5$	. 146
B.1.2 Reticulado FHP/ $D2Q7$	. 147
B.1.3 Reticulado $D3Q15$	. 148
B.1.4 Reticulado $D3Q19$	. 149
B.1.5 Reticulado $D3Q27$	. 151
B.1.6 Reticulado $D1Q3$	. 151
B.1.7 Reticulado $D1Q5$	. 152

## 1 INTRODUÇÃO

Os métodos numéricos apresentam-se como ferramentas poderosas na dinâmica de fluidos computacional, ajudando a fornecer uma previsão do comportamento de problemas reais, complementando as análises teóricas e as técnicas experimentais. Em particular, o método do reticulado de Boltzmann (LBM) se destaca por unir a capacidade de representação das características físicas de fenômenos sem utilizar discretização das equações governantes. O LBM é baseado em uma dinâmica mesoscópica, que captura os detalhes microscópicos e os apresenta de forma macroscópica.

Nesta tese, apresentam-se simulações numéricas do escoamento em canais, governados pelas equações de águas rasas, que serão resolvidas por meio do método do reticulado de Boltzmann. Mais especificamente, o foco principal desta tese é desenvolver um modelo computacional que simule o escoamento em dois trechos do Canal da Piracema, localizado no parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu, no estado do Paraná, Brasil. Tratam-se do primeiro trecho do canal de iniciação e o primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira. Para atingir este objetivo, outros três estudos de caso foram abordados, com o objetivo de validar o modelo computacional desenvolvido. Portanto, no decorrer da pesquisa foram simuladas cinco aplicações, uma envolvendo o sistema de Navier-Stokes e quatro governadas pelas equações de águas rasas, e todas elas envolvem escoamentos em canais. Avaliou-se escoamentos unidimensionais e bidimensionais, com e sem a abordagem da turbulência. Nos estudos de caso mais complexos, incorporou-se ao código computacional uma rotina de estabilidade, que é aplicada em todos os pontos da malha para cada passo de tempo. Além disso, a abordagem da equação do reticulado de Boltzmann (LBE) foi feita de duas maneiras distintas. Na primeira abordagem utilizou-se o operador de colisão com um único tempo de relaxamento, desenvolvido independentemente por Bhatnagar, Gross e Krook, e Welander, que é chamado de BGK. Em uma segunda abordagem utilizou-se o operador de colisão com múltiplos tempos de relaxamento (MRT).

As equações mais gerais que modelam o escoamento de fluidos incompressíveis e Newtonianos, são as equações de Navier-Stokes juntamente com a equação da continuidade, que formam o sistema de Navier-Stokes. Este sistema possui características importantes, como a conservação da massa e da quantidade de movimento (TUCCI, 1998). No entanto, surgem dificuldades para resolver estas equações. A primeira delas é com relação ao reconhecimento adequado das características físicas do escoamento e sua descrição matemática. Outra dificuldade está relacionada com a solução das equações diferenciais (SZYMKIEWICZ, 2010).

Simplificações no sistema de Navier-Stokes, produzem outras equações, como por exemplo, equação de Euler (CHAUDHRY, 2008), modelo de Serre (TOSSOU, 2009) e

equações de águas rasas (HENDERSON, 1966). Estas equações possuem a capacidade de modelar escoamentos em rios e canais artificiais.

Em quatro dos cinco estudos de caso apresentados nesta tese, têm-se canais em que a água está em contato com a atmosfera e h << L, sendo h a profundidade do escoamento e L o comprimento das ondas oscilatórias. Nesta situação pode-se considerar que  $C = \sqrt{gh}$ , sendo C a celeridade das ondas e g a aceleração da gravidade (HENDERSON, 1966). Este escoamento é governado pelas equações de águas rasas. Escoamentos com superfície livre são de interesse de muitos pesquisadores, pois geralmente envolvem problemas de interesse para a sociedade (SZYMKIEWICZ, 2010). O escoamento da água em córregos, rios e correntes de água, são exemplo de canais naturais. Os sistemas de escoamento em canal artificial incluem sistemas de irrigação, linhas de esgoto, valas de drenagem, Canal da Piracema e calhas (CHAUDHRY, 2008).

Dos cinco estudos de caso que serão apresentados nesta tese, apenas dois deles possuem solução analítica. Portanto, não seria possível prever o comportamento desses escoamentos sem a ajuda dos métodos numéricos ou por meio da modelagem física.

A escolha do método numérico utilizado nesta tese se deu pelos seguintes motivos. O LBM é uma ferramenta numérica alternativa para simular escoamento de fluidos. Sua abordagem é diferenciada dos métodos numéricos convencionais, pois não utiliza discretizações nas equações governantes do escoamento. A ideia principal do LBM é fazer a ponte entre a microescala e a macroescala por não considerar o comportamento individual das partículas, mas o comportamento de um conjunto de partículas (CHEN; DOOLEN, 1998). O LBM possui a capacidade de lidar com geometrias complexas, fácil implementação e possibilidade de paralelização do código (CHEN; DOOLEN, 1998; ZHOU, 2004; PRES-TININZI et al., 2016). Deve-se também considerar as desvantagens, como nos casos em que é necessário um refinamento da malha, gerando alto custo computacional (ZHOU, 2004). Além disso, o método possui limitação na simulação de escoamento supercrítico bidimensional. Segundo Chopard, Pham e Lefèvre (2013), esta limitação está em estudo e são necessários mais testes.

A abordagem do LBM é mais simples do que a solução direta das equações diferenciais parciais de Navier-Stokes. Ao simplificar a física subjacente para que apenas as características principais (leis de conservação, condições de simetria no reticulado, as distribuições de equilíbrio adequados) necessárias para assegurar o comportamento exato macroscópico são mantidos, uma vantagem computacional (natureza do LBM permite paralelização) em relação aos métodos tradicionais pode ser alcançada (TEIXEIRA, 1998).

O método do reticulado de Boltzmann é originário historicamente do autômato celular do tipo gás de rede (LGCA). Este é uma classe particular dos autômatos celulares (CA). O autômato celular foi originalmente proposto por John von Neumann nos anos 1940. O objetivo principal de von Neumann era criar um modelo que, por meio de regras simples,

pudesse reproduzir fenômenos naturais e artificiais. Uma característica importante desse modelo é ser capaz de simular sistemas complexos que evoluem ao longo do tempo, partindo de regras simples. Mais adiante, em 1968, o matemático John Conway, desenvolve o Jogo da Vida, que consiste de autômatos celulares que tem por objetivo representar, por meio de regras matemáticas, sistemas complexos da evolução da vida, popularizando os autômatos celulares e provocando o interesse de pesquisadores de diversas áreas (WOLFRAM, 1983). Desde então, o modelo proposto foi bem desenvolvido e tornou-se uma ferramenta muito poderosa na simulação de vários problemas científicos (CHOPARD et al., 2002).

O primeiro modelo discreto para simulação de escoamentos de fluidos foi proposto por Hardy, Pazzis e Pomeau (1976), chamado HPP (recebeu este nome como homenagem aos seus criadores Hardy, Pazziz e Pomeau), baseado em uma rede quadrada com quatro possibilidade de movimento. Os LGCAs se tornaram populares na década de 1970, para simular escoamentos de fluidos e outros problemas físicos, no entanto, o primeiro modelo, o HPP, não recupera as equações de Navier-Stokes. Isto ajudou no desestímulo da utilização do LGCA. Porém, alguns anos depois, em 1983, o pesquisador Stephen Wolfram reavivou o interesse neste método (WOLF-GLADROW, 2005). Além do fato de que o HPP não recupera as equações de Navier-Stokes, devido à sua anisotropia, o modelo HPP não representa de forma precisa o comportamento de um gás, como sua difusão. Ratificando a importância dos modelos baseados no LGCA e pensando em resolver os problemas do modelo HPP, dez anos depois Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986) descobriram as simetrias que permitem recuperar corretamente as equações de Navier-Stokes. Com base em uma estrutura hexagonal de seis velocidades, o novo modelo proposto é chamado de FHP (recebeu este nome como homenagem aos seus criadores Frisch, Hasslacher e Pomeau). A boa simetria hexagonal, a estabilidade numérica e a recuperação assintótica das equações de Navier-Stokes ainda não tornavam o FHP um método numérico eficiente, pois ruídos estatísticos estavam presentes nas simulações, devido a presença da variável Booleana.

Os primeiros pesquisadores que conseguiram reduzir significativamente o ruído foram McNamara e Zanetti (1988) e foram também os primeiros que utilizaram funções contínuas de distribuição de partículas ao invés das funções Booleanas usadas no LGCA. Nascia então, o método do reticulado de Boltzmann. Embora os pesquisadores Frisch et al. (1987) e Wolfram (1986) haviam usado a equação do reticulado de Boltzmann como ferramenta analítica para calcular os coeficientes de viscosidade do LGCA, os primeiros pesquisadores que utilizaram a equação do reticulado de Boltzmann (LBE) como método numérico foram McNamara e Zanetti (1988). Ressalta-se que, originalmente o método do reticulado de Boltzmann surgiu em resposta aos problemas dos modelos baseados no LGCA (MCNAMARA; ALDER, 1993), e foi derivado do LGCA. Inicialmente o LBM possuía o mesmo operador de colisão do LGCA e toda sua teoria dependia da teoria do LGCA. Porém o operador de colisão do LGCA não era simples e nem eficiente. De acordo com Surmas (2010), quando pesquisadores conseguiram estabelecer uma conexão entre

a equação de Boltzmann e a equação do reticulado de Boltzmann, pôde-se utilizar as ferramentas da teoria cinética, como por exemplo, operador de colisão BGK.

De acordo com Golbert (2013), a ideia principal deste método é elaborar modelos cinéticos simplificados que incorporem a física essencial de processos microscópicos, ou mesoscópicos, de forma que as características na escala macroscópica sejam fiéis às equações desejadas, não sendo necessário fazer a discretização das equações que governam a dinâmica do fluido.

Em 1992, quatro anos depois da criação do método do reticulado de Boltzmann com operador de colisão BGK (LBM-BGK), foi proposta por d'Humières (1992) uma nova abordagem para o operador de colisão, o MRT, de forma que fosse possível melhor capturar as informações físicas de um escoamento e alcançar estabilidade numérica de maneira mais eficiente do que o LBM-BGK. Porém, foram Lallemand e Luo (2000) que fizeram uma análise sobre a estabilidade do método do reticulado de Boltzmann com múltiplos tempos de relaxamento (LBM-MRT), mostrando como melhorar o modelo de forma sistemática e coerente.

Com a nova abordagem para o operador de colisão, muitos problemas simulados com o LBM-BGK, foram novamente abordados, porém com o LBM-MRT e novos problemas foram resolvidos (PENG; ZHOU; BURROWS, 2011; LIU; LI; SHU, 2012; PENG et al., 2013; BUDINSKI, 2014; PENG et al., 2014; ASLAN; TAYMAZ; BENIM, 2014; ZHANG et al., 2016). Salienta-se sobre o fato de que o LBM-MRT necessita de mais tempo de processamento do que o LBM-BGK, porém ele permite diminuir o parâmetro de relaxamento de forma muito próxima do limite inferior, dependendo do problema, além de capturar melhor as informações físicas do escoamento (PENG et al., 2014).

Além do operador de colisão BGK e do MRT, tem-se também operador de colisão com dois tempos de relaxamento (TRT) (TUBBS, 2010). Pode-se observar esta nova abordagem no trabalho de Peng, Zhang e Zhou (2016), onde os autores presentam a simulação de problemas governados pelas equações de águas rasas.

Nos últimos anos, o método têm sido estudado por muitos pesquisadores e tornouse uma área de pesquisa de grande potencial na dinâmica de fluidos computacional, como por exemplo, o LBM obteve êxito na modelagem de escoamento com distribuição não-hidrostática de pressão (ZHAO et al., 2013), fluxo sanguíneo (PELLICCIONI; CERROLAZA; HERRERA, 2006; JANELA et al., 2010; GOLBERT; BLANCO; FEIJóO, 2012; GOLBERT, 2013), escoamentos multifásicos em meios porosos (BENZI; SUCCI; VERGASSOLA, 1992; SURMAS, 2010), escoamento de fluidos com transferência de calor no interior de microcanais (ZARITA; HACHEMI, 2014), aplicações nas indústrias aeroespacial e automotiva (SUCCI, 2001; AMARAL, 2015), modelar problemas complexos de advecção-dispersão em águas rasas (LI; HUANG, 2008), modelo onda cinemática (THANG et al., 2010; ZHANG; FENG; YANG, 2015; LIU, 2015; LIU et al., 2015; GALINA et al.,

2017) e problemas térmicos (PHILIPPI et al., 2006). Acoplamento entre o LBM e outros métodos numéricos também apresentam bons resultados na dinâmica computacional de fluidos (BETTAIBI; KUZNIK; SEDIKI, 2014; ILIO et al., 2017). Escoamentos governado pelas equações de águas rasas também foram abrangidos pelo LBM e as simulações apresentaram bons resultados (ZHOU, 2002a; ZHOU, 2004; ZHOU et al., 2010; PENG; ZHOU; BURROWS, 2011; PENG et al., 2013; BUDINSKI, 2014; PENG et al., 2014; LA ROCCA et al., 2015; LI; HUANG; LI, 2015; PRESTININZI et al., 2016; ZHANG et al., 2016; GALINA et al., 2016; ZHAO; HUANG; LI, 2017; ROSIS, 2017; CARGNELUTTI et al., 2017b; CARGNELUTTI et al., 2017a).

## 1.1 PROBLEMAS DE PESQUISA

Os principais problemas de pesquisa solucionados nesta tese são baseados em trechos de canais, que fazem parte do sistema de transposição de peixes (Canal da Piracema) construído na Usina Hidrelétrica de Itaipu, no estado do Paraná, Brasil em 2002, escolhidos pela sua importância e devido às suas características, são eles:

- Primeiro trecho do canal de iniciação, com comprimento  $L_x = 33 \,\mathrm{m}$ , largura  $L_y = 5 \,\mathrm{m}$  e chicanas submersas posicionadas a cada 5 m de uma margem até a outra do canal. Pode-se observar uma vista panorâmica do canal de alimentação em trincheira na Figura 1;
- Primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira, com comprimento  $L_x = 30 \,\mathrm{m}$ , largura  $L_y = 8 \,\mathrm{m}$  e chicanas submersas posicionadas a cada  $4 \,m$  distribuídas alternadamente em relação as margens do canal. Pode-se observar uma vista panorâmica do canal de iniciação na Figura 2

O Canal de Piracema foi construído com o objetivo de permitir que diversas espécies de peixes possam retomar a rota migratória que utilizavam antes da construção da Usina Hidrelétrica de Itaipu. Estudos foram realizados e verificou-se que são necessárias algumas condições para a acorrência da Piracema (MULLER; GIBERTONI, 2002), descritos a seguir:

- i) velocidades médias não superiores a 3 m/s nas seções transversais ao longo do Canal da Piracema;
- ii) lâminas de águas (profundidade da água) superior a 0,8 m;
- iii) áreas molhadas nas seções transversais superiores a  $6 \,\mathrm{m}^2$  (pode ser de  $4 \,\mathrm{m}^2$  em trechos curtos).



Figura 1 – Vista panorâmica do canal de alimentação em trincheira Fonte: http://jie.itaipu.gov.br/ (acesso em 18/05/2017).



Figura 2 – Vista panorâmica do canal de Iniciação Fonte: http://jie.itaipu.gov.br/ (acesso em 18/05/2017).

O não atendimento aos requisitos citados somente será permitido em trechos bastante curtos e em condições especiais, como por exemplo, sobre os obstáculos (chicanas) construídas ao longo dos canais de alimentação, canal de iniciação e do rio Bela Vista.

Em específico, o trecho do canal de alimentação em trincheira que foi analizado nesta tese possui características especiais. A inclinação neste trecho é a maior quando comparada com outros trechos ao longo do Canal da Piracema. Por este motivo, foram construídas chicanas, com uma pequena abertura lateral, espalhadas alternadamente nas margens do canal. No canal de iniciação, as chicanas estão localizadas de uma margem até a outra, sem abertura lateral. O objetido das chicanas é reduzir a velocidade da água, e portanto, permitir a ocorrência da Piracema.

Para que o objetivo principal desta tese fosse atendido, foram necessárias simulações numéricas prévias, todas com o objetivo de calibrar o modelo desenvolvido e validá-lo. As simulações envolveram:

- i) Simulação bidimensional do escoamento de Poiseuille por meio do LBM-BGK, sem abordagem da turbulência. Este escoamento é governado pelas equações de Navier-Stokes;
- ii) Simulação unidimensional de uma onda no mar próximo à costa em uma região relativamente curta, com leito regular e profundidade variável, por meio do LBM-BGK sem abordagem da turbulência;
- iii) Simulação bidimensional do escoamento de água ao redor de um cilindro localizado no centro de canal retangular, por meio do LBM-BGK e LBM-MRT, com abordagem da turbulência e com rotina de estabilidade.

Os três estudos de caso, são problemas clássicos da Engenharia Hidráulica. O primeiro e o segundo possuem solução analítica e o terceiro possui dados experimentais, obtido por meio de simulação em laboratório (YULISTIYANTO, 1997), e portanto, foram usados para calibrar o modelo computacional estabelecido por meio do LBM.

O mesmo modelo computacional desenvolvido para o problema *iii*), também foi usado nos estudos de caso referentes ao Canal da Piracema. As alterações efetuadas foram: adaptação para a nova geometria do canal, os tipos de obstáculos e adequação dos parâmetros de simulação para obter a estabilidade numérica.

Depois de obtidas as simulações dos três estudos de caso e com o modelo computacional calibrado, optou-se por simular o canal de iniciação, que também faz parte do Canal da Piracema. Neste canal, a inclinação é menor do que no primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira, a altura das chicanas também é menor e as chicanas não possuem abertura lateral. As características do canal de iniciação, tornam o escoamento menos complexo do que o escoamento no primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira.

Após ser obtida a simulação do primeiro trecho do canal de iniciação, modificouse a geometria do canal adaptando-o para realizar a simulação do primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira. Parâmetros de simulação foram ajustados para obter estabilidade numérica.

#### 1.2 OBJETIVOS

### 1.2.1 Objetivo Geral

Simular o escoamento em canais com obstáculos submersos por meio do método do reticulado de Boltzmann com múltiplos tempos de relaxamento e abordagem da turbulência.

## 1.2.2 Objetivos Específicos

- i) Implementar um modelo computacional baseado no LBM e incorporar ao modelo as condições para garantir a estabilidade da simulação;
- ii) Apresentar informações sobre a abordagem das condições de contorno para problemas envolvendo escoamentos em canais;
- iii) Incorporar ao modelo uma técnica de simulação de grandes escalas (LES) para abordar a turbulência do escoamento com mais eficiência e melhorar a estabilidade das simulações;
- iv) Adaptar o modelo desenvolvido tanto para operador de colisão BGK como também para o MRT;
- v) Ajustar os parâmetros de simulação de acordo com as características dos problemas, de forma a obter estabilidade numérica;
- vi) Coletar e organizar informações sobre os reticulados mais usados no método;
- vii) Utilizar problemas tradicionais da Engenharia Hidráulica para confirmar a eficiência do modelo desenvolvido e calibrá-lo;
- viii) Utilizar os modelos computacionais desenvolvidos, tanto com operador de colisão BGK como também com o MRT, para avaliar o escoamento em um trecho do canal de iniciação e no primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira, e verificar se as condições de acorrência da Piracema estão sendo atendidas.

#### 1.3 JUSTIFICATIVA

Duas linhas principais norteiam este trabalho de tese. A primeira faz referência ao método numérico escolhido para obter as simulações e a segunda está relacionada com a importância do Canal da Piracema.

O método do reticulado de Boltzmann é uma ferramenta alternativa potencial para representar a dinâmica computacional de fluidos, pois, diferentemente dos métodos numéricos tradicionais, o LBM não utiliza discretizações nas equações governantes do

escoamento. Esta característica torna o método com código computacional de fácil implementação. Além disso, o método possui etapas bem definidas, possibilidade de paralelização e capacidade de lidar com geometrias complexas. Ainda, permite alterar o termo de força, incorporando ao método as características físicas do escoamento (PRESTININZI et al., 2016).

O Canal da Piracema possui grande importância para a região, pois permite que diversas espécies de peixes possam retomar a rota migratória que utilizavam antes da construção da Usina Hidrelétrica (FRIEDRICH et al., 2007; PAULA, 1998). A principal contribuição desta tese está no fato de que não existem simulações numérias bidimensionais para o Canal da Piracema disponíveis na literatura. Portanto, apresentou-se a simulação bidimensional por meio do LBM e verificou-se se o LBM foi capaz de obedecer as condições impostas para a ocorrência da Piracema. O modelo computacional desenvolvido também verifica, se as chicanas exercem a sua função de reduzir a velocidade da água. Procurou-se observar, se as característica do escoamento real foram representadas no LBM, como por exemplo, profundidade da água menor, e velocidade maior em cima e nas aberturas laterais das chicanas.

## 1.4 ORGANIZAÇÃO DA TESE

Este trabalho de tese está organizado da seguinte forma: No capítulo 2 tem-se uma revisão bibliográfica onde pode-se observar considerações sobre as aplicações do LBM, comentários sobre trabalhos anteriores, desde o surgimento do método na década de 80, e os principais trabalhos envolvendo escoamento de águas rasas resolvidos por meio da LBM-BGK e o LBM-MRT. No capítulo 3 encontram-se as principais considerações sobre a teoria das equações de águas rasas. O referencial teórico envolvendo o caminho desde os autômatos celulares, passando pela teoria cinética e indo até o início do método do reticulado de Boltzmann, compõem o capítulo 4. O método do reticulado de Boltzmann é abordado no capítulo 5 sob o ponto de vista do operador de colisão BGK e do MRT. Todas as condições e contorno utilizadas neste trabalho de tese são apresentadas no capítulo 6. A abordagem da turbulência no LBM e algoritmos para o LBM-BGK e o LBM-MRT podem ser vistos no capítulo 7. No capítulo 8 encontram-se as simulações de três estudos de caso, utilizados para validar o modelo desenvolvido. O capítulo 9 dedica-se a apresentação, resultados e discussões das duas aplicações principais, objeto de estudo desta tese. Têm-se as conclusões e recomendações no capítulo 10. Logo depois das referências bibliográficas, optou-se por um glossário. Sub-rotinas de estabilidade, transmissão e colisão, foram apresentadas no apêndice A. Outros reticulados assimétricos podem ser vistos no apêndice B e no apêndice C, foram listados os trabalhos desenvolvidos, publicados em periódicos, congressos e simpósios.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O método do reticulado de Boltzmann é baseado em equações cinéticas utilizando função contínua de distribuição de partículas. Durante os últimos anos, ganhou a atenção de muitos pesquisadores que investigaram a aplicabilidade do LBM para simulação de escoamentos em microescala (GOKALTUN; DULIKRAVICH, 2014).

Atualmente é possível formular um modelo simples para sistemas complexos e esta formulação é possibilitada pelo desenvolvimento de técnicas computacionais. Esta é a ideia básica de um modelo finito de espaço-tempo discreto, ou seja, um autômato celular (CA), um autômato celular do tipo gás de rede (LGCA) e o LBM. Em particular, o LBM é formulado como um modelo simples, eficiente e preciso para os escoamentos de fluidos. Embora existam relações estreitas entre os três modelos, eles são desenvolvidos em três áreas de investigação independentes (ZHOU, 2004).

Os primeiros pesquisadores que usaram o LBM para o estudo das propriedades hidrodinâmicas de um fluido como alternativa ao LGCA foram McNamara e Zanetti (1988). A proposta é modelar o gás em rede com a equação de Boltzmann. Esta abordagem elimina significativamente o ruído estatístico e, portanto, permite simulações que exigem menos tempo de processamento.

O modelo proposto por McNamara e Zanetti (1988) compartilha muitas características do LGCA e é aplicável a qualquer autômato celulares do tipo gás em rede. Enquanto que no LGCA as variáveis são Booleanas, no LBM, a grandeza calculada,  $f_{\alpha}(\vec{x},t)$  é um número real entre 0 e 1 que representa a probabilidade de encontrar uma partícula com velocidade  $e_{\alpha}$  no nó  $\vec{x}$ , no tempo t e é conhecida como função de distribuição de velocidades. O que os autores fazem é uma adaptação (evolução) do método baseado no LGCA traduzindo essa evolução no método do reticulado de Boltzmann.

Uma característica, talvez a mais notável do LGCA, que foi perdida na transição para o LBM, trata-se do baixo custo computacional. Além disso, este primeiro modelo do reticulado de Boltzmann, elimina alguns aspectos negativos do seu antecessor, carrega alguns traços positivos e outros negativos. Quanto aos positivos, o LBM trás a estabilidade numérica e a separação das etapas de colisão e propagação. Com relação às negativas, percebe-se a dependência de pressão com a velocidade, a ausência de invariância galileana e a limitação nos valores da viscosidade (MCNAMARA; ZANETTI, 1988).

Dois anos antes, um importante trabalho foi publicado por Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986). Os pesquisadores reconheceram que a simetria do reticulado é importante para recuperar as equações de Navier-Stokes. Pela primeira vez as equações de Navier-Stokes foram obtidas a partir do esquema autômato celular do tipo gás em rede, o qual

ficou conhecido por FHP. O reticulado neste modelo é hexagonal com 7 velocidades (1 nula e 6 não nulas). Este trabalho foi um grande passo que abriu várias ramificações. Uma delas é o método do reticulado de Boltzmann (ROTHMAN; ZALESKI, 1994).

Esquemas baseados no autômato celular do tipo gás em rede deixaram de ser atrativas, pois uma dificuldade é o nível elevado de flutuações do fluido associados com o número limitado de pontos de uma rede representada computacionalmente, ou seja, não é possível representar em uma malha discretizada, todas as partículas e suas flutuações. Como consequência, estruturas baseadas no LGCA deixaram de ser consideradas, uma alternativa numérica eficiente quando comparada com outros métodos numéricos convencionais. Desta forma, uma alternativa é abordar o problema utilizando funções distribuição de partículas, que representam uma média por amostra, ao invés do movimento individual das partículas (HIGUERA; JIMÉNEZ, 1989).

A simplificação do operador de colisão é feita através da expansão da função de distribuição em torno do seu valor de equilíbrio local, desde que os números de Knudsen e Mach sejam pequenos. A equação que resulta do uso desse operador foi chamada de equação do reticulado de Boltzmann quase-linear. Com a existência de termos não-lineares, este procedimento tornou a etapa de colisão mais eficiente permitindo o uso do LBM em problemas tridimensionais, caso que não era possível na abordagem fornecida por McNamara e Zanetti (1988). As simulações foram feitas para escoamentos em duas e três dimensões e os resultados foram comparados com esquemas baseados no método das diferenças finitas e mostraram boas concordâncias. Para duas dimensões, McNamara e Zanetti (1988) fizeram a simulação de escoamento sobre um cilindro circular utilizando o conjunto de regras de colisão FHP-III. No caso do escoamento em três dimensões, a simulação foi feita sobre uma asa delta simétrica (HIGUERA; JIMÉNEZ, 1989).

Motivado pelo operador quase-linear construído por Higuera e Jiménez (1989), foi sugerido uma forma linear para o operador de colisão usando um único tempo de relaxamento para o equilíbrio local. Esta forma para o operador de colisão havia sido utilizada por Bhatnagar, Gross e Krook (1954), com o objetivo de simplificar a equação de Boltzmann e é conhecido como operador BGK (KREMER, 2005). Chen et al. (1991) mostrou os resultados positivos e uma série de vantagens para simulações de problemas envolvendo fluidos magneto-hidrodinâmicos (MHD) quando abordados pela equação do reticulado de Boltzmann em relação a abordagem por autômatos celulares. Higuera e Jiménez (1989) considera um modelo simples e eficaz de relaxamento para o operador de colisão. As simulações incluem o problema clássico do escoamento linear de Hartmann e ligações magnéticas não-lineares. O modelo criado para duas e três dimensões, indica que o método captura a física básica do MHD, tanto em termos qualitativos como quantitativos.

Um importante resultado foi atribuído a Frisch (1991) e Benzi, Succi e Vergassola (1992). Mostrou-se que, em condições adequadas, a macrodinâmica do modelo baseado na

equação do reticulado de Boltzmann converge para as equações de Navier Stokes. Frisch (1991) apresenta a relação entre a equação do reticulado de Boltzmann e as equações de Navier Stokes, por meio do modelo bidimensional de seis velocidades FHP-I.

Ainda em 1990, o esquema baseado na equação do reticulado de Boltzmann foi testado e sua eficiência numérica foi confirmada na simulação da hidrodinâmica em problemas bidimensionais. Benzi e Succi (1990), escolheram o caso de escoamentos bidimensionais contidos em caixa quadrada com condições de contorno periódicas. A principal pergunta a ser respondida foi se o LBM é capaz de reproduzir as propriedades estatísticas da turbulência. As simulações foram comparadas com outros trabalhos e apresentaram um aparente desacordo com os resultados de Legras, Santangelo e Benzi (1988), porém olhando de forma geral os resultados são coerentes com as características conhecidas da turbulência.

Qian, D'Humières e Lallemand (1992) apresentaram uma abordagem semelhante a de Chen et al. (1991). Qian, D'Humières e Lallemand (1992) sugeriram uma nova forma para a distribuição de equilíbrio, ou seja, a distribuição de equilíbrio utilizada no operador BGK não precisa ser necessariamente a mesmo usada no esquema autômato celular do tipo gás em rede. Com uma distribuição de equilíbrio adequadamente escolhida, as equações de Navier-Stokes são obtidas a partir da equação cinética BGK com aproximação de segunda ordem. O objetivo foi obter um esquema numérico eficiente para a simulação da dinâmica de fluidos.

Nesta nova abordagem para a distribuição de equilíbrio, os reticulados utilizados não necessitam mais seguir os requisitos de isotropia do LGCA, sendo os pesos  $w_{\alpha}$  escolhidos de maneira a certificar a isotropia das equações macroscópicas. Além disso, essa nova concepção trouxe proveitos como a eliminação dos termos que dão origem à ausência de invariância galileana e a dependência da pressão com a velocidade. Os resultados encontrados são compatíveis com as expectativas geradas quando os cálculos teóricos foram desenvolvidos (QIAN; D'HUMIÈRES; LALLEMAND, 1992).

Benzi, Succi e Vergassola (1992) simularam problemas envolvendo turbulência e escoamentos com geometrias complexas. Eles perceberam a diminuição do ruído estatístico e maior flexibilidade na escolha dos parâmetros de simulação. Do ponto de vista físico, a equação do reticulado de Boltzmann é uma ferramenta simples para entender algumas propriedades da mecânica estatística fora do equilíbrio.

McNamara e Alder (1993) apresenta considerações sobre o autômato celular do tipo gás em rede, mostrando suas vantagens, apontando as dificuldades que motivaram o surgimento do LBM, arrolando alguns problemas herdados do LGCA e fornecendo possibilidades para resolver estes problemas. Além disso, através de uma análise teórica, os pesquisadores mostraram que é possível a criação de um LBM térmico.

De acordo com McNamara e Alder (1993), o LGCA surgiu como uma alternativa aos métodos tradicionais para resolver numericamente a equação de Navier-Stokes, com a vantagem de estabilidade numérica juntamente com simplicidade de implementação computacional. Porém, apresenta ruído estatístico (erro de medição devido a utilização de variáveis Booleanas) e para número de Reynolds elevado, o LGCA não foi eficiente. Em resposta para estas e outras dificuldades, surgiu o LBM, originalmente derivado do LGCA, que permitiu simular problemas com elevados números de Reynolds, com eficiência computacional e também com bons resultados quando comparados com os métodos tradicionais. Além disso, carrega consigo a estabilidade numérica do LGCA, que é garantida pelo teorema-H.

Entretanto, o LBM carrega consigo alguns defeitos de LGCA. Ocorrem limitações para simulações com viscosidade elevada. Para superar esta limitação, é necessário fazer uma modificação no processo de colisão. A abordagem escolhida por McNamara e Alder (1993) foi utilizar um operador colisão, como um processo linear, atuando sobre toda a porção de não-equilíbrio da função distribuição, em cada local. Para que o método produza comportamento hidrodinâmico correto é necessário uma seleção adequada da função distribuição local de equilíbrio. Ela é obtida através da aplicação do procedimento de Chapman-Enskog. Obtém-se um conjunto de restrições aos quais a distribuição de equilíbrio deve obedecer para que o comportamento macroscópico seja comandado por essas equações.

Um ponto importante que se deve analisar é o tipo de reticulado usado no LBM. Análises teóricas e estudos numéricos indicam que tanto o reticulado quadrado de 9 velocidades como a rede hexagonal com 7 velocidades tem simetria suficiente no reticulado para preservar corretamente as equações de escoamento. No entanto, Skordos (1993) mostrou que o reticulado quadrado de 9 velocidades (1 velocidade nula e 8 não nulas) fornece resultados mais precisos do que com a rede hexagonal de 7 velocidades (1 velocidade nula e 6 não nulas).

Skordos (1993) encontrou uma nova abordagem de implementação das condições iniciais e de contorno. O LBM representa o estado do fluido, usando um conjunto de números reais, que são chamados de populações. As populações são transportadas por convecção a partir de um ponto do reticulado para outro, de acordo com a unidade do reticulado e em intervalos de tempo discretos. Foi proposto o mapeamento inverso com o objetivo de implementar as condições iniciais e de contorno de forma mais precisa. O mapeamento inverso pode ser obtido pela expansão de Chapman-Enskog, porém neste trabalho o pesquisador apresentou uma nova abordagem que baseia-se num operador de colisão prolongado/estendido que utiliza os gradientes de velocidade do fluido. O novo reticulado hexagonal proposto é preciso para implementar condições iniciais e de contorno, porém perde precisão quando reiterado muitas vezes.

Rothman e Zaleski (1994) fez um levantamento de algumas ramificações resultantes durante os oito anos desde o surgimento do LBM. O principal foco é o modelo FHP que é conhecido como autômato celular do tipo de gás em rede. Este modelo possibilitou ramificações interessantes. Uma delas é que dinâmicas moleculares reais não são necessárias para criar um modelo microscópico com comportamento macroscópico hidrodinâmico. Outra ramificação importante é que os esquemas baseados nos autômatos celulares do tipo gás em rede representam uma alternativa para simulações numéricas envolvendo escoamentos hidrodinâmicos. Os objetivos principais de Rothman e Zaleski (1994) são: dar uma visão geral e ampla dos resultados obtidos desde a introdução dos autômatos celulares do tipo gás de rede como um modelo que é possível obter as equações de Navier-Stokes; avaliar objetivamente o progresso que está sendo obtido com uso de modelos de gás em rede de separação de fases e apontar algumas áreas interessantes para investigação.

Hou et al. (1995), demonstrou a capacidade do LBM. Foram feitas simulações para o escoamento bidimensional incompressível em cavidade quadrada com tampa móvel ( $Driven\ Cavity\ Flow$ ) com número de Reynolds superior a  $1\times 10^5$ . As simulações produzidas pelo LBM-BGK foram comparadas com métodos tradicionais. Os resultados da simulação confirmaram a precisão do LBM, quando comparado com métodos tradicionais. Este resultado reforçou a aplicação do método em sistemas complexos.

De acordo com He e Luo (1997), a LBE é interpretada como uma forma simplificada da equação de Boltzmann na qual a maioria dos detalhes do movimento molecular são removidos, exceto aqueles que são essenciais para recuperar as equações de Navier Stokes. Isto quer dizer que a LBE está ligada diretamente com a equação de Boltzmann, do ponto de vista conceitual. He e Luo (1997) mostraram que alguns modelos que utilizam a equação do reticulado de Boltzmann com aproximação BGK, podem ser obtidos a partir da equação de Boltzmann, com operador de colisão BGK, empregando uma discretização combinada no tempo, na posição espacial e do espaço de velocidades. Foi desenvolvido um algoritmo, com malha arbitrária e foram feitos testes com o escoamento sobre expansões bruscas (backward facing step flow). A proposta de He e Luo (1997b) foi simular o escoamento incompressível. A ideia principal é eliminar explicitamente o termo de  $O(M^2)$ , onde M é o número de Mach, devido a oscilação de densidade nos esquemas do LBM existentes. As equações de Navier-Stokes incompressíveis são derivadas do esquema baseado no reticulado de Boltzmann incompressível através do procedimento de Chapman-Enskog. Os casos simulados para escoamentos estável e instável são, respectivamente: do plano de escoamento de Poiseuille acionado pelo gradiente de pressão ou um perfil de velocidade fixa na entrada, bem como do 2D Womersley flow são apresentados. Os resultados numéricos são encontrados em excelente acordo com a teoria e o modelo LBE incompressível desenvolvido neste trabalho pode ser aplicado, em geral, para escoamentos instáveis e estáveis.

Teixeira (1998) propôs uma extensão do LBM para permitir a incorporação de

problemas envolvendo turbulência. A pesquisa se concentrou em ampliar ainda mais a capacidade de simulação do fenômeno da turbulência com o LBM. Para isto, duas abordagens foram incorporadas ao LBM. O primeiro é o tipo mais simples de modelo para a turbulência e é chamado de modelo algébrico. Também conhecido como modelo de comprimento de mistura de Prandtl. Este modelo proporciona uma maneira direta de calcular a viscosidade turbulenta e se tornou uma referência na modelagem desta. O segundo tipo de abordagem é o uso de modelos de duas equações para a turbulência.

A abordagem de escoamentos turbulentos com geometria curvilínea complexa e utilizando o LBM foi realizada por meio de um algoritmo multiescala (FILIPPOVA et al., 2001). De acordo com (FILIPPOVA et al., 2001), as aplicações do LBM estavam restritas apenas a problemas em que a malha considerada era uniforme. Esta limitação foi contornada com a combinação do LBM com outros métodos numéricos, como os volumes finitos, elementos finitos e técnicas de diferenças finitas. Esta fusão ampliou consideravelmente o leque de aplicação do LBM a um custo bastante razoável em termos de complexidade computacional. No entanto, estas fusões podem gerar grandes deformações na malha e apresentar instabilidades numéricas. Outra forma de contornar a limitação da malha uniforme foi utilizar malhas não-estruturadas, onde o número de vizinhos de um nó pode mudar dependendo da posição. A abordagem em que o número de vizinhos se mantém inalterado é largamente utilizada, porém, o espaçamento é refinado. Esta abordagem é um caso específico de um quadro mais geral conhecido como algoritmo multiescala. Foram apresentados dois exemplos de escoamentos ao redor de aerofólios, com número de Reynolds  $3 \times 10^6$ , simulados por meio do LBM-BGK com algorítmo multiescal. O código multiescala desenvolvido é claramente mais complexo do que o esquema padrão do LBM, porém é mais simples do que os códigos utilizando abordagens como malha não-estruturados e refinado localmente.

Até 1992, pode-se perceber que o operador de colisão utilizado no LBM é o BGK, que é calculado como o produto da matriz de colisão e um vetor que representa a diferença entre estado local das partículas e o seu estado de equilíbrio (GINZBURG, 2005). Muitas simulações foram desenvolvidas por meio do LBM-BGK e deram origem a excelentes trabalhos, porém o sucesso do LBM-BGK foi restrito devido a presença de instabilidades numéricas e principalmente a falta de condições necessárias para melhorar a estabilidade das simulações (LALLEMAND; LUO, 2000; D'HUMIÈRES et al., 2002). Neste sentido, encontrar uma forma de capturar, de forma mais real e eficiente, a física envolvida no escoamento permitindo estabelecer caminhos para alcançar estabilidade numérica, passou a fazer parte do interesse de pesquisadores. Uma maneira de fazer esta captura, foi proposta por d'Humieres (D'HUMIÈRES, 1992), introduzindo uma nova abordagem para o operador de colisão. No entanto, foram Lallemand e Luo (LALLEMAND; LUO, 2000) que fizeram uma análise sobre a estabilidade do LBM-MRT, mostrando como melhorar o modelo de forma sistemática e coerente.

A proposta do LBM-MRT é construir um modelo hidrodinâmico generalizado que permite simular um escoamento de fluido, capturando a física do problema por meio de parâmetros ajustáveis que possuem mais liberdade. Um modelo hidrodinâmico generalizado é caracterizado pela dispersão, dissipação, anisotropia, falta de invariância de Galileu e instabilidades dos modelos baseados no LBM. Os parâmetros ajustáveis são utilizados para otimizar as propriedades do modelo através de uma análise sistemática da hidrodinâmica generalizada do modelo. De forma geral, a análise hidrodinâmica permite melhorar as propriedades do LBM obtendo resultados mais próximos do real, pois agrega mais informações físicas do problema (LALLEMAND; LUO, 2000).

O LBM-BGK é construído com base em um conjunto de  $\alpha$  velocidades discretas,  $\{e_{\alpha}/\alpha=0, 1, ..., (\alpha-1)\}$ , com funções de distribuição  $\{f_{\alpha}/\alpha=0, 1, ..., (\alpha-1)\}$  em um espaço vetorial *i*-dimensional  $R^i$  baseado no conjunto discreto de velocidade. Por outro lado, pode-se também construir a etapa de colisão com base em um espaço de momentos de  $f_{\alpha}$ . Ou seja, migra-se do espaço de velocidades, utilizado do LBM-BGK, para o espaço dos momentos, no LBM-MRT (LALLEMAND; LUO, 2000).

A justificativa para migrar do espaço de velocidades para o espaço dos momentos é fornecida a seguir. Percebe-se que, no contexto da teoria cinética, vários processos físicos envolvendo fluidos, podem ser aproximados por acoplamento ou interação entre os "modos" (por exemplo, os modos hidrodinâmicos são combinações lineares de massa e momentos) do operador de colisão e esses "modos" estão diretamente relacionados com os momentos. Assim, a representação por meio de momentos proporciona uma forma de incorporar, de maneira mais efetiva, a física no LBM. O significado físico dos momentos são as quantidades hidrodinâmicas, seus fluxos, etc., e os parâmetros de relaxamento dos momentos estão diretamente relacionados com os vários coeficientes de transporte. Assim, é possível controlar cada "modo" independente. Esta abordagem supera deficiências do LBM-BGK, como por exemplo, o número de Prandtl fixo. Este número é fixo devido a utilização de um único tempo de relaxamento (LALLEMAND; LUO, 2000).

Em 2002 foram apresentados os primeiros trabalhos envolvendo as equações de águas rasas resolvidas por meio do LBM. Zhou (2002a) apresentou simulação de problemas clássicos de Engenharia Hidráulica governados pelas equações de águas rasas. Foram realizadas as seguintes simulações: escoamento em canal retangular com obstáculo no fundo e vazão constante, propagação de uma onda em uma região costeira relativamente curta, com leito regular e profundidade variável (tidal wave flow), escoamento ao redor de um cilindro e escoamento em canal com expansão abrupta. Para obter as simulações, desenvolveu-se um modelo chamado de LABSWE, limitado para escoamentos subcríticos e que não considera o efeito da turbulência. Em alguns casos, os resultados foram comparados com a solução analítica, e em outros, foram comparados com dados experimentais. As análises mostram concordância satisfatória.

Ainda em 2002, Zhou (2002b) apresentou o modelo LABSWE $^{TM}$ , que incorpora o efeito da turbulência e que também é limitado aos escoamentos subcríticos. Este modelo representou um grande avanço para o estudo dos problemas envolvendo as equações de águas rasas, pois a maioria dos escoamentos na natureza são turbulentos. Dois problemas foram abordados, escoamento em um canal retangular sem obstáculos (flow in a Straight Channel) e escoamento sobre uma ilha submersa (flow over a Submerged Island). Os resultados indicaram que o LBM possui bom potencial para simulação de problemas governados pelas equações de águas rasas.

A partir do desenvolvimento do modelo baseado no LBM para águas rasas sem abordagem da turbulência (LABWSE) e com abordagem da turbulência (LABWSE $^{TM}$ ), muito outros trabalhos surgiram fazendo modificações nos modelos propostos por Zhou (2002a), Zhou (2002b) e Zhou (2004). Lista-se a seguir, algumas pesquisas baseadas nestes modelos e novas abordagens para resolver escoamentos governados pelas equações de águas rasas.

Zhong, Feng e Gao (2005) propõe uma abordagem, por meio do LBM-BGK, para simular problemas governados pelas equações de águas rasas que descrevem a circulação no oceano provocada pelo vento. Zhong, Feng e Gao (2005) não leva em consideração as ferramentas propostas por Zhou (2004) e fornece um esquema totalmente explícito para o LBM. Os resultados numéricos mostram que o modelo desenvolvido captura a física correta para escoamentos laminares, transientes e turbulentos.

Thömmes, Seaïd e Banda (2007) demonstrou a capacidade do LBM-BGK na simulação de problemas complexos governados pelas equações de águas rasas e que possuem topografia irregular. Thömmes, Seaïd e Banda (2007) abordou do termo de força, de forma a permite um tratamento direto dos termos de origem sem se basear em técnicas de discretização complicadas. A tensão de cisalhamento com o fundo do leito e com o vento são incorporadas de forma direta no termo de força da equação do reticulado de Boltzmann, sem tratamento especial. O modelo proposto foi validado por meio de problemas que possuem solução analítica, fluxo de maré e escoamento constante em canal com soleira no fundo. Os resultados indicam que o LBM-BGK é capaz de representar o comportamento físico dos problemas simulados.

Li e Huang (2008) estudaram o problema de advecção e difusão anisotrópica usando LBM para escoamentos governados pelas equações de águas rasas. Foram usados operadores de colisão diferentes, o MRT para o campo de escoamento e o TRT para o campo de dispersão de poluentes. Os resultados numéricos obtidos no trabalho foram comparados com os obtidos por meio do método dos volumes finitos e mostram que o LBM possui capacidade satisfatória para modelar problemas complexos de advecção-difusão em águas rasas. Os resultados da concentração em um canal de profundidade de água variável indicam que as variações da profundidade da água não podem afetar a conservação do

modelo e a comparação com o método tradicional indica que o modelo tem a capacidade de simular um problemas de topografia complexa.

Liu, Zhou e Burrows (2009) utiliza o LBM para águas rasas com abordagem da turbulência (LABWSE $^{TM}$ ) na simulação numérica de um estudo de caso, composto por um canal principal e uma planície de inundação, e com altos números de Reynolds. O reticulado usado foi o D2Q9 (reticulado bidimensional com 9 possibilidades de movimento para as partículas) e os resultados das simulações numéricas são comparados com os dados experimentais disponíveis na literatura, mostrando que o LABSWE $^{TM}$  é capaz de modelar as características da turbulência de escoamentos em canais compostos e é suficientemente preciso para aplicações práticas em Engenharia. Além disso, o tempo de processamento é consideralmente menor do que nas simulações tridimensionais.

Zhou et al. (2010), desenvolveram a pesquisa pautada no escoamento em canal utilizando o LBM. As simulações propostas ratificam a importância e eficiência do método numérico LBM na dinâmica de fluidos computacional. O método é eficiente com seu tratamento simples de condições de contorno e processamento paralelo, e é adequado para escoamentos com geometrias complexas. Utilizou-se o modelo com e sem a abordagem da turbulência e considerou-se o reticulado D2Q9. As condições de contorno são de nãoescorregamento, adequadas para escoamentos em canais. No caso de escorregamento ou semi-escorregamento, o esquema elastic-collision proposto por Zhou (2001) é utilizado. Para aumentar a precisão de escoamentos em fronteiras curvas, a condição de contorno de segunda ordem pode ser aplicada. Para investigar um escoamento instável, uma condição inicial correta também é importante e pode ser conseguida através da função de distribuição de equilíbrio local para os valores iniciais da função de distribuição. Para entrada e saída das fronteiras, o gradiente zero da função de distribuição é adotado (gradiente zero será descrito no capítulo 6, que aborda as condições de contorno). Foram feitas quatro simulações no trabalho de Zhou et al. (2010). A primeira simulação trata da ruptura de barragem em bacia retangular e o canal é um reservatório quadrado com área da base  $200 \times 200 \,\mathrm{m}^2$ . O segundo exemplo de simulação é o escoamento através de um canal sinuoso com dezoito curvas. Na terceira simulação, analisa-se o comportamento do escoamento de uma estrutura hidráulica utilizada na proteção de margens de rios. Por último, tem-se o escoamento assimétrico em um canal de expansão simétrica. Os resultados demonstram a aplicabilidade e a precisão do LBM em simulações de escoamentos em canal.

Liu, Zhou e Burrows (2010) abordou, por meio do LBM, escoamentos não-permanentes governados pelas equações de águas rasas. Conforme ratificado por Zhou (2004), os modelos LABSWE e LABWSE $^{TM}$  inicialmente desenvolvidos não possuem a capacidade de simular escoamentos em regime não-permanente. No sentido de superar esta barreira, Liu, Zhou e Burrows (2010) utilizaram um esquema multi-bloco com o intuito de refinar a malha somente nas regiões mais próximas de onde ocorre o regime

não-permanente. O modelo desenvolvido é bidimensional baseado no reticulado quadrado D2Q9 e incorporou-se ao novo modelo a abordagem da turbulência. Vários testes numéricos foram realizados, como por exemplo, escoamento em ruptura de barragem e encontro entre uma onda ocasionada por quebra de barragem e quatro cilindros de bases quadradas. De acordo com os resultados, verificou-se que o modelo proposto é capaz de reproduzir as características hidrodinâmicas para escoamentos transientes em canais.

Novas formas de abordagem para o termo de força, fazendo com que ele descreva com mais precisão as características físicas do problema simulado. Zhou (2011) relata que o esquema centrado desenvolvido para substituir a declividade do fundo do canal e que pode ser visto em Zhou (2004), não possui cálculos aritméticos simples. Para sanar esta desvantagem, Zhou (2011) propõe uma nova forma de incorporar as características topográficas do fundo do canal no termo de força, eliminando assim o cálculo da derivada presente no termo de força proposto por Zhou (2004) e aumentando a capacidade do LABWSE na predição dos escoamentos governados pelas equações de águas rasas. Três testes numéricos foram realizados e comparados com soluções analíticas ou outros resultados numéricos para validar a precisão e a capacidade do modelo proposto. As comparações mostram que a nova abordagem para o termo de força é ideal na simulação de problemas governados pelas equações de águas rasas.

Um dos primeiros trabalhos que simula problemas de escoamentos de águas rasas com o LBM-MRT e com abordagem da turbulência pode ser visto em Liu, Li e Shu (2012). Conforme mencionado nos trabalhos de d'Humières (1992) e Lallemand e Luo (2000), é notável a melhora de estabilidade quando usa-se o operador de colisão MRT em vez do BGK. Neste sentido, Liu, Li e Shu (2012) propôs resolver problemas com escoamento altamente turbulento, utilizando o LBM-MRT. A turbulência foi incorporada ao LBM por meio da técnica LES e o modelo de Smagorinsky, e o reticulado usado é o D2Q9. O modelo é validado simulando três estudos de caso: escoamento em torno de um pilar com base quadrada, escoamento em cavidade quadrada e escoamento em canais que formam uma junção de 90°. Todos os estudos de caso foram simulados por meio do LBM-BGK e do LBM-MRT, permitindo a comparação entre os diferentes operadores de colisão. A comparação entre os dados de referência e os fornecidos pelo MRT-LABWSE $^{TM}$  mostram a eficácia do modelo proposto para escoamentos altamente turbulentos. Também observou-se que o MRT-LABWSE $^{TM}$  é mais estável que o BGK-LABWSE $^{TM}$ . Os autores citam a desvantagem que o LBM-MRT necessita de mais tempo de processamento e portanto indica-se a aplicação de paralelização do código.

Peng (2012) apresentou aplicações unidimensionais e bidimensionais, governadas pelas equações de águas rasas e que foram simulados por meio do LBM-MRT, incluindo a abordagem da turbulência. Utilizou-se o esquema centrado ponderado para capturar a topografia do canal. Observou-se, por meio de comparações, que o LBM-MRT é mais

estável do que o LBM-BGK e que o LBM-MRT pode ser usado para simular escoamentos com altos números de Reynolds.

La Rocca, Adduce e Sciortino (2012) trouxe importantes contribuições para a forma de escolha dos parâmetros de simulação e também chama a atenção para o fato de que, no LBM, pode-se utilizar uma viscosidade numérica mais elevada do que a viscosidade do fluido. A justificativa para esta abordagem é que o LBM é um modelo intrinsecamente viscoso e a viscosidade numérica pode ser adequadamente ajustada em concordância com os parâmetros da discretização, possibilitando evitar instabilidades numéricas. Além disso, fornece uma análise sobre a dinâmica do escoamento de um líquido em duas camadas, com diferentes densidades, governado pelas equações de águas rasas. La Rocca, Adduce e Sciortino (2012) consideraram conjuntos separados de equações no LBM, uma para cada camada e os termos de acoplamento foram incorporados no termo de força na LBE. Os resultados obtidos foram comparados com outros métodos numéricos e com dados disponíveis na literatura e foram considerados satisfatórios, pois são equivalentes aos existentes na literatura, com a vantagem do LBM ser de mais simples implementação.

Zhou e Liu (2013) propôs incorporar ao termo de força um coeficiente de elevação do leito, denotado por  $C_{\alpha}$ . Deste modo, incorporou-se ao modelo numérico o maior número possível de características do problema estudado. Este coeficiente representou melhor a topografia do canal, garantiu soluções mais precisa nos problemas simulados e demonstrou ser ideal para simular escoamentos naturais governados pelas equações de águas rasas.

Conforme observou-se em Zhou (2002a), o LABSWE $^{TM}$  é limitado aos escoamentos subcríticos. Esta barreira começou a ser rompida com a pesquisa de Chopard, Pham e Lefèvre (2013), onde foi proposto um modelo unidimensional assimétrico baseado no LBM (D1Q3 assimétrico), para simular escoamentos supercríticos em problemas governados pelas equações de águas rasas. O modelo proposto é derivado da realização de uma transformação Galileana no método do reticulado de Boltzmann para águas rasas. Neste processo, a transformação afeta as funções distribuição de partículas e também as velocidades na malha. Este procedimento resulta em uma malha assimétrica, bem apropriada para descrever escoamentos supercríticos. Analisou-se dois estudos de caso para realizar a validação do modelo. No primeiro, têm-se o escoamento de aguá em canal em que altura e velocidade da água foram impostas na entrada do canal. Os resultados numéricos obtidos com o modelo proposto são muito bons quando comparados com as soluções fornecidas por diferenças finitas e volumes finitos. No segundo estudo de caso têm-se a simulação de um escoamento que é torrencial e passa para o regime fluvial. Os resultados para esta simulação são considerados muito bons, pois descrevem bem o comportamento esperado.

Peng et al. (2014) analisaram problemas por meio do LBM-MRT e o LBM-BGK, utilizando o esquema centrado ponderado para o termo de força. Novamente o reticulado utilizado é o D2Q9 e quatro estudos de caso foram simulados. Testou-se a propagação

de uma onda em uma região costeira relativamente curta, com geometria regular e profundidade variável, escoamento de maré sobre degraus localizados no fundo do canal, escoamento ocasionado por ruptura de barragem e escoamento sobre um bloco quadrado. Os resultados das simulações estão de acordo com as soluções analíticas. O desempenho e o custo computacional do LBM-MRT e o LBM-BGK foram comparados e mostraram-se semelhantes para os problemas simulados. A abordagem do esquema centrado ponderado para o termo de força representou uma melhora nos resultados obtidos.

Liu e Zhou (2014) relatou uma nova abordagem do LBM para simular processos de wetting-drying, que são caracterizados por aumento e diminuição dos escoamentos de água, por exemplo, chegada de uma grande onda e inundações. O esquema foi desenvolvido com base em uma análise de Chapman-Enskog e as expansões da série de Taylor, que são aplicadas para estabelecer uma relação entre as funções distribuição de partículas da parte seca do leito e da parte úmida. A verificação do modelo foi feita por meio de escoamentos unidimensionais e bidimensionais, como por exemplo, uma onda solitária deslocando-se até a praia. Os resultados numéricos estão em concordância com as soluções analíticas, com outros resultados numéricos disponíveis na literatura e com dados experimentais, demonstrando a capacidade e precisão da nova abordagem para o LBM.

Zergani, Aziz e Viswanathan (2015) apresentou simulação numérica da propagação de ondas oceânicas longas (tsunami). Este problema é governado pelas equações de águas rasas e utilizou-se o LBM-BGK baseado no reticulado quadrado D2Q9. O modelo desenvolvido é baseado no LABSWE, criado por Zhou (2002a), porém adiciona elementos no termo de força, como por exemplo, o efeito de Coriolis e o efeito de uma força decorrente da suposição de pressão hidrostática. Os resultados mostram que o novo modelo desenvolvido é eficiente e captura a elevação da onda se propagando no mar.

Uma nova modificação no LBM foi proposta por Li, Huang e Li (2015), com o intuito de simular o escoamento governado pelas equações de águas rasas em topografias complexas. A proposta consistiu em eliminar o termo quadrático da profundidade da água, localizado na função distribuição de equilíbrio construída por Zhou (2002a). Além disso, o termo de pressão hidrostática é combinado com o termo de inclinação do leito e farão parte do termo de força na equação do reticulado de Boltzmann. O operador de colisão é o BGK e o reticulado usado é o D2Q9. Vários problemas clássicos de Hidráulica foram utilizados para validar o modelo proposto e os resultados estão com excelente concordância com os resultados de outros métodos numéricos e as soluções analíticas, indicando que o modelo proposto é capaz de simular escoamento de águas rasas sobre topografias complexas.

La Rocca et al. (2015), assim como o de Chopard, Pham e Lefèvre (2013), descrito anteriormente, sinalizam para uma linha de pesquisa de grande interesse atual no método do reticulado de Boltzmann. Trata-se de escoamentos em regimes transcríticos. A diferença principal entre as duas pesquisas é que em La Rocca et al. (2015) tem-se um modelo

bidimensional para o escoamento transcrítico governado pelas equações de águas rasas, enquanto que na pesquisa de Chopard, Pham e Lefèvre (2013) o modelo é unidimensional. A ideia principal de La Rocca et al. (2015) baseou-se no fato de que o conjunto de velocidades de partículas descritas no modelo de Zhou (2004), que são derivadas de uma expansão em série de Taylor de segunda ordem, não são capazes de capturar informações suficientes para descrever o escoamento transcríticos. Deste modo, aplica-se expansão de série te Taylor até quarta ordem no conjunto de velocidades. O modelo foi validado por meio de simulações envolvendo problemas clássicos de Hidráulica e apresentou boa precisão, mostrando que o modelo proposto pode ser estendido para problemas governados pelo modelo onda cinemática, crítico e supercrítico.

No LBM, o operador de colisão atua diretamente na estabilidade da simulação. Portanto, a abordagem deste importante elemento da LBE despertou o interesse de pesquisadores. Diferentemente das duas abordagens para o operador de colisão conhecidas, o BGK e o MRT, Peng, Zhang e Zhou (2016) desenvolveram um operador de colisão com dois tempos de relaxamento (TRT - two relaxation times) e utilizaram o modelo para simular três problemas governados pelas equações de águas rasas, escoamento em canal retangular com obstáculo no fundo e vazão constante (steady Flow over a Bump), ruptura de barragem (dam-break flow) e escoamento ao redor de um cilindro localizado no centro de um canal retangular. Os resultados mostraram boa concordância entre a simulação e as respectivas soluções analíticas e dados experimentais. A principal vantagem do LBM-TRT é que o tempo de processamento é menor do que o LBM-MRT, ao mesmo tempo que captura as informações físicas do escoamento. Porém, somente escoamentos laminares foram simulados, o reticulado usado é simétrico e também não tem a capacidade de simular escoamentos supercríticos. Pode-se notar também, que estes problemas haviam sido simulados em outros trabalhos, utilizando o LBM-BGK e o LBM-MRT.

A eficiência do LBM-MRT foi testada por Zhang et al. (2016) na simulação do escoamento em canais abertos com problemas práticos em Hidráulica. Melhorou-se a implementação do LBM-MRT e LBM-BGK em uma unidade de processamento gráfico (GPU - graphic processing unit). A confiabilidade do LBM-MRT foi verificada por meio de problemas bem conhecidos em Hidráulica e que possuem solução analítica, escoamento em canal com soleira no fundo (steady flow over a hump) e propagação de uma onda em região costeira, com leito regular e profundidade variável (unsteady tidal wave flow). Verificada a capacidade e confiabilidade do modelo desenvolvido, aplicou-se o modelo em duas hidrelétricas, simulando o escoamento da água em canal com formação de cascata (no final do canal tem-se uma queda d'agua). Não há comparação das simulações de escoamento com formação de cascata, com outros métodos numéricos, soluções analíticas ou dados experimentais. Tem-se, em vez disso, o refinamento da malha e a observância do comportamento. Os resultados obtidos são considerados razoáveis e mostram que o LBM é capaz de simular problemas reais. Uma outra contribuição interessante deste trabalho é

a afirmação de que uma malha fina e passo de tempo pequeno, são capazes de simular de forma eficiente escoamentos bidimensionais de águas rasas. Além disso, observou-se que a performance do LBM-BGK e do LBM-MRT são similares, porém recomenda-se o uso do LBM-MRT em problemas práticos pois é mais estável, enquanto que o LBM-BGK é menos estável. Ou seja, no LBM-MRT, é possível ajustar os parâmetros de simulação de maneira próxima ao real, mantendo a estabilidade.

Zhao, Huang e Li (2017) aplicou o LBM-MRT em três tipos de canais sinuosos cujos escoamentos são governados pelas equações de águas rasas. Utilizou coordenadas curvilíneas e uma forma generalizada do LBM complementado por interpolação, com o objetivo de melhorar a precisão nas simulações de escoamentos em canais curvos e sinuosos. O operador de colisão MRT foi utilizado para melhorar a estabilidade e o reticulado usado é o D2Q9. Os resultados obtidos foram comparados com os dados experimentais e com os resultados obtidos a partir da aplicação do método dos volumes finitos. O modelo proposto mostra que as características hidrodinâmicas dos escoamentos simulados foram bem representadas.

Rosis (2017) decompõe o operador de colisão BGK, presente na equação do LBM, em termos de uma base não-ortogonal de momentos centrais, com o objetivo de simular problemas governados pelas equações de águas rasas. O reticulado usado é o D2Q9 e as funções distribuições de equilíbrio foram reescritas levando em consideração a base não-ortogonal escolhida. O modelo foi validado por meio da simulação de cinco problemas bem conhecidos em Hidráulica, escoamento em canal com soleira no fundo, onda de maré, ruptura de barragem, ruptura circular de barragem e escoamento ao redor de um cilíndro com base circular. De acordo com Rosis (2017), o modelo proposto é consistente e os resultados se mostram em muito bom acordo com soluções analíticas e dados experimentais, apresentando um erro relativo menor do que 1% em todos os estudos de caso simulados.

A partir da revisão bibliográfica, pode-se perceber quais ferramentas do LBM são adequadas para a simulação dos problemas propostos nesta tese. O reticulado D2Q9 representa de forma satisfatória o escoamento em canais, não sendo necessário utilizar reticulados tridimensionais. Quanto ao operador de colisão, o MRT é mais estável e representa melhor do que o BGK, os escoamentos com geometrias complexas, e, por este motivo, foi utilizado o MRT nas simulações. A abordagem da turbulência, por meio do modelo LES, permite reduzir o parâmetro de relaxamento (presente na equação do reticulado de Boltzmann), tornando a simulação mais próxima das características reais. Percebeu-se também que ocorre limitação do LBM na simulação de escoamentos supercríticos bidimensionais. Deste modo, as simulações desta tese são todas em relação a escoamentos subcríticos.

# 3 HIDRÁULICA DE CANAIS E AS EQUAÇÕES DE ÁGUAS RASAS

Pretende-se neste capítulo apresentar a base teórica da mecânica dos fluidos que faz referência aos problemas de pesquisa desta tese.

## 3.1 HIDRÁULICA DE CANAIS

Os escoamentos de fluidos com superfície livre, são provavelmente, os fenômenos encontrados com mais frequência na natureza. Exemplos disso, são o escoamentos da chuva sobre o solo, em rios, córregos, ondas oceânicas, canais de irrigação, redes de esgoto e drenagem. De acordo com Henderson (1966), em todas essas situações o escoamento se caracteriza por uma interface entre o ar e a camada superior da água, chamada de superfície livre.

Escoamentos de fluidos com superfície livre estão sujeitos a determinadas condições gerais, princípios e leis da dinâmica, e a teoria da turbulência. A classificação de um escoamento é feita de acordo com as seguintes características: quanto a direção da trajetória (laminar, transitório e turbulento), quanto a variação no tempo (permanente e não permanente), quanto a variação da trajetória (uniforme e não uniforme).

O escoamento é permanente quando a velocidade média e a profundidade independem do tempo. Por outro lado, no escoamento não permanente as variáveis macroscópicas mudam com o passar do tempo. Quando velocidade média e profundidade são independentes da coordenada de posição na direção do escoamento, tem-se um escoamento uniforme. No escoamento não uniforme, as variáveis macroscópicas variam em magnitude ao longo dessa coordenada. Quanto a direção da trajetória para escoamentos em canais, tem-se que o escoamento é laminar se Re < 500, transitório se 500 < Re < 2500 e turbulento se Re > 2500, em que Re denota o número de Reynolds. O escoamento também pode ser classificado como subcrítico se Fr < 1, crítico se Fr = 1 e supercrítico se Fr > 1, em que Fr denota o número de Froude (HENDERSON, 1966).

Uma série de parâmetros são usados para descrever os canais, de acordo com Porto (2006): área molhada, perímetro molhado, raio hidráulico, altura da água, altura de escoamento da seção, largura de topo, altura hidráulica ou altura média, declividade do fundo, declividade piezométrica ou declividade da linha da água e declividade da linha de energia.

Área molhada (A) é a área da seção reta do escoamento, normal à direção do escoamento. Na Figura 3, é representada pelo retângulo pontilhado. O perímetro molhado (P) é o comprimento da parte da fronteira sólida da seção do canal (fundo e paredes) em contato com o líquido. O raio hidráulico  $(R_h)$  é a relação entre a área molhada e o

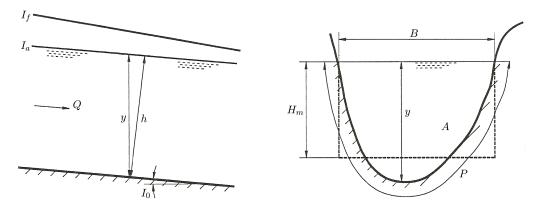


Figura 3 – Elementos geométricos de uma seção de um canal Fonte: Porto (2006).

perímetro molhado. A altura da água (y) é a distância vertical do ponto mais baixo da seção do canal até a superfície livre. A altura de escoamento da seção (h) é a altura do escoamento medida perpendicularmente ao fundo do canal. A largura do topo (B) é a largura da seção do canal na superfície livre, função da forma geométrica da seção e da altura d'água. A altura hidráulica ou altura média  $(H_m = A/B)$  é a relação entre a área molhada e a largura da seção na superfície livre. É a altura de um retângulo de área equivalente à área molhada. A declividade de fundo  $(I_0)$  é a declividade longitudinal do canal. A declividade piezométrica ou declividade da linha d'água  $(I_a)$ . A declividade da linha de energia  $(I_f)$  é a variação da energia da corrente no sentido do escoamento.

# 3.2 EQUAÇÕES DE ÁGUAS RASAS

O escoamento pode ser considerado como de águas rasas quando h << L, sendo h a profundidade do escoamento e L o comprimento das ondas oscilatórias. Nesta situação pode-se considerar que  $C=\sqrt{gh}$ , senco C a celeridade das ondas e g a aceleração da gravidade (HENDERSON, 1966). As equações governantes para estes escoamentos são as equações de águas rasas, também conhecidas como equações de Saint-Venant bidimensionais, que são derivadas das equações de Navier-Stokes com o pressuposto de que a distribuição de pressão ao longo da vertical varia hidrostaticamente.

O sistema de equações de Navier-Stokes, juntamente com a equação da continuidade, são conhecidos por descrever com precisão o comportamento de um fluido em vários tipos de situações. Situações estas que englobam desde as mais simples como um rio com escoamento lento em um canal retilíneo, até um canal com geometria complexa e escoamento turbulento com condições extremas (WYLIE, 1990).

A equação da continuidade, representa a conservação da massa, e esta representada, em coordenadas cartesianas, na equação (3.1). Considera-se que a massa específica  $\rho$  do

fluido é constante, caracterizando um escoamento incompressível,

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0, \tag{3.1}$$

onde x, y e z são as coordenadas horizontal longitudinal, horizontal transversal e vertical, respectivamente,  $u_x, u_y$  e  $u_z$  são as velocidade do fluido nas direções x, y e z, respectivamente.

As equações de Navier-Stokes (3.2) são o resultado da aplicação da segunda lei de Newton ao movimento do fluido e podem ser expressas em coordenadas cartesianas, para um fluido contínuo em 3 dimensões,

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{F_x}{\rho},$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \frac{F_y}{\rho},$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left( \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{F_z}{\rho},$$
(3.2)

onde t é o tempo,  $\rho$  é a massa específica do fluido, g é a aceleração da gravidade p é a pressão,  $\nu = \mu/\rho$  é a viscosidade cinemática que é igual a viscosidade dinâmica  $\mu$  divido pela massa espeçífica  $\rho$ , x,y,z são as coordenadas espaciais,  $u_x,u_y,u_z$  são as componentes do vetor velocidade  $\vec{v}$  nas direções x,y e z,  $F_x,F_y,F_z$  são as componentes da força gravitacional nas direções x,y e z, respectivamente.

De acordo com Zhou (2004), usando notação indicial, a equação de conservação da massa e as equações de conservação da quantidade de movimento ficam reescritas conforme (3.3),

$$\begin{cases}
\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \\
\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_i u_j)}{\partial u_j} = F_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j},
\end{cases} (3.3)$$

em que i = 1, 2, 3.

O lado esquerdo da segunda equação apresentada em (3.3) representa o termo convectivo, no lado direito, o primeiro termo representa uma força de campo, o segundo termo refere-se a variação da pressão e o terceiro é o termo viscoso (ZHOU, 2004).

O sistema de Navier-Stokes é composto por equações diferenciais parciais nãolineares e somente em situações simplificadas a solução analítica pode ser obtida. Estas equações descrevem o escoamento de um fluido e permitem calcular campos de velocidade e pressão de um escoamento (CHAUDHRY, 2008). Para obter as equações de águas rasas a partir das equações de Navier-Stokes, procede-se integrando verticalmente (integral definida sobre a profundidade do canal) a equação (3.1), que é a equação da continuidade. Aplica-se a regra de Leibnitz, além de condições cinemáticas na superfície livre e fundo do canal. Procedimento análogo é realizado para todas as equações do sistema (3.2), mas com o cuidado de analisar cada um dos termos de cada equação do sistema. Estes cálculos podem ser encontrados em Zhou (2004) e Liu (2009).

Considerando-se que a pressão varia hidrostaticamente, tem-se a equação da conservação da massa e as equações da conservação da quantidade de movimento (3.4), escritas com notação indicial (ZHOU, 2004). As variáveis independentes são o tempo t, e as coordenadas espaciais x e y. As variáveis dependentes são a profundidade h, e as velocidades na direções x e y,

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial (hu_j)}{\partial x_j} = 0$$

$$\frac{\partial (hu_i)}{\partial t} + \frac{\partial (hu_iu_j)}{\partial x_j} = -g\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{h^2}{2}\right) + \nu \frac{\partial^2 (hu_i)}{\partial x_j \partial x_j} + F_i$$
(3.4)

onde i = 1, 2, 3 e  $F_i$  é um termo de força definido como,

$$F_i = -gh\frac{\partial z_b}{\partial x_i} + \frac{\tau_{wi}}{\rho} - \frac{\tau_{bi}}{\rho} + E_i, \tag{3.5}$$

em que  $\partial z_b/\partial x_i$  é a declividade do fundo,  $\tau_{wi}$  é a tensão de cisalhamento do vento na superfície da água na direção i,  $\tau_{bi}$  é a tensão de cisalhamento com o fundo do canal na direção i,  $E_i$  é o termo de Coriolis na direção i.

O termo de Coriolis é dado por (3.6) (ZHOU, 2004), porém, dependendo da natureza do fenomeno, pode ser desprezado nas simulações utilizando o LBM,

$$E_i = \begin{cases} f_c h u_y, & i = x, \\ -f_c h u_x, & i = y, \end{cases}$$

$$(3.6)$$

onde  $f_c$  é o parâmetro de Coriolis definido por,

$$f_c = 2\omega \operatorname{sen} \phi, \tag{3.7}$$

em que,  $\omega \approx 7, 3 \times 10^{-5} \, rad/s$  é a velocidade de rotação da Terra e  $\phi$  é a latitude no local de interesse.

A tensão de cisalhamento no fundo com o canal na direção i é calculada utilizando (3.8) (ZHOU, 2004),

$$\tau_{bi} = \rho C_b u_i \sqrt{u_j u_j},\tag{3.8}$$

onde  $C_b$  é o coeficiente de resitência ao escoamento, que pode ser um valor constante ou estimado por  $C_b = g/C_z^2$ . O coeficiente de Chezy  $C_z$  pode ser determinado em termos do raio hidráulico  $R_h$  e do coeficiente de rugosidade de Manning  $n_b$ ,

$$C_z = \frac{R_h^{1/6}}{n_b}. (3.9)$$

A tensão de cisalhamento do vento na superfície da água na direção i pode ser determinada com a ajuda da expressão,

$$\tau_{wi} = \rho_a C_w u_{wi} \sqrt{u_{wi} u_{wj}}, \tag{3.10}$$

onde  $\rho_a$  é a massa específica do ar,  $C_w$  é o coeficiente de resistência,  $u_{wi}$  é a componente da velocidade do vento na direção i.

Para obter (3.4), considerou-se que a pressão varia hidrostaticamente. A aproximação hidrostática é válida para diversos casos, podendo ser aplicada com sucesso em modelos hidrodinâmicos. É frequente o estudo de escoamentos em rios, lagos, estuários, oceanos e canais com aproximação hidrostática. A ideia básica desta aproximação é considerar que a escala vertical é muito menor do que a horizontal, fazendo com que os termos de aceleração e viscosidade turbulenta, na equação da quantidade de movimento para as componentes verticais, sejam muito menores do que a aceleração da gravidade, assim podendo ser desconsiderados. Porém, em alguns casos essa aproximação é questionável. Um exemplo disto é o escoamento induzido por um forte gradiente de densidade horizontal (CHEN, 2003).

Em situações que envolvem pressão dinâmica, autores como Stansby e Zhou (1998), Jankowski (1999), Namin, Lin e Falconer (2001), Casulli e Zanolli (2002) e Stelling e Zijlema (2003), optaram por usar as equações de Navier-Stokes. Nessas abordagens leva-se em conta a aceleração vertical no escoamento, porém a complexidade das equações e o custo computacional associado diminuem a velocidade do modelo (TOSSOU, 2009). Além disso, a necessidade de considerar os efeitos não-lineares da pressão também estimulou a proposta do modelo de Serre, onde sua principal característica é que existe uma variação linear na componente vertical da velocidade do fundo até a superfície livre. Esta aceleração vertical pode ser advinda de rápidas mudanças na profundidade do escoamento ou em trajetórias altamente sinuosas. Assumindo este gradiente na velocidade vertical, necessariamente implica que a pressão se afasta da distribuição linear (hidrostática). Na sua formulação matemática, o modelo de Serre assemelha-se a formulação das equações de Saint-Venant, porém com uma diferença principal. Nas duas equações dinâmicas são acrescentados termos que reproduzem a pressão dinâmica. Esses termos adicionais aumentam o esforço computacional (TOSSOU, 2009).

De acordo com Tossou (2009), para muitas aplicações, as simplificações que originaram as equações de águas rasas não conduzem a erros significativos. Porém, em outros casos, observa-se a distribuição não-linear de pressão. Exemplos disso podem ser observados quando ondas encontram obstáculos, vertedouros livres, canal sinuoso, etc. Algumas vezes, a natureza dinâmica da pressão é pouco significativa, mas em outros exemplos ela pode ser surpreendentemente grande. Neste sentido, deve-se avaliar o problema estudado, verificar quais são as equações governantes envolvidas que o descrevem satisfatoriamente.

### 4 AUTÔMATOS CELULARES E A TEORIA CINÉTICA

O método do reticulado de Boltzmann pode ser obtido por meio de duas formas distintas. Uma é a derivação a partir do autômato celular do tipo gás em rede (LGCA) e a outra forma é a derivação a partir da equação de Boltzmann. Neste sentido, pretende-se abordar neste capítulo as principais características do LGCA e do seu antecessor, os autômatos celulares. Além disso, descreve-se os resultados mais importantes da teoria cinética, visando estabelecer a sua conexão com o LBM.

#### 4.1 AUTÔMATOS CELULARES

O autômato celular foi originalmente proposto por John von Neumann nos anos 1940. De acordo com Dewdney (1989), o objetivo principal de von Neumann era criar um modelo que, por meio de regras simples, pudesse reproduzir fenômenos naturais e artificiais. Uma característica importante desse modelo é ser capaz de simular sistemas complexos que evoluem ao longo do tempo, partindo de regras simples. Em 1968, o matemático John Conway, desenvolve o Jogo da Vida, que consiste de autômatos celulares que tem por objetivo representar, por meio de regras matemáticas, sistemas complexos da evolução da vida, que o popularizou, provocando o interesse de pesquisadores de diversas áreas.

Sukop e Thorne-Jr. (2006) resumem bem a ideia geral de um autômato celular. Um autômato celular ocupa uma posição sobre um ponto do reticulado de formato especificado no espaço e interage com seus vizinhos. Para cada passo de tempo, o autômato celular examina seu próprio estado e os estados dos seus vizinhos mais próximos. Em seguida, no próximo passo de tempo e de acordo com as regras utilizadas, ocorre a redefinição do seu próprio estado. Assim, as regras e as condições iniciais e de contorno impostas ao grupo de autômatos celulares determinam unicamente a sua evolução no tempo. Os autômatos celulares podem ser n-dimensionais, porém os mais comuns são os unidimensionais e os bidimensionais. Os autômatos unidimensionais são mais simples e podem ser representados por um vetor de células, e cada geração posterior pode ser armazenada em uma matriz, onde cada linha (ou coluna) representa a atualização do vetor em um passo de tempo. Os autômatos bidimensionais podem ser representados por uma matriz e, assim como os unidimensionais, são todos atualizados simultâneamente para cada passo de tempo. Os modelos unidimensionais mais simples de autômatos celulares que consideram apenas os seus próprios estados e os estados de seus dois vizinhos mais próximos são chamados de autômatos celulares elementares.

Nos últimos anos, modelos em Engenharia de Recursos Hídricos foram aplicados com sucesso, por exemplo, na avaliação de risco de inundação e de gestão. Dottori e Todini

(2010) apresentaram um modelo baseado em uma versão do método de volumes finitos, chamado de abordagem de autômatos celulares. A proposta foi simular a acorrência de inundações. Um autômato celular pode ser definido como um sistema feito de um número finito de elementos, chamados de células, que são caracterizadas por certas propriedades. Um autômato celular evolui no tempo, alterando o estado de todas as células, simultaneamente, em cada espaço de tempo. A abordagem baseada em autômatos celulares tem sido aplicada com êxito também em dinâmica dos fluídos. No caso de escoamento bidimensional de água, a abordagem do CA origina um esquema computacional equivalente ao método de volumes finitos. Outra informação importante revela a agilidade e rapidez computacional deste modelo, trata-se do fato de que cada célula é influenciada apenas por um número limitado de células na sua vizinhança.

Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986), mostraram que um fluido poderia ser representado por partículas imaginárias, todas elas contendo a mesma massa e movendo-se com velocidade. Estas velocidades ficariam restritas a um conjunto finito (número finito de direções de movimento para uma partícula). A representação através de partículas fictícias faz com que o movimento no interior do fluido não precise ser detalhado e mesmo assim reproduz a dinâmica dos fluidos de forma real.

As partículas fictícias ficam distribuídas em um reticulado regular. A movimentação dessas partículas ocorre de acordo com uma descrição simples. De acordo com Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986), primeiro ocorre a preparação do reticulado de tal maneira que não haja mais de uma partícula movendo-se na mesma direção em uma determinada célula. Em um segundo momento ocorre a transmissão, ou deslocamento, das partículas por uma unidade do reticulado até a célula vizinha mais próxima, de acordo com a direção da sua velocidade. Por último, ocorre a colisão entre as partículas que chegarem no mesmo passo de tempo à sua célula de destino. As velocidades e as regras de colisão fazem com que as velocidades das partículas sejam alteradas. A forma como a partícula segue para uma nova célula depende das regras de colisão. Uma característica importante é que o número de partículas não é modificado e nem o vetor soma das velocidades, ou seja, a colisão preserva a massa e a quantidade de movimento.

De acordo com Wolfram (1994), um autômato celular é uma quádrupla A = (L; S; N; f) onde L é um conjunto de índices ou células; S é o conjunto finito de estados (possíveis valores que cada célula pode assumir);  $N: L \to L^k$  é o mapeamento que define a vizinhança de cada célula i como uma coleção de k células; e  $f: S^k \to S$  é a função de evolução ou regra de atualização de autômato. A regra  $f: S^k \to S$  é responsável pela dinâmica global do autômato celular e é aplicada a cada instante de tempo em todas as células. A coleção dos estados das células em qualquer passo de tempo é chamada de configuração ou estado global do autômato.

Para entender um pouco melhor, considera-se o autômato celular unidimensional

chamado de elementar por Kari (2005). Este autômato possui um conjunto de possíveis estados definido por  $S=\{0,1\}$  e vizinhança mais próxima de raio r=1. Existem  $2^3=8$  padrões possíveis na vizinhança de cada célula, onde cada uma delas pode ser mapeada por 0 ou 1. Portanto, existem  $2^8=256$  autômatos celulares elementares distintos. Wolfram (1994) estudou extensivamente, fez sua classificação e introduziu um esquema para nomeá-las. Cada regra elementar é especificada por uma sequencia de 8 bits,

$$f(111)f(110)f(101)f(100)f(011)f(010)f(001)f(000),$$
 (4.1)

onde f é a regra de atualização do CA. A sequência de bits é a expansão binária de um inteiro no intervalo 0...255, chamada de nomenclatura de Wolfram do autômato celular.

Para identificar a regra, usa-se um valor numérico que é obtido combinando-se os valores resultantes da aplicação da regra de atualização f a cada uma das oito possíveis vizinhanças. Obtém-se um número binário e sua representação na base decimal fornece o número da regra (KARI, 2005).

Os modelos de simulação baseados nos autômatos celulares, foram bem sucedidos, pois, de acordo com Chopard e Masselot (1999), por meio de regras simples, foi possível simular sistemas complexos. As pesquisas envolvendo autômatos celulares contribuíram significativamente para o desenvolvimento da ciência. Exemplos disso podem ser vistos em Bogo (2015), que simula trafego de veículos e na pesquisa de Melotti (2009), que apresenta o disseminação de epidemias. No entanto, os CAs não modelam o escoamento de fluidos, e, por este motivo, uma nova abordagem foi desenvolvida, são os chamados autômatos celulares do tipo gás em rede (LGCA).

### 4.2 AUTÔMATOS CELULARES DO TIPO GÁS EM REDE

Os autômatos celulares do tipo gás em rede são uma classe particular dos autômatos celulares. A dinâmica das partículas no LGCA é desenvolvida como um modelo microscópico simples, totalmente discreto para um fluído a base de partículas fictícias localizadas nos nós de um reticulado uniforme. Ou seja, o tempo, o espaço e as partículas são discretos e caracterizados pelo reticulado uniforme. Tais partículas movem-se uma unidade da malha, em cada passo de tempo, nas direções de suas velocidades. Duas ou mais partículas que chegam ao mesmo nó podem colidir. A característica importante dos autômatos gás em rede é que a massa e a quantidade de movimento são explicitamente conservados. Este é um recurso desejável na simulação de problemas físicos reais. E mais, pode-se mostrar que é possível recuperar as equações de Navier-Stokes assintoticamente, utilizando modelos bem simples de LGCA (ZHOU, 2004).

Salienta-se que a proposta dos autômatos celulares do tipo gás em rede é modelar fluidos via autômatos celulares. Duas características essenciais consideradas são, as leis de

conservação da quantidade de movimento e conservação da massa (número de partículas) (JUDICE, 2009). O primeiro modelo baseado nos LGCAs que simula a dinâmica do fluidos é o HPP (HARDY; PAZZIS; POMEAU, 1976).

Foi proposto por Hardy, Pazzis e Pomeau (1976) o primeiro modelo discreto para simulação de escoamentos de fluidos, baseado em uma rede quadrada com quatro possibilidade de movimento (direções cardeais). A velocidade de uma partícula é um dos quatro vetores unitários (1,0),(0,1),(-1,0),(0,-1), conforme pode ser observado na Figura 4. O modelo é bidimensional com velocidades e posições discretas, ou seja, uma partícula em um determinado nó se desloca para outro nó mais próximo em uma das quatro direções do reticulado. Neste momento, ocorre a colisão de forma que o número total de partículas e o momento total são conservados. Este modelo é chamado de HPP. Cada célula contém quatro bits de informação, representando a existência ou não de uma partícula viajando em cada uma das direções cardeais. O ponto principal de autômato, assim como no método do reticulado de Boltzmann, é o conceito de colisão e transmissão, que são os principais processos quando se analisa o movimento de partículas em um gás.

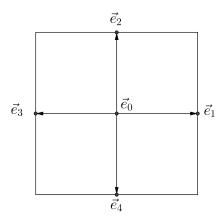


Figura 4 – Direções de movimento do reticulado D2Q5, com 4 velocidades não nulas Fonte: A autora (2017).

Os autômatos celulares do tipo gás em rede se tornaram populares na década de 1970, para simular escoamentos de fluidos e outros problemas físicos, no entanto, o primeiro modelo, o HPP, não representa as equações de Navier-Stokes. Isto ajudou no desestímulo da utilização do LGCA. Porém, alguns anos depois, em 1983, o pesquisador Stephen Wolfram reavivou o interesse neste método (WOLF-GLADROW, 2005).

Além do fato de que o HPP não representa as equações de Navier-Stokes, devido à sua anisotropia (comparando as direções cardeais com as colaterais), o modelo HPP não representa de forma precisa o comportamento de um gás, como por exemplo, sua difusão. Ratificando a importância dos modelos baseados em autômatos celulares do tipo gás em rede e com o objetivo de resolver os problemas do modelo HPP, anos depois Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986) descobriram as simetrias que permitem representar as equações de Navier-Stokes. Com base em uma estrutura hexagonal de seis velocidades o

novo modelo proposto é chamado de FHP, conforme Figura 5, com direções de movimento descritas por,

$$\vec{e}_{\alpha} = \begin{cases} (0,0) & \text{se } \alpha = 0, \\ e\left(\cos\left[\frac{\pi}{2}\left(\alpha - 1\right)\right], sen\left[\frac{\pi}{3}\left(\alpha - 1\right)\right]\right) & \text{se } \alpha = 1, ..., 6. \end{cases}$$
(4.2)

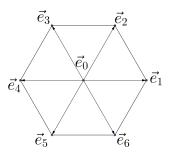


Figura 5 – Modelo de reticulado D2Q7, com 6 velocidades não nulas Fonte: A autora (2017).

O autômato celular do tipo gás em rede possui duas importantes e distintas etapas que são descritas por Zhou (2004): transmissão (propagação) e colisão. Primeiro o reticulado é preparado de forma que não tenha 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 do reticulado até a célula vizinha mais próxima, na direção dada por sua velocidade. Só então, essas partículas colidem com as partículas que chegarem no mesmo passo de tempo a sua célula de destino. Se não houver partícula chegando na mesma célula de destino, a partícula segue de acordo com a regra de transmissão no próximo passo de tempo. O tipo do reticulado e o operador de colisão determinam a característica básica do LGCA. Em nível macroscópico, estas duas etapas fazem a simulação dos processos de convecção e difusão de fenômenos, respectivamente.

A variável no autômato celular de gás em rede (LGCA) é uma variável Booleana. Isto quer dizer que há somente duas possibilidades, existe ou não existe partícula em uma determinada posição. De acordo com Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986), a representação da variável Booleana é  $n_{\alpha}(\vec{x},t)$ , com  $\alpha=0,...,M-1$ , onde M é o número de direções de movimento do reticulado. Com esta notação,  $n_{\alpha}=1$  indica que existe partícula na posição  $\vec{x}$ , no instante de tempo t e deslocando-se na direção de sua velocidade  $\vec{e_{\alpha}}$ . Quando não existe partícula em tal posição,  $n_{\alpha}=0$ . Reescrevendo para um melhor entendimento, percebe-se que as quantidades  $n_{\alpha}(\vec{x},t)$  indicam a ausência ou presença de partículas movendo-se da célula na posição  $\vec{x}$  para a célula vizinha mais próxima  $\vec{x}+\vec{e_{\alpha}}$  no passo de tempo indicado por t.

Considerando  $\Delta x = 1$  metro e  $\Delta t = 1$  segundo, a equação de movimento das

partículas para o LGCA é definida como,

$$n_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}, t + 1) = n_{\alpha}(\vec{x}, t) + \Delta_{\alpha}(\vec{n}(\vec{x}, t)), \quad \alpha = 0, ..., M - 1,$$
 (4.3)

onde,  $\Delta = (\Delta_1, \Delta_2, ..., \Delta_M)$  é denominado operador de colisão. Este operador descreve as mudanças em  $n_{\alpha}$  provocadas pela colisão e relaciona mais de uma partícula, o que é denotado através do vetor  $\vec{n}(\vec{x}, t)$ .

A massa específica e a velocidade são definidas por,

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^{M} \langle n_{\alpha} \rangle \tag{4.4}$$

e

$$u_i = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha=0}^{M} \langle n_{\alpha} \rangle e_{\alpha i}, \tag{4.5}$$

em que  $\langle n_{\alpha} \rangle$  representa uma média de vários valores de  $n_{\alpha}$ .

Anteriormente mencionou-se que o número de partículas e o vetor soma das suas velocidades não é alterado, isto é, a colisão conserva a massa e a quantidade de movimento do fluido. Impõem-se ao operador de colisão as condições de conservação de massa,

$$\sum_{\alpha} \Delta_{\alpha} \left( \vec{n} \right) = 0 \tag{4.6}$$

e conservação da quantidade de movimento do fluido,

$$\sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha} \Delta_{\alpha} \left( \vec{n} \right) = 0. \tag{4.7}$$

Para obter a equação do balanço de massa, procede-se com a soma da equação do movimento (4.3) em  $\alpha$  e usando (4.6),

$$\sum_{\alpha} n_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}, t + 1) = \sum_{\alpha} n_{\alpha}(\vec{x}, t), \quad \alpha = 0, ..., M - 1,$$
(4.8)

e a equação do balanço de quantidade de movimento para cada célula é obtida somando (4.3) multiplicada por  $\vec{e}_{\alpha}$  em  $\alpha$  e usando a equação (4.7),

$$\sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha} n_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}, t + 1) = \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha} n_{\alpha}(\vec{x}, t), \quad \alpha = 0, ..., M - 1.$$

$$(4.9)$$

A simetria hexagonal, a estabilidade numérica e a recuperação assintótica das equações de Navier-Stokes ainda não tornavam o FHP um método numérico eficiente,

pois ruídos estatísticos estavam presentes nas simulações. O ruídos estatístico é devido ao uso de variáveis Booleanas (MCNAMARA; ALDER, 1993). Os primeiros pesquisadores que conseguiram reduzir significativamente o ruído foram McNamara e Zanetti (1988) e foram também os primeiros que utilizaram funções contínuas de distribuição de partículas ao invés das funções Booleanas usadas no LGCA, originando o método do reticulado de Boltzmann. Embora os pesquisadores Frisch et al. (1987) e Wolfram (1986) haviam usado a equação do reticulado de Boltzmann como ferramenta analítica para calcular os coeficientes de viscosidade do LGCA, os primeiros pesquisadores que utilizaram a equação do reticulado de Boltzmann como método numérico foram McNamara e Zanetti (1988).

Inicialmente o LBM possuía o mesmo operador de colisão do LGCA e sua teoria dependia da teoria do LGCA. Porém o operador de colisão do LGCA não era simples e nem eficiente. De acordo com Surmas (2010), quando estabeleceu-se uma conexão entre a equação cinética de Boltzmann e a equação do reticulado de Boltzmann, foi possível utilizar as ferramentas da teoria cinética, como por exemplo, a nova abordagem para o operador de colisão.

### 4.3 TEORIA CINÉTICA

Devido a consideração de que o método do reticulado de Boltzmann pode ser deduzido a partir da teoria cinética dos gases, é fundamental fazer uma conexão entre as duas teorias e entender os princípios fundamentais. O objetivo desta seção é descrever os resultados da teoria cinética que são relevantes para o método do reticulado de Boltzmann. Esta seção representa uma preparação para deduzir a equação do reticulado de Boltzmann a partir da equação de Boltzmann com aproximação BGK.

Os principais pontos de interesse nesta seção são a equação cinética de Boltzmann, com aproximação BGK para o operador de colisão e a função distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann, ambas importantes para a apresentação do método do reticulado de Boltzmann. A equação cinética de Boltzmann com aproximação BGK para o operador de colisão, será transformada na equação do LBM e para isto serão necessárias três discretizações: no espaço de velocidades (o conjunto de possíveis movimentos das partículas torna-se finito) e nos domínios espacial e temporal.

A equação de Boltzmann é uma equação íntegro-diferencial para a função de distribuição do número de partículas no espaço de fase. É uma das principais equações da Teoria Cinética, uma área da Física Estatística que trata da dinâmica de processos fora do equilíbrio e sua convergência para o equilíbrio termodinâmico (CERCIGNANI, 1994). De acordo com Bardos e Ukai (1991) a equação foi originalmente desenvolvida para um sistema de expansão de gases. Ela pode ser utilizada também para uma série de outras áreas da Física Estatística, tais como as que envolvem a dispersão e transporte de partículas em fluidos, o deslocamento de elétrons em semicondutores e as pesquisas com

líquidos quânticos. A derivação da equação de Boltzmann satisfaz as leis de conservação, sendo possível obter as equações de Navier-Stokes da equação de Boltzmann.

A importância da função distribuição de partículas f na teoria cinética deve ser ressaltada. A função f representa a densidade de pontos no espaço de fase e a partir dela, pode-se determinar as variáveis macroscópicas médias como pressão e massa específica. A equação de Boltzmann fornece a função distribuição e também seu progresso no tempo. O termo de colisão presente na equação de Boltzmann determina as variações sofridas pela função distribuição f no espaço de fase devido às colisões entre as partículas (OLIVEIRA, 2013).

Em Kremer (2005) encontra-se a dedução da equação de Boltzmann. É uma equação íntegro-diferencial para a função de distribuição f,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + e_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{\partial f F_i}{\partial e_i} = \int (f_1' f' - f_1 f) a b db d\varepsilon d\vec{e_1}, \tag{4.10}$$

onde  $\vec{x}$  é o vetor posição das partículas,  $\vec{e}$  é o vetor velocidade das partículas, f função distribuição,  $F(\vec{x}, \vec{e}, t)$  força externa,  $f' \equiv f(\vec{x}, \vec{e'}, t)$ ,  $f_1' \equiv f(\vec{x}, \vec{e'}_1, t)$ ,  $f \equiv f(\vec{x}, \vec{e}, t)$ ,  $f_1 \equiv f(\vec{x}, \vec{e'}_1, t)$ ,  $\vec{e'}$  e  $\vec{e'}_1$  são as velocidades assintóticas pré-colisionais,  $\vec{e_1}$  e  $\vec{e_1}$  são as velocidades assintóticas pós-colisionais,  $\vec{a} = \vec{e_1} - \vec{e}$  é a velocidade relativa, a é o módulo da velocidade relativa, b é o parâmetro de impacto,  $\varepsilon$  é o ângulo azimutal.

Se a força externa específica não depender da velocidade das partículas (caso da aceleração da gravidade) ou depender dela através de um produto vetorial (aceleração de Coriolis em sistemas não inerciais ou da força de Lorentz em gases ionizados), o divergente  $\frac{\partial F_i}{\partial e_i}$  é nulo e a equação (4.10) é reescrita,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + e_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial e_i} = \int (f_1' f' - f_1 f) a b db d\varepsilon d\vec{e}_1. \tag{4.11}$$

No lado direito da equação (4.11) tem-se o termo de colisão. Uma das dificuldades quando se trabalha com a equação de Boltzmann é a abordagem do termo de colisão, pois este depende do produto de duas funções de distribuição. O termo de colisão fica denotado por,

$$Q(f,f) = \int (f_1' f' - f_1 f) a b db d\varepsilon d\vec{c_1}. \tag{4.12}$$

O termo de colisão é complexo. Simplificar sua estrutura sem perder suas propriedades básicas, permitiu o aparecimento de expressões menos complicadas e passaram a ser conhecidas como modelos cinéticos. Uma simplificação deste termo é apresentada por Bhatnagar, Gross e Krook (1954) e mais tarde, incorporada ao LBM.

De acordo com Kremer (2005), duas propriedades devem ser satisfeitas tanto para a aproximação do termo de colisão  $\mathcal{J}(f)$  como para o verdadeiro termo de colisão  $\mathcal{Q}(f, f)$ ,

- a) para todos os invariantes de soma  $\psi = m$ ,  $me_i$ ,  $me^2/2$ , tem-se que:  $\int \psi \mathcal{Q}(f, f) d\vec{e} = 0$ , então  $\int \psi \mathcal{J}(f) d\vec{e} = 0$ .
- b) o teorema H deve ser satisfeito, isto é:  $\int \ln f \, \mathcal{Q}(f, f) \, d\vec{e} \leq 0, \text{ então } \int \ln f \, \mathcal{J}(f) \, d\vec{e} \leq 0.$

A aproximação para  $\mathcal Q$  será representada por  $\mathcal J$ . Esta aproximação é denominada de BGK e fornecida por,

$$\mathcal{J}(f) = \varpi \left( f^{eq} - f \right), \tag{4.13}$$

onde  $f^{eq}$  é a função distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann e  $\varpi$  representa frequência de colisão.

Quer-se encontrar  $f^{eq}$  de forma que o termo de colisão (4.13) se aproxime de zero, ou seja,  $f \to f^{eq}$ . Exitem funções que atendem este propósito e uma delas é descrita no texto que segue. Assim, a função distribuição das velocidades de Maxwell  $f^{eq}$  é uma função de distribuição em equilíbrio e é dada pela expressão que segue (GOLBERT, 2013),

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi/3)^{D/2}} exp\left[-\frac{3}{2} (\vec{e} - \vec{u}) (\vec{e} - \vec{u})\right], \tag{4.14}$$

onde D é a dimensão do espaço,  $\rho$  é o valor macroscópico da massa específica,  $\vec{e}$  é o vetor velocidade das partículas,  $\vec{u}$  é avelocidade macroscópica (velocidade do fluido).

Depois destas intervenções, a equação (4.11) é reescrita na forma de (4.15) com a aproximação BGK para o operador de colisão (LIU, 2009),

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{e} \cdot \nabla f = -\varpi \left( f - f^{eq} \right) + \vec{S}, \tag{4.15}$$

em que  $\vec{S}$  indica uma força de corpo.

Pretende-se que a equação (4.15) passe por uma discretização e torne-se na equação do LBM. Para isto, serão necessárias três discretizações: no espaço de velocidades e nos domínios espacial e temporal. Sabe-se que, a função distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann (4.14) não recupera as equações de águas rasas (ZHOU, 2004). Portanto, faz-se necessário buscar outra alternativa que será descrita no próximo capítulo.

# 5 MÉTODO DO RETICULADO DE BOLTZMANN

O método do reticulado de Boltzmann, de acordo com Chen e Doolen (1998), é um esquema numérico baseado em equações cinéticas formuladas em uma escala mesoscópica que simula a dinâmica do fluido em uma escala macroscópica. A dinâmica deste método é dada pela equação do reticulado de Boltzmann, a qual mostra como ocorrem as distribuições das partículas. Ao comparar as equações governantes do LBM e do LGCA, percebe-se a familiaridade entre elas. Isto porque a equação do LBM é oriunda da equação governante do esquema LGCA, fazendo a substituição das variáveis Booleanas que representam as distribuições de partículas  $n_{\alpha}$ , presentes na equação do LGCA, pelas funções reais de distribuição de partículas  $f_{\alpha} = \langle n_{\alpha} \rangle$ , onde  $\langle . \rangle$  representa uma média por amostra, negligenciando-se o movimento individual das partículas.

A microdinâmica dos autômatos celulares do tipo gás em rede é descrita pela equação (4.3) e o método do reticulado de Boltzmann é desenvolvido a partir do LGCA, substituindo-se a função Booleana por uma função distribuição de partículas contínua e obtendo-se a equação do reticulado de Boltzmann. Também pode-se obter a LBE a partir da equação cinética contínua de Boltzmann (4.15), conforme será apresentado na próxima seção.

### 5.1 LBM COM OPERADOR DE COLISÃO BGK

### 5.1.1 Equação do Método do Reticulado de Boltzmann

Nesta seção, a equação governante do método do reticulado de Boltzmann com operador de colisão BGK é obtida. Para isto, obtém-se um modelo discreto, a partir da equação cinética de Boltzmann (4.15), e o primeiro passo se concentra em limitar o número de direções possíveis para uma partícula, e, consequentemente, o vetor velocidade das partículas  $\vec{e}_{\alpha}$  também será limitado de acordo com o número de direções possíveis no reticulado escolhido. Neste sentido, foi feita a substituição sugerida em (5.1) (LIU, 2009),

$$f_{\alpha} = f \qquad e \qquad f_{\alpha}^{eq} = f^{eq}, \tag{5.1}$$

em que  $\alpha$  representa as possíveis direções de movimento de uma partícula. Esta informação depende do reticulado escolhido para proceder com a simulação, por exemplo, se o reticulado escolhido for o D2Q9, têm-se que as partículas possuem 9 possíveis direções de movimento,  $f_{\alpha}$  é a função distribuição de partículas no modelo discretizado e representa a probabilidade de uma partícula seguir determinada direção,  $f_{\alpha}^{eq}$  é a função distribuição de equilíbrio local no modelo discretizado.

Considerando as substituições apresentadas em (5.1), tem-se também que a força de corpo indicada em (4.15), assume também a forma discretizada,

$$S_{\alpha} = S. \tag{5.2}$$

Com a substituição de (5.1) e (5.2) em (4.15), têm-se um modelo discretizado na velocidade das partículas,

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \vec{e}_{\alpha} \cdot \nabla f_{\alpha} = -\varpi \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq} \right) + S_{\alpha}, \tag{5.3}$$

em que  $\vec{e}_{\alpha}$  representa o vetor velocidade das partículas para cada direção possível do reticulado escolhido.

De acordo com Zhou (2004),  $S_{\alpha}$  é uma força de corpo, expressa da seguinte forma,

$$S_{\alpha} = \frac{1}{Ne^2} e_{\alpha i} F_i, \tag{5.4}$$

onde  $e = \Delta x/\Delta t$  é a velocidade no reticulado,  $\Delta x$  é o espaçamento da malha,  $\Delta t$  é o incremento no tempo e  $e_{\alpha i}$ : representa a componente do vetor  $\vec{e}_{\alpha}$  na direção i.

Tem-se também em (5.4), a constante N, que é calculada de acordo com o reticulado escolhido,

$$N = \frac{1}{e^2} \sum_{\alpha} e_{\alpha i} e_{\alpha i} \tag{5.5}$$

Na equação (4.15) tem-se a equação cinética de Boltzmann com aproximação BGK para o operador de colisão, porém quer-se obter a equação do reticulado de Boltzmann. Para isso, são necessárias três discretizações: no espaço de velocidades e nos domínios espacial e temporal.

A discretização do espaço de velocidades foi realizada quando  $\vec{e}$  foi substituído por  $\vec{e}_{\alpha}$ , como pode-se observar em (5.3). As discretizações espacial e temporal são obtidas observando que os termos do lado esquerdo de (5.3) representam uma derivada de Lagrange (derivada material). Para isto, utilizou-se a definição de derivada de Lagrange apresentada por Ferrás (2007).

**Definição:** Seja  $\varphi(t, \vec{\phi})$ , onde  $\vec{\phi} = (\phi_1, \phi_2, ..., \phi_m)$  são as coordenadas do vetor deslocamento e  $\vec{u}(t, \vec{\phi})$  é a velocidade. Então a derivada,

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(t,\vec{\phi}\right) + \vec{u}\left(t,\vec{\phi}\right) \cdot \nabla\varphi\left(t,\vec{\phi}\right) = \frac{D\varphi}{Dt},\tag{5.6}$$

dá-se o nome de derivada de Lagrange ou derivada material.

Deste modo o lado esquerdo da equação (5.3) pode ser visto da seguinte forma,

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \vec{e_{\alpha}} \cdot \nabla f_{\alpha} = \frac{Df_{\alpha}}{Dt}.$$
 (5.7)

A derivada de Lagrange tem a seguinte forma discretizada,

$$\frac{Df_{\alpha}}{Dt} = \frac{f_{\alpha} \left( \vec{x} + \vec{e_{\alpha}} \Delta t, t + \Delta t \right) - f_{\alpha} \left( \vec{x}, t \right)}{\Delta t}.$$
 (5.8)

Substituindo (5.8) em (5.3), resulta a equação do método do reticulado de Boltzmann,

$$f_{\alpha}\left(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t\right) - f_{\alpha}\left(\vec{x}, t\right) = -\frac{1}{\tau}\left[f_{\alpha}\left(\vec{x}, t\right) - f_{\alpha}^{eq}\left(\vec{x}, t\right)\right] + \Delta t S_{\alpha},\tag{5.9}$$

em que  $\alpha=0,...,M-1$  e  $\tau=1/\Delta t \varpi$ , onde  $\tau$  é o parâmetro de relaxamento que está relacionado com os fenômenos difusivos no problema.

Considerando o reticulado D2Q9, a expressão (5.5), fica reescrita na forma,

$$N = \frac{1}{e^2} \sum_{\alpha} e_{\alpha x} e_{\alpha x} = \frac{1}{e^2} \sum_{\alpha} e_{\alpha y} e_{\alpha y} = 6.$$
 (5.10)

Considerando o resultado apresentado em (5.10), a expressão (5.4), fica reescrita na forma,

$$S_{\alpha} = \frac{1}{6e^2} e_{\alpha i} F_i, \tag{5.11}$$

em que  $F_i$  é o termo de força definido em (3.5). Nesta tese são desconsiderandos os efeitos da tensão de cisalhamento do vendo com a superfície da água e o efeito de Coriolis. Portanto, o termo de força é dado por,

$$F_i = -gh\frac{\partial z_b}{\partial x_i} - \frac{\tau_{bi}}{\rho}.$$
 (5.12)

Portanto, (5.9) assume a forma,

$$f_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - f_{\alpha}(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau} \left[ f_{\alpha}(\vec{x}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t) \right] + \frac{\Delta t}{6e^{2}} e_{\alpha i} F_{i},$$
onde  $\alpha = 0, ..., M - 1$ . (5.13)

A equação (5.13) descreve a colisão e a propagação de distribuições contínuas de partículas. Pode-se separá-la nas etapas de colisão,

$$\bar{f}_{\alpha}(\vec{x},t) = f_{\alpha}(\vec{x},t) - \frac{1}{\tau} \left[ f_{\alpha}(\vec{x},t) - f_{\alpha}^{eq}(\vec{x},t) \right] + \frac{\Delta t}{6e^2} e_{\alpha i} F_i, \quad \alpha = 0, ..., M - 1,$$
 (5.14)

e propagação,

$$f_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e_{\alpha}}\Delta t, t + \Delta t) = \bar{f_{\alpha}}(\vec{x}, t), \quad \alpha = 0, ..., M - 1.$$
 (5.15)

A equação do reticulado de Boltzmann apresentada (5.13) está descrita de forma a incorporar as características de escoamentos governados pelas equações de águas rasas. Dependendo das equações macroscópicas governantes a LBE pode apresentar modificações, como por exemplo Golbert (2013), que trabalha com as equações de Navier-Stokes na simulação de problemas de hemodinâmica e Zhang, Feng e Yang (2015), que apresenta simulação de problemas de escoamento superficial e Galina et al. (2017) que apresenta o escoamento em bacias hidrográficas naturais, ambos por meio do LBM.

De posse da equação do reticulado de Boltzmann, procede-se com a construção da função distribuição de equilíbrio, porém antes é necessário estabelecer qual reticulado será usado para obtê-la. Nesta tese, o reticulado usado é D2Q9, por ser recomendado para simular escoamentos de canais governados pelas equações de águas rasas, simulado por meio do LBM (ZHOU, 2004; LIU; ZHOU; BURROWS, 2010; LIU; LI; SHU, 2012; PENG et al., 2014; LI; HUANG; LI, 2015).

#### 5.1.2 Reticulado D2Q9

O reticulado fornece as possíveis direções de movimento das partículas no LBM. Inicialmente os reticulados apresentados foram definidos em duas e três dimensões. Somente mais tarde foram apresentados reticulados unidimensionais (WEI et al., 2004).

As famílias de reticulados são classificadas pela dimensão e pelo número de velocidades DnQm, onde n representa a dimensão e m a quantidade de velocidades do reticulado (possibilidades de movimento para as distribuições de partículas) (ALIM, 2001).

Todos os problemas desta tese serão simulados usando o D2Q9 devido a sua larga utilização em escoamentos de canais governado pelas equações de águas rasas, simulado por meio do LBM (ZHOU, 2004; LIU; ZHOU; BURROWS, 2009; PENG et al., 2014; LI; HUANG; LI, 2015). Os demais reticulados simétricos serão apresentados no apêndice B.

O reticulado D2Q9 possui oito direções não nulas de movimento, conforme Figura 6. Este reticulado é quadrado sendo necessário introduzir duas velocidades (cardeal e colateral) para as partículas, de acordo com a distância a ser percorrida em um passo de tempo. Uma partícula segue na direção de uma das 9 possibilidades, de acordo com as velocidades estabelecidas, sendo que uma delas é permanecer no mesmo local (BAO; MESKAS, 2011).

Com relação as oito velocidades não-nulas, nota-se que as direções cardeais são mais lentas e terão módulo  $e = \Delta x/\Delta t$ . As direções colaterais são mais rápidas, pois

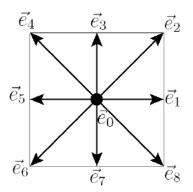


Figura 6 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D2Q9. Fonte: A autora (2017)

precisam percorrer maior distância utilizando o mesmo tempo das direções cardeais e terão módulo  $\sqrt{2}e$ . De acordo com Alim (2001), as direções do movimento das partículas são dadas por,

$$\vec{e}_{\alpha} = \begin{cases} (0,0), & \text{se } \alpha = 0 \\ e\left(\cos\frac{2\pi(\alpha - 1)}{8}, sen\frac{2\pi(\alpha - 1)}{8}\right), & \text{se } \alpha = 1, 3, 5, 7 \\ e\sqrt{2}\left(\cos\frac{2\pi(\alpha - 1)}{8}, sen\frac{2\pi(\alpha - 1)}{8}\right), & \text{se } \alpha = 2, 4, 6, 8. \end{cases}$$
(5.16)

# 5.1.3 Função Distribuição de Equilíbrio para Águas Rasas e Variáveis Macroscópicas

Com a função distribuição de equilíbrio decide-se qual equação macroscópica será resolvida por meio da LBE. Por exemplo, Chen e Doolen (CHEN; DOOLEN, 1998), simulou problemas governados pelas equações de Navier-Stokes e em (ZHOU, 2004) foram resolvidos problemas envolvendo as equações de águas rasas.

Apresentou-se na seção (4.3) a função distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann (4.14). A expressão para  $f^{eq}$  em (4.14), pode ser simplificada por meio de uma expansão em série de Taylor em  $\vec{u}$  até  $O(\vec{u}^2)$ . Portanto, tem-se,

$$f_{\alpha}^{eq} = w_{\alpha} \rho \left[ 1 + \frac{3(\vec{e}_{\alpha}.\vec{u})}{e^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{e}_{\alpha}.\vec{u})^2}{e^4} - \frac{3}{2} \frac{(\vec{u}.\vec{u})}{e^2} \right], \tag{5.17}$$

em que  $w_{\alpha}$  são os pesos associados a cada uma das direções do reticulado escolhido. Para o reticulado D2Q9,

$$w_{\alpha} = \begin{cases} \frac{4}{9}, & se \ \alpha = 0\\ \frac{1}{9}, & se \ \alpha = 1, 3, 5, 7\\ \frac{1}{36}, & se \ \alpha = 2, 4, 6, 8. \end{cases}$$
 (5.18)

A forma como a função distribuição de equilíbrio (5.17) foi escrita, recuperase apenas o sistema de Navier-Stokes. Portanto, a função distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann não pode ser usada para recuperar as equações de águas rasas. Como alternativa, pode-se obter a função distribuição de equilíbrio expressa como uma série de potências na velocidade macroscópica do fluido (ROTHMAN, 2004),

$$f_{\alpha}^{eq} = A_{\alpha} + B_{\alpha} e_{\alpha i} u_i + C_{\alpha} e_{\alpha i} e_{\alpha j} u_i u_j + D_{\alpha} u_i u_i, \tag{5.19}$$

onde  $A_{\alpha}$ ,  $B_{\alpha}$ ,  $C_{\alpha}$  e  $D_{\alpha}$  são constantes.

Considerando o reticulado D2Q9, pode-se observar sua simetria, resultando,

$$A_1 = A_3 = A_5 = A_7 = \overline{A}, \quad A_2 = A_4 = A_6 = A_8 = \widetilde{A},$$
 (5.20)

$$B_1 = B_3 = B_5 = B_7 = \overline{B}, \quad B_2 = B_4 = B_6 = B_8 = \widetilde{B},$$
 (5.21)

$$C_1 = C_3 = C_5 = C_7 = \overline{C}, \quad C_2 = C_4 = C_6 = C_8 = \widetilde{C},$$
 (5.22)

$$D_1 = D_3 = D_5 = D_7 = \overline{D} \ e \ D_2 = D_4 = D_6 = D_8 = \widetilde{D}.$$
 (5.23)

Pode-se reescrever (5.19) na seguinte forma,

$$f_{\alpha}^{eq} = \begin{cases} A_0 + D_0 u_i u_i, & \text{se } \alpha = 0\\ \bar{A} + \bar{B} e_{\alpha i} u_i + \bar{C} e_{\alpha i} e_{\alpha j} u_i u_j + \bar{D} u_i u_i, & \text{se } \alpha = 1, 3, 5, 7\\ \tilde{A} + \tilde{B} e_{\alpha i} u_i + \tilde{C} e_{\alpha i} e_{\alpha j} u_i u_j + \tilde{D} u_i u_i, & \text{se } \alpha = 2, 4, 6, 8. \end{cases}$$
(5.24)

As constantes em (5.24) são determinadas levando em consideração algumas restrições na função distribuição de equilíbrio, ou seja, devem obedecer as relações de conservação da massa e quantidade de movimento referentes as equações de águas rasas,

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}^{eq} \left( \vec{x}, t \right) = h \left( \vec{x}, t \right), \tag{5.25}$$

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha i} f_{\alpha}^{eq} \left( \vec{x}, t \right) = h \left( \vec{x}, t \right) u_i \left( \vec{x}, t \right)$$

$$(5.26)$$

е

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha i} e_{\alpha j} f_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} g h^{2}(\vec{x}, t) \, \delta_{ij} + h(\vec{x}, t) \, u_{i}(\vec{x}, t) \, u_{j}(\vec{x}, t) \,. \tag{5.27}$$

A função distribuição de equilíbrio (5.24) é construída de acordo com as restrições (5.25), (5.26) e (5.27). Juntando esta construção com a LBE (5.13) obtém-se a solução para as equações de águas rasas. A demonstração deste resultado pode ser encontrada em Zhou (2004).

Zhou (2004) trás também os cálculos das constantes que aparecem em (5.24),

$$A_0 = h - \frac{5gh^2}{6e^2}, \qquad D_0 = -\frac{2h}{3e^2},$$
 (5.28)

$$\overline{A} = \frac{gh^2}{6e^2}, \quad \overline{B} = \frac{h}{3e^2}, \quad \overline{C} = \frac{h}{2e^4}, \quad \overline{D} = -\frac{h}{6e^2},$$
 (5.29)

$$\widetilde{A} = \frac{gh^2}{24e^2}, \quad \widetilde{B} = \frac{h}{12e^2}, \quad \widetilde{C} = \frac{h}{8e^4}, \quad \widetilde{D} = -\frac{h}{24e^2}.$$
 (5.30)

Reescreve-se (5.24) e obtém-se a função distribuição de equilíbrio, que juntamente com a LBE (5.13), recupera-se as equações de águas rasas,

$$f_{\alpha}^{eq} = \begin{cases} h - \frac{5gh^2}{6e^2} - \frac{2h}{3e^2} u_i u_i, & \text{se } \alpha = 0\\ \frac{gh^2}{6e^2} + \frac{h}{3e^2} e_{\alpha i} u_i + \frac{h}{2e^4} e_{\alpha i} e_{\alpha j} u_i u_j - \frac{h}{6e^2} u_i u_i, & \text{se } \alpha = 1, 3, 5, 7\\ \frac{gh^2}{24e^2} + \frac{h}{12e^2} e_{\alpha i} u_i + \frac{h}{8e^4} e_{\alpha i} e_{\alpha j} u_i u_j - \frac{h}{24e^2} u_i u_i, & \text{se } \alpha = 2, 4, 6, 8. \end{cases}$$
(5.31)

De posse da LBE (5.13) e da função distribuição de equilíbrio (5.31), busca-se determinar as quantidades físicas de interesse, a profundidade e a velocidade da água. Estas variáveis macroscópicas também serão determinadas de forma a recuperar as equações de águas rasas (PENG, 2012).

Tomando a soma de momento zero da função distribuição em (5.9), obtém-se que (ZHOU, 2004),

$$\sum_{\alpha} \left[ f_{\alpha} \left( \vec{x} + \vec{e}_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t \right) - f_{\alpha} \left( \vec{x}, t \right) \right] = -\frac{1}{\tau} \sum_{\alpha} \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq} \right) + \frac{\Delta t}{N_{\alpha} e^2} \sum_{\alpha} e_{\alpha i} F_i \left( \vec{x}, t \right). \tag{5.32}$$

Em (5.32),  $\sum_{\alpha} e_{\alpha i} F_i(\vec{x}, t) = 0$  e deste modo fica reescrita,

$$\sum_{\alpha} \left[ f_{\alpha} \left( \vec{x} + \vec{e}_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t \right) - f_{\alpha} \left( \vec{x}, t \right) \right] = -\frac{1}{\tau} \sum_{\alpha} \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq} \right). \tag{5.33}$$

A necessidade de preservar as propriedades de conservação da massa e da quantidade de movimento devem ser impostas ao LBM. No caso da conservação da massa, observa-se a restrição (5.34), que é a equação da continuidade,

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha} \left( \vec{x} + \vec{e}_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t \right) \equiv \sum_{\alpha} f_{\alpha} \left( \vec{x}, t \right). \tag{5.34}$$

Ao substituir parcelas de (5.33) por (5.34), obtém-se,

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}(\vec{x}, t) \equiv \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t). \tag{5.35}$$

Comparando (5.25) com (5.35), obtém-se a definição da quantidade física, profundidade da água,

$$h(\vec{x},t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\vec{x},t). \tag{5.36}$$

Busca-se a partir de agora uma definição para a velocidade do fluido. Tomando a soma do primeiro momento da função distribuição em (5.9), obtém-se (5.37), (ZHOU, 2004),

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha i} \left[ f_{\alpha} \left( \vec{x} + \vec{e}_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t \right) - f_{\alpha} \left( \vec{x}, t \right) \right] =$$

$$-\frac{1}{\tau} \sum_{\alpha} e_{\alpha i} \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq} \right) + \frac{\Delta t}{N_{\alpha} e^{2}} \sum_{\alpha} e_{\alpha i} e_{\alpha j} F_{i} \left( \vec{x}, t \right).$$

$$(5.37)$$

Usando o fato de que,

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha i} e_{\alpha j} = 6e^2 \delta_{ij}, \tag{5.38}$$

a expressão (5.37) fica reescrita na forma apresentada em (5.40). Em (5.38) tem-se que  $\delta_{ij}$  é a função delta de Kronecker, dada por,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} . \tag{5.39}$$

A espressão (5.40) reflete a evolução da quantidade de movimento acumulado na função distribuição,

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha i} \left[ f_{\alpha} \left( \vec{x} + \vec{e}_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t \right) - f_{\alpha} \left( \vec{x}, t \right) \right] = -\frac{1}{\tau} \sum_{\alpha} e_{\alpha i} \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq} \right) + \Delta t F_{i} \left( \vec{x}, t \right). \tag{5.40}$$

No caso da conservação da quantidade de movimento, é necessário satisfazer a seguinte identidade,

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha i} \left[ f_{\alpha} \left( \vec{x} + \vec{e}_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t \right) - f_{\alpha} \left( \vec{x}, t \right) \right] \equiv \Delta t F_{i} \left( \vec{x}, t \right). \tag{5.41}$$

A identidade (5.41) é a equação que representa a segunda lei de Newton.

Ao substituir parcelas de (5.40) por (5.41), e comparando o resultado com (5.26) obtém-se (5.42), que fornece a velocidade do escoamento da água,

$$u_i(\vec{x},t) = \frac{1}{h(\vec{x},t)} \sum_{\alpha} e_{\alpha i} f_{\alpha}(\vec{x},t).$$
 (5.42)

É possível provar que a profundidade e a velocidade da água calculadas a partir das expressões (5.36) e (5.42), são soluções para as equações de águas rasas (ZHOU et al., 2010).

## 5.1.4 Recuperação das Equações de Águas Rasas

Nesta seção pretende-se abordar as principais considerações envolvidas no processo de recuperação das equações de águas rasas (3.4) a partir da LBE (5.13), da função distribuição de equilíbrio (5.31), das expressões (5.36) e (5.42). Este processo é feito por meio da análise de Chapman-Enskog que conecta a LBE com as equações governantes do escoamento (LIU, 2009).

Assumindo que  $\Delta t$  é pequeno e considerando que  $\Delta t = \varepsilon$ , a LBE (5.13) fica expressa por,

$$f_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\varepsilon, t + \varepsilon) - f_{\alpha}(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau} \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq} \right) + \frac{\varepsilon}{6e^{2}} e_{\alpha j} \vec{F}_{j}(\vec{x}, t).$$
 (5.43)

Aplicando a expansão de Taylor para o primeiro termo do lado esquerdo da equação (5.43) no tempo e em torno do ponto  $(\vec{x},t)$ , obtém-se,

$$\varepsilon \left( \frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \right) f_{\alpha} + \frac{1}{2} \varepsilon^{2} \left( \frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \right)^{2} f_{\alpha} + O\left(\varepsilon^{2}\right) =$$

$$-\frac{1}{\tau} \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{(0)} \right) + \frac{\varepsilon}{6e^{2}} e_{\alpha j} \vec{F}_{j} \left( \vec{x}, t \right),$$
(5.44)

onde  $f_{\alpha}^{(0)} = f_{\alpha}^{eq}$ . Além disso,  $f_{\alpha}$  também pode ser expandido, por meio da série de Taylor, em torno de  $f_{\alpha}^{(0)}$ ,

$$f_{\alpha} = f_{\alpha}^{(0)} + \varepsilon f_{\alpha}^{(1)} + \varepsilon^2 f_{\alpha}^{(2)} + O\left(\varepsilon^3\right). \tag{5.45}$$

.

Substituindo (5.45) em (5.44), tem-se,

$$\varepsilon \left( \frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \right) \left( f_{\alpha}^{(0)} + \varepsilon f_{\alpha}^{(1)} + \varepsilon^{2} f_{\alpha}^{(2)} \right) + 
\frac{1}{2} \varepsilon^{2} \left( \frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \right)^{2} \left( f_{\alpha}^{(0)} + \varepsilon f_{\alpha}^{(1)} + \varepsilon^{2} f_{\alpha}^{(2)} \right) + O(\varepsilon^{3}) = 
- \frac{1}{\tau} \left( \varepsilon f_{\alpha}^{(1)} + \varepsilon^{2} f_{\alpha}^{(2)} \right) + \frac{\varepsilon}{6e^{2}} e_{\alpha j} \vec{F}_{j} \left( \vec{x}, t \right).$$
(5.46)

Desprezando os termos com ordem superior a  $\varepsilon^2$ , procede-se com a separação da equação (5.46) de acordo com a ordem de  $\varepsilon$ . Inicialmente, a equação (5.46) é reescrita para a ordem  $\varepsilon$ ,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_j}\right) f_{\alpha}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_{\alpha}^{(1)} + \frac{1}{6e^2} e_{\alpha j} \vec{F}_j \left(\vec{x}, t\right), \tag{5.47}$$

e em seguida para a ordem  $\varepsilon^2$ ,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_j}\right) f_{\alpha}^{(1)} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_j}\right)^2 f_{\alpha}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_{\alpha}^{(2)}. \tag{5.48}$$

Isolando  $f_{\alpha}^{(0)}$  em (5.47) e substituindo em (5.48), obtém-se (5.49), após o reagrupamento dos termos,

$$\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_i}\right) f_{\alpha}^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_{\alpha}^{(2)} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + e_{\alpha j} \frac{\partial}{\partial x_i}\right) \left(\frac{1}{6e^2} e_{\alpha k} \vec{F_k}\right).$$
(5.49)

Multiplicando-se a equação (5.49) por  $\varepsilon$ , somando-se a equação (5.47) e tomando o somatório resulta em,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{(0)} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{\alpha} e_{\alpha j} f_{\alpha}^{(0)} \right) = -\varepsilon \frac{1}{12e^2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{\alpha} e_{\alpha j} e_{\alpha k} \vec{F}_k \right). \tag{5.50}$$

Considerando a precisão de primeira ordem para o termo de força e avaliando os outros termos da equação (5.50) usando (5.16) e (5.31), obtém-se a primeira equação de (3.4), que é equação da continuidade para escoamento de águas rasas.

Para obter as equações de conservação da quantidade de movimento apresentadas em (3.4), procede-se com o somatório de  $e_{\alpha i}$  vezes 5.47 somando-se a  $\varepsilon$  vezes (5.49) e considera-se precisão de primeira ordem para o termo de força.

A forma como a LBE (5.9) é dada, tem-se precisão de primeira ordem para as equações de águas rasas, devido a abordagem do termo de força. Para obter precisão de segunda ordem Zhou (ZHOU, 2004) indica o uso do esquema centrado para tratar o termo de força.

### 5.1.5 Estabilidade

Originalmente desenvolvido a partir do LGCA, o LBM herdou estabilidade numérica incondicional, porém o uso de operadores de colisão que correspondiam a médias sobre as colisões dos modelos de gás em rede, apresentava um custo computacional elevado. Novas propostas surgiram com o objetivo de simplificar o operador de colisão, o que resultou em operadores como o BGK. Utilizando este novo operador, ganhou-se eficiência numérica e perdeu-se a garantia da estabilidade numérica fornecida pelo teorema H (STERLING; CHEN, 1996).

Como o LBM não possui estabilidade numérica garantida, estudos sinalizaram algumas condições necessárias para que o método tenha estabilidade. O que ocorre é que a estabilidade linear depende de muitos parâmetros, o que impede a sua caracterização completa (STERLING; CHEN, 1996; ZHOU, 2004).

A respeito das condições para obter a estabilidade do LBM, um primeiro olhar deve ser dirigido para a viscosidade cinemática, que é ser positiva em problemas de escoamento envolvendo fenômenos de difusão. A viscosidade descreve a tensão que ocorre entre duas camadas de fluido que se movem com velocidades diferentes e indica quanto de impulso é difundido pelo fluido em um fluxo padrão não homogêneo (CHOPARD; DROZ, 1998).

A viscosidade cinemática,  $\nu$ , é uma propriedade do fluido e relaciona-se com o parâmetro de relaxamento,  $\tau$ , presente no termo de colisão da LBE ((HE; LUO, 1997) e (ZHOU, 2004)),

$$\frac{\Delta t}{\left(\Delta x\right)^2} = \frac{2\tau - 1}{6\nu},\tag{5.51}$$

com  $\tau > 1/2$  (STERLING; CHEN, 1996).

Ao isolar  $\tau$  na expressão (5.51), pode-se ver que refinando o espaçamento do reticulado ( $\Delta x$ ) ou aumentando o passo temporal ( $\Delta t$ ), consegue-se aumentar o parâmetro de relaxamento. É possível também ajustá-los ao mesmo tempo, porém o custo computacional aumenta (GOLBERT, 2013).

A próxima condição para sinalizar a estabilidade do LBM é garantir que a magnitude da velocidade física resultante do fluido é menor do que a velocidade no reticulado  $e = \Delta x/\Delta t$  que depende do reticulado, conforme vê-se em (5.52) (ZHOU, 2004),

$$\frac{|\vec{u}|^2}{e^2} < 1, (5.52)$$

O lado esquerdo de (5.52) é o denominado número de Courant (STERLING;

CHEN, 1996). Também registra-se esta ocorrência para a celeridade, ou seja,

$$\frac{gh}{e^2} < 1. \tag{5.53}$$

onde  $\vec{u}_i$  é o vetor de velocidade física do fluido, g é a aceleração da gravidade e h é a profundidade da água.

Além das condições citadas, ainda é introduzido uma condição sobre termos que aparecem na expressão do número de Froude,

$$F_r = \frac{|\vec{u}|}{\sqrt{gh}}. (5.54)$$

A condição é que,

$$\frac{\left|\vec{u}\right|^2}{gh} < 1,\tag{5.55}$$

pois, o método do reticulado de Boltzmann está limitado a escoamentos subcríticos e isto sugere que o LBM é adequado para escoamentos subcríticos.

O número de Froude, apresentado em (5.54), desempenha papel importante no estudo dos canais, permitindo classificar os regimes de escoamento (subcrítico, supercrítico e crítico). Representa a relação de forças de inércia e da gravidade. É definido pela razão entre a velocidade média do escoamento  $\vec{u}_i$  e a celeridade (SZYMKIEWICZ, 2010). Têm-se, portanto, que, escoamento crítico quando  $F_r = 1$ , escoamento supercrítico quando  $F_r > 1$  e escoamento subcrítico quando  $F_r < 1$ 

A subrotina que verifica a estabilidade no método computacional desenvolvido é apresentada no apêndice A. A sua função é verificar todas as restrições e informar qual delas esta falhando, possibilitando assim, ter um domínio maior sobre qual restrição deve-se ter mais cuidado e também possibilitar que os parâmetros de simulação sejam modificados conforme a necessidade.

Ressalta-se que a condição (5.55) indica que o LBM é adequado para escoamentos subcríticos (ZHOU, 2004). Atualmente, esta limitação está sendo analisada, como pode ser vista no trabalho de Chopard, Pham e Lefèvre (2013), onde o escoamento é supercrítico, e no trabalho de La Rocca et al. (2015), onde o escoamento é transcrítico. Porém, somente casos simples unidimensionais foram abordados.

Além das condições impostas anteriormente, é preciso ser cuidadoso com as simulações de escoamentos de água. A viscosidade cinemática da água a temperatura de  $20^{\circ}$ C é  $\nu = 1 \times 10^{-6} \,\mathrm{m}^2/s$  e que em escoamentos com superfície livre, os números de Reynolds são altos,  $1 \times 10^{6}$ , característica de escoamento turbulento. Levando estas informações até a equação (5.51), observa-se que é preciso refinar muito a malha para que o

parâmetro de relaxamento fique próximo de 1/2. Este refinamento pode ocasionar alto custo computacional ou ainda não ter a capacidade de ser representado computacionalmente devido a grande quantidade de pontos na malha necessários para representar o problema. Para reverter este inconveniente, utiliza-se no LBM uma viscosidade artificial mais elevada do que a viscosidade cinemática do fluido e mostrou-se que os resultados estão em concordância com as simulações disponíveis na literatura (ZHOU, 2004; ZHOU et al., 2010; LA ROCCA; ADDUCE; SCIORTINO, 2012; JANBEN; GRILLI; KRAFCZYK, 2012; ZHOU; LIU, 2013). A justificativa para esta abordagem, de acordo com La Rocca, Adduce e Sciortino (2012), é que o LBM é um modelo intrinsecamente viscoso e a viscosidade numérica pode ser adequadamente ajustada em concordância com os parâmetros da discretização, possibilitando evitar instabilidades numéricas.

Janben, Grilli e Krafczyk (2012), simularam escoamento de água com viscosidade no LBM várias vezes mais elevada do que a viscosidade cinemática. Simulações foram feitas no mesmo problema, com o objetivo de manter a estabilidade e aproximar a viscosidade do LBM com a viscosidade cinemática. Observou-se que uma redução ainda maior na viscosidade no LBM não altera significativamente os resultados.

O LBM é um método numérico explícito (LUO, 2000) e portando é condicionalmente estável. Trabalha-se com a calibração de parâmetros (GOLBERT, 2013) obedecendo algumas condições necessárias (5.51), (5.52), (5.53) e (5.55), listadas anteriormente por Zhou (2004). De acordo com Zhou (2004), se as condições (5.51), (5.52), (5.53) e (5.55) forem satisfeitas, a simulação é estável.

#### 5.1.6 Importância e Considerações sobre o Operador de Colisão BGK

A equação cinética de Boltzmann, (4.10), possui um termo chamado de operador de colisão, responsável pelo transporte das propriedades macroscópicas como massa, momento e energia. O operador de colisão é complexo, com estrutura integro-diferencial, impossibilitando, na maioria dos casos, a obtenção de solução analítica. Como o termo de colisão depende da própria função de distribuição que se deseja calcular, fica inviável resolver o equação cinética de Boltzmann.

Mesmo em situações fisicamente simples, a solução analítica da equação de Boltzmann completa é consideravelmente complicada. Na maioria dos casos, não é possível obter a solução analítica. Para contornar as dificuldades, geralmente utiliza-se uma simplificação do termo de colisão que foi proposta por Bhatnagar, Gross e Krook, e por Welander em 1954. Chamada de aproximação BGK, esta simplificação substitui o operador de colisão por uma aproximação linear, facilitando os cálculos e permitindo a compreensão física de forma simples (BHATNAGAR; GROSS; KROOK, 1954).

Substituir um termo tão complexo da equação cinética de Boltzmann por um termo simplificado que é linear, parece não fornecer boa precisão. Porém isso não se

confirma. Foi visto no capítulo (2) vários trabalhos indicando que a aproximação BGK possui boa precisão.

Até o momento, o operador de colisão utilizado no método do reticulado de Boltzmann é o BGK, que é calculado como o produto da matriz de colisão e um vetor que representa a diferença entre o estado local das partículas e o seu estado de equilíbrio (GINZBURG, 2005). Muitas simulações foram desenvolvidas por meio do LBM-BGK e deram origem a excelentes resultados, porém o sucesso do LBM-BGK foi minimizado devido a presença de instabilidades numéricas e principalmente a falta de condições necessárias para melhorar a estabilidade das simulações (LALLEMAND; LUO, 2000; D'HUMIÈRES et al., 2002). Neste sentido, encontrar uma maneira de capturar, de forma mais real e eficiente, a física envolvida no escoamento permitindo estabelecer caminhos para alcançar estabilidade numérica, passou a fazer parte do interesse de pesquisadores.

No LBM pode-se observar três esquemas de abordagem: Um único tempo de relaxamento (single relaxation time - SRT), dois tempos de relaxamento (two relaxation times - TRT) e múltiplos tempos de relaxamento (multiple relaxation times - MRT) (TUBBS, 2010; PENG; ZHANG; ZHOU, 2016). Deste modo, o operador de colisão BGK é também conhecido como a abordagem com um único tempo de relaxamento.

Neste trabalho de tese, optou-se por utilizar o operador de colisão BGK, por ser largamente utilizado na simulação do escomaneto em canais, e o MRT, por ter mais estabilidade do que o BGK. O operador de colisão BGK foi descrito na seção (4.3) e o MRT será descrito a seguir.

#### 5.2 LBM COM OPERADOR DE COLISÃO MRT

O LBM é um método numérico inovador e sua potencialidade foi confirmada com o sucesso das simulações numéricas que falharam com o seu antecessor, o LGCA. O LBM contorna duas grandes deficiências do LGCA, minimiza o ruído estatístico e elimina valores limitados para os coeficientes de transporte, ambos devido à natureza Booleana do método. A LBE, inicialmente, apresenta um operador de colisão que é calculado como o produto da matriz de colisão e um vetor que representa a diferença entre estado local das partículas e o seu estado de equilíbrio (GINZBURG, 2005). Este operador de colisão é o conhecido BGK.

Pretende-se capturar, de forma mais real e eficiente, a física envolvida no escoamento permitindo estabelecer caminhos para alcançar estabilidade numérica. Uma maneira de fazer esta captura, foi proposta por d'Humieres (D'HUMIÈRES, 1992), introduzindo uma nova abordagem para o operador de colisão. No entanto, foram Lallemand e Luo (LALLEMAND; LUO, 2000) que fizeram uma análise sobre a estabilidade do LBM-MRT, mostrando como melhorar o modelo de forma sistemática e coerente.

A proposta do LBM-MRT é construir um modelo hidrodinâmico generalizado que permite simular um escoamento de fluido, representando a física do problema por meio de parâmetros ajustáveis que possuem maior liberdade. Um modelo hidrodinâmico generalizado é caracterizado pela dispersão, dissipação, anisotropia, sem garantir a invariância de Galileu e instabilidades dos modelos baseados no LBM. Os parâmetros ajustáveis são utilizados para otimizar as propriedades do modelo através de uma análise sistemática da hidrodinâmica generalizada do modelo. De forma geral, a análise hidrodinâmica permite melhorar as propriedades do LBM obtendo resultados mais próximos do real, pois agrega mais informações físicas do problema (LALLEMAND; LUO, 2000).

O uso de um único tempo de relaxamento, como na abordagem LBM-BGK, é uma deficiência do método, dependendo do problema que deseja-se simular. Para superar esta questão, usa-se a equação do reticulado de Boltzmann generalizada, mantendo a simplicidade do método e obtendo eficiência nas simulações (LALLEMAND; LUO, 2000).

O LBM-BGK é construído com base em um conjunto de  $\alpha$  velocidades discretas,  $\{e_{\alpha}/\alpha=0, 1, ..., (M-1)\}$ , com funções de distribuição  $\{f_{\alpha}/\alpha=0, 1, ..., (M-1)\}$  em um espaço vetorial M-dimensional  $\mathbb{R}^M$  baseado no conjunto discreto de velocidades. Por outro lado, pode-se também construir a etapa de colisão com base em um espaço de momentos de  $f_{\alpha}$ . Ou seja, migra-se do espaço de velocidades, utilizado do LBM-BGK, para o espaço dos momentos, no LBM-MRT (LALLEMAND; LUO, 2000).

A justificativa para migrar do espaço de velocidades para o espaço dos momentos é dada no contexto da teoria cinética, onde vários processos físicos envolvendo fluidos, podem ser aproximados por acoplamento ou interação entre os "modos" (por exemplo, os "modos" hidrodinâmicos são combinações lineares de massa e momentos) do operador de colisão e esses "modos" estão diretamente relacionados com os momentos. Deste modo, a representação por meio de momentos proporciona uma forma de incorporar, de maneira mais efetiva, a física no LBM. O significado físico dos momentos são as quantidades hidrodinâmicas e seus fluxos, etc., e os parâmetros de relaxamento dos momentos estão diretamente relacionados com os coeficientes de transporte. Assim, é possível controlar cada "modo" independente. Esta abordagem supera deficiências do LBM-BGK, como por exemplo, o número de Prandtl fixo. Este número é fixo devido a utilização de um único tempo de relaxamento (LALLEMAND; LUO, 2000).

Pode-se reescrever a LBE-BGK (5.9) da seguinte maneira (LI; HUANG, 2008; D'HUMIÈRES et al., 2002),

$$f_{\alpha}\left(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t\right) - f_{\alpha}\left(\vec{x}, t\right) = -S\left(f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq}\right) + \frac{\Delta t}{N_{\alpha}e^{2}}e_{\alpha i}F_{i}\left(\vec{x}, t\right), \tag{5.56}$$

em que S é uma matriz colisão dada por  $S = 1/\tau I$ , onde I é a matriz identidade.

S é uma matriz diagonal cujos elementos são todos iguais a  $1/\tau$ . Ou seja, trata-se de um único tempo de relaxamento.

O interesse em reescrever (5.9) na forma de (5.56) está na preparação da LBE para ser apresentada de acordo com as condições do LBM-MRT. O LBM-BGK atua no espaço das velocidades e o LBM-MRT trabalha no espaço dos momentos. A principal mudança está no operador de colisão, pois utiliza-se o MRT ao invés do BGK. Portanto a LBE-BGK (5.56) fica muito semelhante a LBE-MRT (5.57) (PENG et al., 2014),

$$f_{\alpha}\left(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t\right) - f_{\alpha}\left(\vec{x}, t\right) = -\left(\mathbf{M_{t}}^{-1}\widehat{\mathbf{S}}\right)_{\alpha i}\left(m_{\alpha} - m_{\alpha}^{eq}\right) + \frac{\Delta t}{N_{\alpha}e^{2}}e_{\alpha i}F_{i}\left(\vec{x}, t\right), \quad (5.57)$$

em que  $M_t$  é a matriz que transforma um vetor do espaço  $\mathbb{V} = \mathbb{R}^M$ , gerado pelas velocidades discretas, em um vetor do espaço dos momentos  $\mathbb{M} = \mathbb{R}^M$ . A dimensão da matriz é dada pelo número de direções do reticulado.  $M_t^{-1}$  é a matriz inversa de  $M_t$ , que transforma as quantidades que estão no espaço dos momentos para o espaço das velocidades,  $m_{\alpha}$  são as funções de distribuição no espaço dos momentos para cada uma das direções do reticulado escolhido, onde  $\mathbf{m} = \mathbf{M_t}\mathbf{f}$ ,  $m_{\alpha}^{eq}$  são as funções de distribuição de equilíbrio no espaço dos momentos, onde  $\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{M_t}\mathbf{f}^{eq}$ ,  $\hat{S}$  é uma matriz diagonal  $\hat{\mathbf{S}} = diag\left(s_0, s_1, ..., s_{\alpha-1}\right)$ , onde os seus valores são definidos de acordo com o problema estudado. Por exemplo, nos escoamentos governados pelas equações de águas rasas, tem-se  $s_0 = s_1 = s_2 = s_3 = s_4 = s_5 = s_6$  e  $s_7 = s_8 = 1/\tau$  considerando o reticulado D2Q9.

Deste modo, como  $\mathbf{m} = \mathbf{M_t} \mathbf{f}$ , pode-se caracterizar as funções distribuição de equilíbrio do espaço dos momentos  $(m_{\alpha}^{eq})$  da seguinte forma,

$$m_{(0...8)}^{eq} = \begin{pmatrix} h \\ -4h + \frac{3gh^2}{e^2} + \frac{3h\left(u_x^2 + u_y^2\right)}{e^2} \\ 4h - \frac{9gh^2}{2e^2} - \frac{3h\left(u_x^2 + u_y^2\right)}{e^2} \\ \frac{hu_x}{e} \\ -\frac{hu_x}{e} \\ -\frac{hu_y}{e} \\ -\frac{hu_y}{e} \\ \frac{h\left(u_x^2 - u_y^2\right)}{e^2} \\ \frac{hu_x u_y}{e^2} \end{pmatrix}. \tag{5.58}$$

Pode-se separar a equação (5.57) nas etapas de colisão,

$$\bar{f}_{\alpha}(\vec{x},t) = -\left(\mathbf{M_t}^{-1}\widehat{\mathbf{S}}\right)_{\alpha i} \left(m_{\alpha} - m_{\alpha}^{eq}\right) + \frac{\Delta t}{6e^2} e_{\alpha i} \vec{F}_i, \alpha = 0, ..., M - 1,$$
(5.59)

e propagação,

$$f_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e_{\alpha}}\Delta x, \ t + \Delta t) = \bar{f_{\alpha}}(\vec{x}, \ t), \ \alpha = 0, ..., M - 1.$$
 (5.60)

As funções de distribuição do espaço dos momentos podem ser obtidas por meio de  $\mathbf{m} = \mathbf{M_t} \mathbf{f}$ , tem-se também que as funções distribuição do espaço de velocidades podem ser obtidas por meio de  $\mathbf{f} = \mathbf{M_t^{-1}m}$  (LALLEMAND; LUO, 2000).

Considerando o reticulado D2Q9, são escolhidos momentos (5.61) para cada uma das 9 velocidades (LALLEMAND; LUO, 2000). Estes momentos formarão a matriz  $M_t$ , que é a matriz transformação do espaço das velocidades para o espaço dos momentos,

$$\begin{cases}
\boldsymbol{\rho}^{T} = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)^{T}, \\
\mathbf{e}^{T} = (-4, -1, 2, -1, 2, -1, 2, -1, 2)^{T}, \\
\boldsymbol{\varepsilon}^{T} = (4, -2, 1, -2, 1, -2, 1, -2, 1)^{T}, \\
\mathbf{j_{x}}^{T} = (0, 1, 1, 0, -1, -1, -1, 0, 1)^{T}, \\
\mathbf{q_{x}}^{T} = (0, -2, 1, 0, -1, 2, -1, 0, 1)^{T}, \\
\mathbf{j_{y}}^{T} = (0, 0, 1, 1, 1, 0, -1, -1, -1)^{T}, \\
\mathbf{q_{y}}^{T} = (0, 0, 1, -2, 1, 0, -1, 2, -1)^{T}, \\
\mathbf{p_{xx}}^{T} = (0, 1, 0, -1, 0, 1, 0, -1, 0)^{T}, \\
\mathbf{p_{xy}}^{T} = (0, 0, 1, 0, -1, 0, 1, 0, -1)^{T},
\end{cases}$$

em que  $\rho$  é o vetor que representa o modo da densidade, e é o modo de energia,  $\varepsilon$  está relacionada com o quadrado da energia,  $\mathbf{j_x}$  e  $\mathbf{j_y}$  correspondem as componentes x e y do fluxo de massa,  $\mathbf{q_x}$  e  $\mathbf{q_y}$  correspondem as componentes x e y do fluxo de energia,  $\mathbf{p_{xx}}$  e  $\mathbf{p_{xy}}$  correspondem as componentes na diagonal e fora da diagonal do tensor de tensões.

As componentes dos vetores em (5.61) são obtidas da seguinte forma,

$$\rho_{\alpha} = |e_{\alpha}|^{0} = 1,$$

$$\mathbf{e}_{\alpha} = -4|e_{\alpha}|^{0} + \frac{3}{e^{2}} \left(e_{\alpha x}^{2} + e_{\alpha y}^{2}\right),$$

$$\varepsilon_{\alpha} = 4|e_{\alpha}|^{0} - \frac{21}{2e^{2}} \left(e_{\alpha x}^{2} + e_{\alpha y}^{2}\right) + \frac{9}{2e^{4}} \left(e_{\alpha x}^{2} + e_{\alpha y}^{2}\right)^{2},$$

$$\mathbf{j}_{\mathbf{x}\alpha} = \frac{e_{\alpha x}}{e},$$

$$\mathbf{q}_{\mathbf{x}\alpha} = \left[-5|e_{\alpha}|^{0} + \frac{3}{e^{2}} \left(e_{\alpha x}^{2} + e_{\alpha y}^{2}\right)\right] \frac{e_{\alpha x}}{e},$$

$$\mathbf{j}_{\mathbf{y}\alpha} = \frac{e_{\alpha y}}{e},$$

$$\mathbf{q}_{\mathbf{y}\alpha} = \left[-5|e_{\alpha}|^{0} + \frac{3}{e^{2}} \left(e_{\alpha x}^{2} + e_{\alpha y}^{2}\right)\right] \frac{e_{\alpha y}}{e},$$

$$\mathbf{p}_{\mathbf{x}\mathbf{x}\alpha} = \frac{1}{e^{2}} \left(e_{\alpha x}^{2} - e_{\alpha y}^{2}\right),$$

$$\mathbf{p}_{\mathbf{x}\mathbf{y}\alpha} = \frac{e_{\alpha x}e_{\alpha y}}{e^{2}},$$
(5.62)

em que  $e_{\alpha,x}$  e  $e_{\alpha,y}$  são as componente x e y do vetor velocidade na direção  $\alpha$ , respectivamente.

Considerando (5.61), a matriz de transformação  $\mathbf{M_t}$  é dada por,

$$\mathbf{M_{t}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\rho} \\ \mathbf{e} \\ \boldsymbol{\varepsilon} \\ \mathbf{j_{x}} \\ \mathbf{q_{x}} \\ \mathbf{j_{y}} \\ \mathbf{q_{y}} \\ \mathbf{p_{xx}} \\ \mathbf{p_{xy}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & 2 & -1 & 2 & -1 & 2 & -1 & 2 \\ 4 & -2 & 1 & -2 & 1 & -2 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (5.63)

## 6 CONDIÇÕES DE CONTORNO NO LBM

Independente do problema a ser simulado, quanto melhor for a representação das características do problema pelas condições de contorno, melhor será o desempenho da simulação. Além disso, condições de contorno impróprias podem levar a resultados sem coerência física (HOU et al., 1995).

As condições de contorno serão apresentadas considerando o reticulado D2Q9, pois todas as aplicações foram realizadas utilizando o D2Q9 devido a sua satisfatória resposta de problemas envolvendo escoamento em canais (ZHOU, 2004; LIU; ZHOU; BURROWS, 2010; PENG et al., 2014; LI; HUANG; LI, 2015).

## 6.1 CONDIÇÃO DE ESCORREGAMENTO

Em algumas aplicações, como por exemplo, parede com resistência as escoamento desprezível, pode-se aplicar a condição de contorno de escorregamento.

Procede-se com a apresentação da Figura 7 onde pode-se notar que as funções distribuição de partículas  $f_2$ ,  $f_3$  e  $f_4$  são desconhecidas na parede inferior do canal. Com relação a parede superior, as funções desconhecidas são  $f_6$ ,  $f_7$  e  $f_8$  (LIU, 2009).

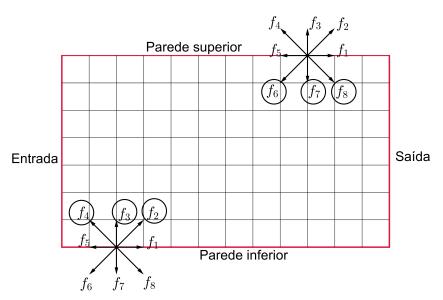


Figura 7 – Ilustração de pontos nas paredes superior e inferior do canal. Fonte: A autora (2017)

A condição de escorregamento fornece as seguintes atribuições para cada uma das funções distribuição de partículas desconhecidas na parede inferior,

$$f_2 = f_8, \quad f_3 = f_7 \quad e \quad f_4 = f_6.$$
 (6.1)

Procedimento análogo é feito para as funções desconhecidas na parede superior,

$$f_6 = f_4, \quad f_7 = f_3 \quad e \quad f_8 = f_2.$$
 (6.2)

# 6.2 CONDIÇÃO DE NÃO-ESCORREGAMENTO

Quando existe resitência ao escoamento do fluido com as paredes do canal ou com obstáculos, pode-se impor a condição de não-escorregamento. Esta condição considera que, devido a resitência ao escoamento, a velocidade nas paredes é nula. Este esquema também é chamado de bounce-back.

A condição de contorno bounce-back pode ser imposta sobre partículas que entram em contato com paredes ou obstáculos sólidos e tem o objetivo de simular a resitência ao escoamento entre o sólido e o fluido. Quando aplicada, esta condição de contorno mantém a direção do movimento da partícula e inverte o sentido. Esta condição de contorno é muito usada e garante o não-escorregamento, ou seja, a velocidade do fluido é nula em paredes e obstáculos sólidos (WOLF, 2006).

A condição de contorno bounce-back fornece as seguintes atribuições para cada uma das funções distribuição de partículas desconhecidas na parte inferior da Figura 7,

$$f_2 = f_6, \quad f_3 = f_7 \quad e \quad f_4 = f_8.$$
 (6.3)

Procedimento análogo é feito para as funções desconhecidas na parede superior,

$$f_6 = f_2, \quad f_7 = f_3 \quad e \quad f_8 = f_4.$$
 (6.4)

## 6.3 CONDIÇÃO DE ZOU E HE

É necessário abordar condições de contorno para a entrada e saída de canais. Neste sentido, utilizou-se a condição de Zou e He (ZOU; HE, 1997), que permite determinar as funções distribuição de partículas desconhecidas por meio da equação da conservação da massa (5.36) e da quantidade de movimento (5.42).

A proposta de Zou e He (1997) é encontrar uma maneira de especificar a vazão, a altura, a pressão ou a velocidade do escoamento na entrada/saída do canal (tubo, placas paralelas), com auxílio da distribuição *bounce-back* de não-equilírio.

Baseado no método de Zou e He (1997), apresenta-se o inicio do procedimento para o cálculo das  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas na entrada e saída do canal, conforme pode-se ver na Figura 8, para os nós que estão fora dos cantos. O tratamento diferenciado para todos os nós que estão nos cantos da malha, é apresentado na seção 6.3.3.

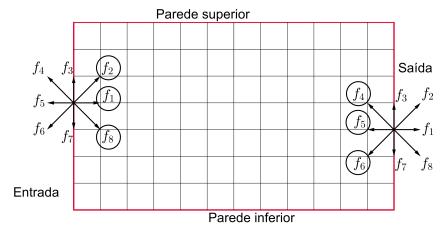


Figura 8 – Ilustração de pontos da malha na entrada e saída do canal. Fonte: A autora (2017)

A expressão (5.36) pode ser reescrita por,

$$h = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8, \tag{6.5}$$

assim como, (5.42) pode ser reescrita de acordo com o movimento do fluido nas direções x e y,

$$hu_x = e(f_4 + f_5 + f_6) - e(f_1 + f_2 + f_8)$$
(6.6)

e

$$hu_y = e(f_6 + f_7) - ef_3 - ef_4 - e(f_2 - f_8).$$
(6.7)

Inicialmente, apresentam-se os cálculos para encontrar  $f_1$ ,  $f_2$  e  $f_8$  que são desconhecidas na entrada do canal. Para isto, as expressões dadas em (6.5), (6.6) e (6.7) serão utilizadas.

Isolando as  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas em (6.5), têm-se,

$$f_1 + f_2 + f_8 = h - (f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7).$$
 (6.8)

Assim, tem-se o sistema (6.9), no qual pode-se observar que exitem duas equações e três variáveis. É necessário buscar outra equação para que seja possível resolvê-lo.

$$\begin{cases} e(f_1 + f_2 + f_8) = hu_x + e(f_4 + f_5 + f_6), \\ e(f_2 - f_8) = hu_y + e(f_6 + f_7) - ef_3 - ef_4. \end{cases}$$
(6.9)

Neste sentido, usa-se bounce-back de não-equilírio, ou seja, na direção perpendicular a parede se verifica a seguinte igualdade,

$$f_1^{Neq} = f_5^{Neq}, (6.10)$$

onde  $f^{Neq}$  é a notação para função de não-equilíbrio, que representa a diferença entre a função distribuição de partículas e a função distribuição de equilíbrio. Segue de (6.10) que,

$$f_1 - f_1^{eq} = f_5 - f_5^{eq}. (6.11)$$

Em (6.11),  $f_5$  é conhecida e pode-se calcular  $f_1^{eq}$  e  $f_5^{eq}$  utilizando a expressão (5.31). Após alguns cálculos, chega-se a seguinte expressão para  $f_1$ ,

$$f_1 = f_5 + \frac{2}{3e}hu_x. (6.12)$$

Substituindo-se (6.12) na primeira expressão do sistema (6.9) e somando-se com segunda expressão, obtém-se a expressão para  $f_2$ ,

$$f_2 = f_6 + \frac{1}{2}(f_7 - f_3) + \frac{1}{2e}hu_y + \frac{1}{6e}hu_x.$$
(6.13)

Substituindo-se (6.12) na primeira expressão do sistema (6.9) e fazendo a subtração da segunda, obtém-se a expressão para  $f_8$ ,

$$f_8 = f_4 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{1}{2e}hu_y + \frac{1}{6e}hu_x.$$
(6.14)

Portanto, as  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas na entrada do canal são calculadas por,

$$\begin{cases}
f_1 = f_5 + \frac{2}{3e}hu_x, \\
f_2 = f_6 + \frac{1}{2}(f_7 - f_3) + \frac{1}{2e}hu_y + \frac{1}{6e}hu_x, \\
f_8 = f_4 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{1}{2e}hu_y + \frac{1}{6e}hu_x.
\end{cases} (6.15)$$

Procedimento análogo foi realizado na saída do canal. As  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas são  $f_4, f_5$  e  $f_6$ , conforme Figura 8.

Reescrevendo (6.5), com o objetivo de isolar as  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas na saída, tem-se,

$$f_4 + f_5 + f_6 = h - (f_1 + f_2 + f_3 + f_7 + f_8). (6.16)$$

A expressão (5.42) pode ser reescrita de acordo com o movimento do fluido nas direções x e y, e, isolando as variáveis desconhecidas, tem-se o sistema,

$$\begin{cases} e(f_4 + f_5 + f_6) = -hu_x + e(f_1 + f_2 + f_8), \\ e(f_4 - f_6) = hu_y + e(f_7 + f_8) - ef_3 - ef_2. \end{cases}$$
(6.17)

Novamente usa-se bounce-back de não-equilíbrio na parede e obtém-se,

$$f_5 = f_1 - \frac{2}{3e}hu_x. (6.18)$$

Substituindo (6.18) na primeira expressão de (6.17) e somando com a segunda, tem-se,

$$f_4 = f_8 - \frac{1}{2}(f_3 - f_7) + \frac{1}{2e}hu_y - \frac{1}{6e}hu_x.$$
 (6.19)

Substituindo (6.18) na primeira expressão de (6.17) e subtraindo com a segunda, tem-se,

$$f_6 = f_2 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{1}{2}hu_y - \frac{1}{6}hu_x.$$
(6.20)

As  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas na saída do canal são fornecidas por,

$$\begin{cases}
f_5 = f_1 - \frac{2}{3e}hu_x, \\
f_4 = f_8 - \frac{1}{2}(f_3 - f_7) + \frac{1}{2e}hu_y - \frac{1}{6e}hu_x, \\
f_6 = f_2 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{1}{2e}hu_y - \frac{1}{6e}hu_x.
\end{cases} (6.21)$$

Nos escoamentos em rios e canais, é comum estabelecer vazão constante na entrada (ZOU; HE, 1997). No entanto, as  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas na entrada do canal ainda não estão adaptadas para esta condição e elas serão modificadas para incorporar a característica de vazão constante na entrada do canal.

#### 6.3.1 Condição de Vazão Constante na Entrada do Canal

Busca-se estabelecer uma complementação para as funções distribuição de equilíbrio apresentadas em (6.15) com o objetivo de estabelecer vazão constante na entrada do canal, pois as simulações desta tese são em regime permanente. Para isto, duas etapas são necessárias (LIU, 2009).

A primeira etapa está relacionada com a aplicação da condição de contorno zero gradiente para as seguintes variáveis macroscópicas: profundidade (h), velocidade na direação x  $(u_x)$  e y  $(u_y)$ , isto é,

$$h(0,j) = h(1,j), \quad u_x(0,j) = u_x(1,j) \quad e \quad u_y(0,j) = u_y(1,j).$$
 (6.22)

Na segunda etapa, Liu (2009) propõe adicionar um novo termo  $(Q_{in} - Q_c)/b$  na expressão (6.6), obtendo,

$$e(f_1 + f_2 + f_8) - e(f_4 + f_5 + f_6) = hu_x + \frac{Q_{in} - Q_c}{h},$$
 (6.23)

em que b é a largura do canal,  $Q_{in}$  é a vazão na entrada do canal e é fornecida por  $Q_{in} = bh_0u_0$ ,  $Q_c$  é a vazão calculada a partir de h, u e v obtidos na primeira etapa (zero gradiente), e é dada por  $Q_c = bh(0, j) u_x(0, j)$ .

Aplicando o mesmo procedimento da seção 6.3, as funções distribuição de equilíbrio  $f_1$ ,  $f_2$  e  $f_8$  ficam reformuladas da seguinte maneira,

$$\begin{cases}
f_1 = f_5 + \frac{2}{3e}hu_x, \\
f_2 = f_6 + \frac{1}{2}(f_7 - f_3) + \frac{hu_y}{2e} + \frac{hu_x + (Q_{in} - Q_c)/b}{6e}, \\
f_8 = f_4 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{hu_y}{2e} + \frac{hu_x + (Q_{in} - Q_c)/b}{6e}.
\end{cases} (6.24)$$

Na expressão (6.23), o termo hu trata-se da vazão por unidade de largura, e portanto, a soma em (6.25) é compatível e possível. Ou seja, é possível realizar a operação de soma .

$$hu_x + \frac{Q_{in} - Q_c}{b},\tag{6.25}$$

## 6.3.2 Condição de Altura Constante na Saída do Canal

Com frequência, usa-se uma profundidade fixa na saída do canal. Para estabelecer esta característica na simulação, Liu (2009) propõe procedimento análogo ao descrito na seção 6.3.1 para reescrever as funções distribuição de equilíbrio obstidas em (6.21). Novamente, duas etapas são necessárias.

A primeira etapa está relacionada com a aplicação da condição de contorno zero gradiente para as variáveis macroscópicas profundidade (h), velocidade na direção x  $(u_x)$ 

e  $y(u_y)$ , na saída do canal, isto é,

$$h(nx, j) = h(nx - 1, j),$$

$$u_x(nx, j) = u_x(nx - 1, j),$$

$$u_y(nx, j) = u_y(nx - 1, j),$$
(6.26)

em que nx é o último nó na direção x.

Na segunda etapa, a profundidade que consta na expressão (6.21) é substituída por uma profundidade fixa ( $h^*$ ). Para incorporar  $h^*$ , Liu (2009) propõe a seguinte expressão para o cálculo da nova velocidade  $u^*$  na saída do canal,

$$u_x^* = \left[ \frac{f_0 + f_3 + f_7 + 2(f_1 + f_2 + f_8)}{h^*} - 1 \right] e.$$
 (6.27)

A velocidade na direção y é apresentada nos seguintes termos,

$$u_y^* = \frac{u_y(nx,j)h(nx,j)}{h^*}. (6.28)$$

Portanto, as funções distribuição de equilíbrio fornecidas em (6.21) ficam reescritas na forma de (6.29), para incorporar as características de profundidade fixa na saída do canal,

$$\begin{cases}
f_5 = f_1 - \frac{2h^*u_x^*}{3e}, \\
f_4 = f_8 - \frac{1}{2}(f_3 - f_7) + \frac{1}{2e}h^*u_y^* - \frac{h^*u_x^*}{6e}, \\
f_6 = f_2 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{h^*u_y^*}{2e} - \frac{h^*u_x^*}{6e}.
\end{cases} (6.29)$$

#### 6.3.3 Tratamento Especial para os Nós dos Cantos da Malha

Um tratamento para cada um dos quatro pontos localizados nos cantos da malha é necessário (LIU, 2009). Esta abordagem é feita baseando-se também no trabalho de Zou e He (1997).

#### 6.3.3.1 Nós Localizados nos Cantos da Entrada do Canal

Na Figura 9, nota-se que, no canto inferior da entrada do canal, são conhecidas apenas  $f_5$ ,  $f_6$  e  $f_7$ . As funções distribuição de partículas  $f_1$  e  $f_3$  são obtidas usando a técnica bounce-back de não equilíbrio proposta por Zou e He (1997) e mencionada na seção 6.3. Sendo assim,

$$f_1 = f_5 e f_3 = f_7.$$
 (6.30)

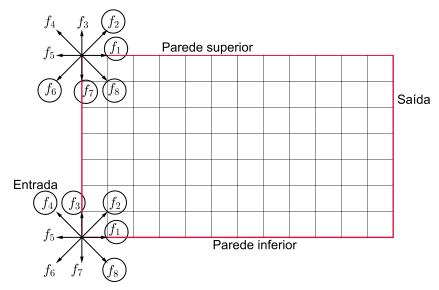


Figura 9 – Ilustração de pontos nos cantos da malha na entrada do canal. Fonte: A autora (2017)

Para determinar  $f_2$ ,  $f_4$  e  $f_8$ , substitui-se (6.30) em (6.6) e (6.7), obtendo que,

$$\begin{cases}
f_2 = f_6, \\
f_4 = f_8 = \frac{1}{2} \left[ h - (f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_5 + f_6 + f_7) \right],
\end{cases} (6.31)$$

onde h é estimado por meio de uma média entre seus vizinhos. Nesta tese, usou-se os seguintes pontos para o canto inferior na entrada do canal, h(1,1), h(1,0), h(2,0) e h(2,1). Deste modo, a seguinda expressão de (6.31) fica reescrita da seguinte forma,

$$f_4 = f_8 = \frac{h_{00} - f_0}{2} - f_5 - f_6 - f_7, \tag{6.32}$$

onde,

$$h_{00} = \frac{h(1,1) + h(1,0) + h(2,0) + h(2,1)}{4}.$$
 (6.33)

Assim, para o canto inferior esquerdo, as funções distribuição de equilíbrio desconhecidas, são obtidas por meio de,

$$\begin{cases}
f_1 = f_5, \\
f_3 = f_7, \\
f_2 = f_6, \\
f_4 = \frac{h_{00} - f_0}{2} - f_5 - f_6 - f_7, \\
f_8 = f_4.
\end{cases} (6.34)$$

Procedimento análogo foi estabelecido para o canto superior na entrada do canal,

$$\begin{cases}
f_1 = f_5, \\
f_7 = f_3, \\
f_8 = f_4, \\
f_2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{h_{0ny} - f_0}{2} - f_3 - f_4 - f_5 \right], \\
f_6 = f_2.
\end{cases} (6.35)$$

em que,

$$h_{0ny} = \frac{h(1, ny - 1) + h(1, ny) + h(2, ny) + h(2, ny - 1)}{4}.$$
 (6.36)

onde ny representa o último ponto da malha da direção y.

Para todos os outros pontos, na entrada do canal, localizados entre os cantos, adota-se o procedimento descrito na seção 6.3.1 para o cálculos das variáveis desconhecidas  $f_1$ ,  $f_2$  e  $f_8$ .

#### 6.3.3.2 Nós Localizados nos Cantos da Saída do Canal

Procedimento muito parecido com o aplicado na seção 6.3.3.1 será utilizado para os cálculos das  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas na saída do canal. Observando-se o canto inferior direito da Figura 10, pode-se notar que  $f_2$ ,  $f_3$ ,  $f_4$ ,  $f_5$  e  $f_6$  não são conhecidas.

Novamente, a proposta de Liu (2009) para o tratamento dos cantos na saída do canal é baseada na abordagem da técnica *bounce-back* de não-equilíbrio apresentada no trabalho de Zou e He (1997).

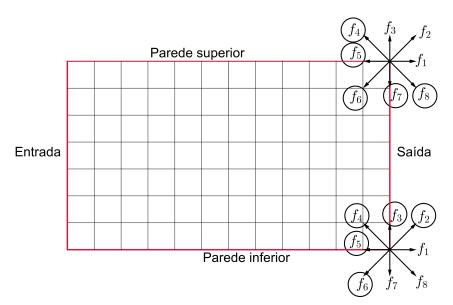


Figura 10 – Ilustração de pontos nos cantos da malha na saída do canal. Fonte: A autora (2017)

Para o canto inferior na saída do canal, as funções distribuição de equilíbrio desconhecidas, são obtidas por meio de,

$$\begin{cases}
f_3 = f_7, \\
f_5 = f_1, \\
f_2 = f_8, \\
f_4 = \frac{h_0 - f_0}{2} - f_1 - f_7 - f_8, \\
f_6 = f_2,
\end{cases}$$
(6.37)

em que,  $h_0$  é o valor fixo da altura da água na saída do canal.

Procedimento análogo foi estabelecido para o canto superior na saída do canal.

$$\begin{cases}
f_5 = f_1, \\
f_7 = f_3, \\
f_6 = f_2, \\
f_4 = \frac{h_0 - f_0}{2} - f_1 - f_2 - f_3, \\
f_8 = f_4.
\end{cases} (6.38)$$

Para todos os outros pontos, na saída do canal, localizados entre os cantos, adotase o procedimento descrito na seção 6.3.2 para os cálculos das variáveis desconhecidas  $f_4$ ,  $f_5$  e  $f_6$ .

#### 6.3.4 Condição de Pressão Constante na Entrada e Saída do Tubo

Até o momento, todas as condições de contorno apresentadas nesta tese, levam em consideração os escoamentos governados pelas equações de águas rasas, em que as variáveis macroscópicas são a profundidade (h), a velocidade na direção x  $(u_x)$  e na direção y  $(u_y)$ .

No entanto, as condições de contorno podem ser adaptadas conforme for o conjunto de equações governantes. Neste sentido, é feita uma adaptação da condição de contorno Zou e He para problemas envolvendo escoamentos em tubos ou entre placas paralelas. Nestes casos, as variáveis macroscópicas são a massa específica  $(\rho)$ , a velocidade na direção  $x(u_x)$  e na direção  $y(u_y)$ .

Antes de estabelecer as funções distribuição de partículas desconhecidas na entrada e saída de um tubo ou entre placas pararelas, é pertinente adequar as variáveis macroscópicas de acordo com as equações governantes destes problemas, que é o sistema de Navier-Stokes. Deste modo, a massa específica de um fluido é recuperada no LBM por

meio da seguinte expressão,

$$\rho\left(\vec{x},t\right) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}\left(\vec{x},t\right). \tag{6.39}$$

A velocidade do fluido é recuperada no LBM por meio de,

$$u_i(\vec{x},t) = \frac{1}{\rho(\vec{x},t)} \sum_{\alpha} e_{\alpha i} f_{\alpha}(\vec{x},t). \tag{6.40}$$

Pode-se reescrever (6.39) da seguinte maneira,

$$\rho = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8, \tag{6.41}$$

assim como (6.40) pode ser escrita considerando as velocidades u e v, separadamente,

$$\rho u_x = f_5 + f_4 + f_6 - (f_1 + f_2 + f_8) \tag{6.42}$$

e

$$\rho u_y = f_6 + f_7 + f_8 - (f_2 + f_3 + f_4). \tag{6.43}$$

Novamente a proposta de Zou e He (1997) será usada para obter as funções distribuição de partículas desconhecidas na entrada  $(f_1, f_2 e f_8)$  e na saída  $(f_4, f_5 e f_6)$ , conforme Figura 8, em um escoamento em tubo ou entre placas paralelas.

Inicialmente procede-se com a obtenção de  $f_1$ ,  $f_2$  e  $f_8$ . Isolando as  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas em (6.42) e (6.43), tem-se o sitema,

$$\begin{cases} e(f_1 + f_2 + f_8) = \rho u_x + e(f_4 + f_5 + f_6), \\ e(f_2 - f_8) = \rho u_y + e(f_6 + f_7) - ef_3 - ef_4. \end{cases}$$
(6.44)

O sistema (6.44) possui duas equações e três variáveis, e portanto, necessita de mais uma equação para obter-se solução única. Neste sentido, usa-se *bounce-back* de não-equilíbrio, ou seja, na direção perpendicular a parede se verifica a seguinte igualdade,

$$f_1^{Neq} = f_5^{Neq}, (6.45)$$

onde  $f^{Neq}$  é a notação para função de não-equilíbrio, que representa a diferença entre a função distribuição de partículas e a função distribuição de equilíbrio. Segue de (6.10) que,

$$f_1 - f_1^{eq} = f_5 - f_5^{eq}. (6.46)$$

Em (6.46),  $f_5$  é conhecida e pode-se calcular  $f_1^{eq}$  e  $f_5^{eq}$  utilizando a expressão (5.17). Depois de alguns cálculos, chega-se a seguinte expressão para  $f_1$ ,

$$f_1 = f_5 + \frac{2}{3e}\rho u_x. (6.47)$$

Substituindo-se (6.47) na primeira expressão do sistema (6.44) e somando as duas, obtém-se a expressão para  $f_2$ ,

$$f_2 = f_6 + \frac{1}{2}(f_7 - f_3) + \frac{1}{2e}\rho u_y + \frac{1}{6e}\rho u_x.$$
 (6.48)

Substituindo-se (6.47) na primeira expressão do sistema (6.44) e fazendo a subtração da segunda, obtém-se a expressão para  $f_8$ ,

$$f_8 = f_4 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{1}{2e}\rho u_y + \frac{1}{6e}\rho u_x.$$
(6.49)

Portanto, as  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas na entrada do tubo são calculadas por,

$$\begin{cases}
f_1 = f_5 + \frac{2}{3e}\rho u_x, \\
f_2 = f_6 + \frac{1}{2}(f_7 - f_3) + \frac{1}{2e}\rho u_y + \frac{1}{6e}\rho u_x, \\
f_8 = f_4 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{1}{2e}\rho u_y + \frac{1}{6e}\rho u_x.
\end{cases} (6.50)$$

Procedimento análogo é realizado para a saída do tubo. As  $f_{\alpha}$ 's desconhecidas são  $f_4, f_5$  e  $f_6$ , conforme Figura 8. Tem-se,

$$\begin{cases}
f_5 = f_1 - \frac{2}{3e}\rho u_x, \\
f_4 = f_8 - \frac{1}{2}(f_3 - f_7) + \frac{1}{2e}\rho u_y - \frac{1}{6e}\rho u_x, \\
f_6 = f_2 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) - \frac{1}{2e}\rho u_y - \frac{1}{6e}\rho u_x.
\end{cases} (6.51)$$

## 7 ABORDAGEM DA TURBULÊNCIA NO LBM E ALGORITMOS

Neste capítulo apresenta-se um modelo que captura os efeitos da turbulência e sua incorporação ao LBM. Além disso, disponibilizou-se os algorítmos para o LBM-BGK e o LBM-MRT.

#### 7.1 MODELOS PARA A ABORDAGEM DA TURBULÊNCIA

Existem diferentes métodos para viabilizar a simulação de escoamentos turbulentos: Simulação numérica direta, solução das equações médias de Reynolds e simulação de grandes escalas (PIOMELLI, 1999).

A mais intuitiva é a simulação numérica direta (DNS - Direct Numerical Simulation), que consiste na solução numérica das equações de Navier-Stokes em todas as escalas presentes num dado escoamento. As equações macroscópicas são resolvidas sem nenhum tipo de parametrização. Esta abordagem é eficiente, porém gera um elevado custo computacional devido ao número de graus de liberdade nos escoamentos turbulentos, que aumenta com o crescimeto do número de Reynolds. Malhas extremamente refinadas devem ser empregadas para que todas as escalas presentes no escoamento sejam resolvidas (PIOMELLI, 1999).

Outra abordagem é a modelagem clássica da turbulência utilizando o conceito de média. Neste processo tem-se a solução das equações médias de Reynolds (RANS - Reynolds Average Navier-Stokes), com a consequente utilização de um modelo de turbulência. As equações do modelo RANS são obtidas por meio de um conjunto de médias das equações de Navier-Stokes e da continuidade. O tempo de processamento e o espaço de memória são menores quando comparados com a abordagem DNS, porém, não representam adequadamente detalhes do escoamento, como por exemplo, emparelhamento de vórtices (PIOMELLI, 1999).

Por último, a simulação de grandes escalas (LES - Large Eddy Simulation), é uma técnica bastante popular. Oferece resultados mais refinados e utiliza menos recursos computacionais. Estas vantagens ocorrem devido ao fato de que esta abordagem permite simulação explícita em grandes escalas turbulentas e utiliza um modelo chamado tensor escala sub-malha (SGS - Subgrid-scale Stress) para representar a ação de pequenas estruturas, menores que o tamanho das malhas. A abordagem LES pode ser aplicada em diferentes tipos de escoamentos o que a torna mais universal quando comparada com as outras técnicas (PIOMELLI, 1999).

## 7.2 TÉCNICA SGS PARA ÁGUAS RASAS

A técnica LES faz uso de um processo de filtragem nas equações macroscópicas governantes do escoamento (space-filtered). Isto permite separar as escalas da turbulência em grandes escalas e escalas sub-malhas. Esta separação ocorre com as premissas de que os grandes turbilhões têm muita energia e são explicitamente calculados. Por outro lado, os pequenos turbilhões têm pouca energia e são parametrizados por um modelo SGS. Resultados numéricos mostram que a abordagem space-filtered é mais precisa (TUTAL; HOLDO, 2001; DA SILVEIRA NETO; MANSUR; SILVESTRINI, 2002) e por este motivo, apenas esta será abordada com mais detalhes nesta tese.

Procede-se aplicando um filtro no sistema de Navier-Stokes (3.3), que fica reescrito (ZHOU, 2004),

$$\begin{cases}
\frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{j}} = 0, \\
\frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial t} + \frac{\partial (\widetilde{u}_{i}\widetilde{u}_{j})}{\partial u_{j}} = F_{i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_{i}} + \nu \frac{\partial^{2} \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j} \partial x_{j}} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_{j}},
\end{cases} (7.1)$$

em que  $\tilde{u}$  é a componente da velocidade no espaço filtrado na direção i, definida por,

$$\widetilde{u}(x, y, z, t) = \iiint_{\Delta x \Delta y \Delta z} u(x, y, z, t) G(x, y, z, x', y', z') dx' dy' dz', \qquad (7.2)$$

onde  $\tilde{u}$  é a velocidade do fluido depois da aplicação do filtro espacial e G é a função de filtro espacial dada por,

$$G(x, y, z, x', y', z') = \begin{cases} \frac{1}{\Delta V}, & (x', y', z') \in \Delta V \\ 0, & caso \ contr\'{a}rio, \end{cases}$$
 (7.3)

em que  $\Delta V = dx'dy'dz'$ .

Tem-se também em (7.1)  $\tau_{ij}$  que é chamado de tensor escala sub-malha (SGS),

$$\tau_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j. \tag{7.4}$$

O tensor escala sub-malha (SGS) descrito em (7.4) pode ser reescrito utilizando a suposição de Boussinesq para as tensões turbulentas,

$$\tau_{ij} = -\nu_e \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right), \tag{7.5}$$

em que  $\nu_e$  representa a viscosidade turbulenta.

Substituindo (7.5) na equação da quantidade de movimento em (7.1), obtém-se,

$$\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \left(\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j\right)}{\partial u_j} = F_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \left(\nu + \nu_e\right) \frac{\partial^2 \widetilde{u}_i}{\partial x_j \partial x_j}. \tag{7.6}$$

Ressalta-se que o objetivo é incorporar o fenômeno da turbulência no LBM. Para isto, escolheu-se a abordagem LES. Nesta técnica ocorre a filtragem das equações macroscópicas governantes, onde as grandes escalas são separadas das pequenas escalas (sub-malhas). As grandes escalas são resolvidas diretamente, mas as pequenas precisam de tratamento. Para estas, é feita uma parametrização por meio do modelo SGS. Dentre as formas de utilizar o SGS, a mais simples e popular é o modelo de Smagorinsky. Com ajuda deste modelo, pode-se calcular a viscosidade turbulenta com a colaboração do tensor taxa de deformação em grande escala e com a constante de Smagorinsky. Deste modo, a viscosidade turbulenta,  $\nu_e$ , é definida de acordo com o modelo de Smagorinsky e dada por,

$$\nu_e = (C_s l_s)^2 \sqrt{S_{ij} S_{ij}}, (7.7)$$

onde  $C_s$  é a constante de Smagorinsky,  $l_s$  é a escala do comprimento característico e  $S_{ij}$  é a magnitude do tensor taxa de deformação,

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right). \tag{7.8}$$

Com o uso do modelo SGS Smagorinsky, os efeitos dos turbilhões de escalas não resolvidas são capturados e quanto mais refinada for a malha, existirão menos turbilhões na escala não resolvida. Portanto, como no LBM, o espaçamento na malha é geralmente bem menor do que nos métodos tradicionais de simulação de escoamento de fluidos, consegue-se que as simulações no LBM produzam soluções mais precisas. Além disso, de acordo com Zhou (2004), o uso de técnicas para abordar o efeito da turbulência são consideradas mais eficientes no LBM do que em outros métodos numéricos, devido ao refinamento ser mais intenso no LBM. Por outro lado, o refinamento da malha ocasiona um aumento no custo computacional, porém este inconveniente pode ser superado utilizando a paralelização do código.

#### 7.3 INCORPORANDO A TURBULÊNCIA NO LBM

O LBM utiliza um refinamento maior na malha, quando comparado com os métodos numéricos tradicionais. Este refinamento permite resolver os turbilhões de escalas menores. Portanto, espera-se que a incorporação do modelo SGS no LBM, pode fornecer soluções mais precisas para os problemas envolvendo escoamentos turbulentos (ZHOU, 2004).

Hou et al. (1996) propuseram um modelo SGS para o LBM, com o objetivo de simular escoamentos de fluidos com número de Reynolds elevado. O modelo apresentado modela a turbulência de forma natural na equação do reticulado de Boltzmann, introduzindo um parâmetro de relaxamento turbulento na LBE,

$$f_{\alpha}\left(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t\right) - f_{\alpha}\left(\vec{x}, t\right) = -\frac{1}{\tau_{t}}\left(f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq}\right) + \frac{\Delta t}{6e^{2}}e_{\alpha i}\vec{F}_{i}\left(\vec{x}, t\right),\tag{7.9}$$

onde  $\tau_t$  é o parâmetro de relaxamento total e é definido por  $\tau_t = \tau + \tau_e$ , em que  $\tau_e$  é o parâmetro de relaxamento associado a turbulência. Além disso, a viscosidade total é definida por  $\nu_t = \nu + \nu_e$ , onde  $\nu_e$  é a viscosidade associada ao fenômeno da turbulência.

A equação do LBM com incorporação do fenômeno da turbulência é dada por (7.9). A única diferença entre (7.9) e (5.9) é que o parâmetro de relaxamento  $\tau$  foi substituído pelo  $\tau_t$ .

Assumindo que  $\tau_t$  e  $\nu_t$  também satisfazem (5.51), tem-se,

$$\tau_t = \frac{1}{2} + \frac{3\nu_t}{e^2 \Delta t}. (7.10)$$

Usando  $\tau_t = \tau + \tau_e$  e  $\nu_t = \nu + \nu_e$  em (7.10), tem-se,

$$\tau + \tau_e = \frac{1}{2} + \frac{3(\nu + \nu_e)}{e^2 \Delta t}.$$
 (7.11)

Isolando  $\tau_e$  e aplicando a propriedade distributiva da multiplicação em relação a adição em (7.11), tem-se,

$$\tau_e = \frac{1}{2} + \frac{3\nu}{e^2 \Delta t} + \frac{3\nu_e}{e^2 \Delta t} - \tau.$$
(7.12)

Usando (5.51) em (7.12), tem-se,

$$\tau_e = \frac{3\nu_e}{e^2 \Delta t}.\tag{7.13}$$

Busca-se reescrever (7.13) utilizando a expressão para  $\nu_e$  fornecida em (7.7). Tem-se então,

$$\tau_e = \frac{3}{e^2 \Delta t} (C_s l_s)^2 \sqrt{S_{ij} S_{ij}}.$$
 (7.14)

Pode-se observar em Zhou (2004), que  $S_{ij}$  envolve cálculos de derivadas e, por este motivo, não é adequado para manipulação. Deste modo,  $S_{ij}$  é reescrito em termos da função distribuição de partículas e da função distribuição de equilíbrio,

$$S_{ij} = -\frac{3}{2e^2h\tau_t\Delta t} \sum_{\alpha} e_{\alpha i} e_{\alpha j} \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq} \right). \tag{7.15}$$

Substituindo (7.15) em (7.14), tem-se,

$$\tau_e = \frac{3}{e^2 \Delta t} (C_s l_s)^2 \frac{3}{2e^2 h \tau_t \Delta t} \sqrt{\Pi_{ij} \Pi_{ij}}, \tag{7.16}$$

onde

$$\Pi_{ij} = \sum_{\alpha} e_{\alpha i} e_{\alpha j} \left( f_{\alpha} - f_{\alpha}^{eq} \right). \tag{7.17}$$

Adotando  $l_s = \Delta x$ , tem-se que (7.16) fica reescrita,

$$\tau_e = \frac{9C_s^2}{2e^2h(\tau + \tau_e)} \sqrt{\Pi_{ij}\Pi_{ij}}.$$
 (7.18)

Isolando  $\tau_e$  em (7.18) e somando  $\tau$  tem-se que,

$$\tau_t = \tau + \tau_e = \frac{\tau}{2} + \frac{\sqrt{\tau^2 + \frac{18C_s^2}{e^2h}}\sqrt{\Pi_{ij}\Pi_{ij}}}{2}.$$
 (7.19)

#### 7.4 ALGORITMOS

## 7.4.1 Algoritmo para o LBM-BGK

Nos capítulos anteriores foram descritas as características do LBM e todos os principais elementos que são essenciais para a sua aplicação. Escolhe-se adequadamente as condições iniciais, condições de contorno, parâmetros e tipo de reticulado, para que represente bem o problema que se pretende simular.

Não pode-se ignorar possíveis problemas de instabilidade. Neste sentido, usar as ferramentas corretas para simular o problema exige muitos estudos e testes.

De acordo com Golbert (2009), quando se trata de simulação numérica utilizando o LBM é necessário tomar cuidado para que o valor do parâmetro  $\tau$ , não seja muito próximo do seu valor mínimo 1/2, pois podem ocorrer instabilidades numérica. O parâmetro de relaxamento é relacionado com os fenômenos difusivos no problema, como por exemplo a viscosidade do fluido. Na seção (5.1.5), foi apresentada a relação entre a viscosidade cinemática  $\nu$ , o parâmetro de relaxamento  $\tau$  e  $\Delta x/\Delta t$ , por meio da expressão (5.51).

Observando-se (5.51), pode-se perceber que  $\tau$  diminui quando  $\nu$  e  $\Delta t$  diminuem, e quando  $\Delta x$  aumenta. Assim, o refinamento do reticulado é importante para aumentar  $\tau$  e manter a estabilidade.

Também faz-se necessário recordar as condições necessárias para que a simulação seja estável, conforme foi visto na seção (5.1.5).

De posse de todas essas informações, pode-se estabelecer um algoritmo que fornece a evolução do fluido para cada nó no reticulado D2Q9 (JUDICE, 2009).

O algoritmo para o LBM-BGK é descrito a seguir.

- Definir o reticulado. Identificar o tamanho da malha, o passo temporal e o espacial. Estabelecer o valor para a constante de Smagorinsky e caracterizar a geometria do canal.
- 2) Inicialização (t = 0):
  - a) Inicializa-se o valor da velocidade macroscópica nas direções x e y,  $u_x$  (x, y, 0) e  $u_y$  (x, y, 0), respectivamente;
  - b) Inicializa-se o valor da profundidade da água h(x, y, 0);
  - c) Calcular  $f_{\alpha}^{eq}$ , utilizando h(x,y,0),  $u_x(x,y,0)$  e  $u_y(x,y,0)$ , por meio de (5.31);
  - d) Inicializar  $f_{\alpha}(\vec{x},0)$  utilizando  $f_{\alpha}^{eq}(h,u_x,u_y)$ , ou seja  $f_{\alpha}(\vec{x},0)=f_{\alpha}^{eq}(h,u_x,u_y)$ .
- 3) Loop principal  $(t = 1 \text{ até } t_{max})$ :
  - a) Cálcular o termo de força utilizando (5.12);
  - b) Cálcular a colisão usando a expressão (5.14);
  - c) Cálcular a propagação usando (5.15);
  - d) Informar as condições de contorno e incorporá-las no código;
  - e) Atualizar as variáveis macroscópicas, profundidade e velocidades nas direções x e y, utilizando (5.36) e (5.42), respectivamente. Além disso, utiliza-se a equação (7.19) para atualizar o parâmetro de relaxamento total;
  - f) Calcular a  $f_i^{eq}$ , por meio de (5.31), com os valores atualizados do item anterior;
  - q) Verificar as condições de estabilidade descritas em (5.55), (5.53) e (5.52);
  - h) calcular o erro relativo entre a simulação no tempo atual e no tempo anterior.

#### 7.4.2 Algoritmo para o LBM-MRT

O algoritmo desenvolvido com base no LBM-MRT possui todas as etapas do algoritmo desenvolvido para o LBM-BGK. Porém, são necessárias mais etapas no LBM-MRT, pois o operador de colisão MRT necessita de mais cálculos. A principal diferença entre os dois algoritmos está na abordagem do operador de colisão.

Na equação governante do LBM-BGK (5.13), tanto no lado esquerdo como no direito, têm-se a mesma função distribuição de partículas  $f_{\alpha}$ , isto porque todo o processo de simulação do LBM-BGK ocorre no espaço das velocidades. Na equação governante do LBM-MRT (5.57), percebe-se que as funções ( $m_{\alpha}$  e  $m_{\alpha}^{eq}$ ) que compõem o termo de colisão não são as mesmas que estão do lado esquerdo de (5.57). Isto ocorre pelo fato de que  $m_{\alpha}$  e  $m_{\alpha}^{eq}$  são funções distribuição que estão no espaço dos momentos.

A transformação do espaço de velocidade para o espaço dos momentos é feita por meio da matriz  $M_t$  apresentada em (5.63). Além disso, pode-se proceder com a obtenção de funções que estão no espaço de velocidade a partir das funções que estão no espaço dos momentos e isto pode ser feito conforme apresentado na seção (5.2) e será descrito a seguir com mais detalhes,

- Escrever a função distribuição de partículas (f), que está no espaço de velocidade, no espaço dos momentos:  $|m\rangle = M_t |f\rangle$ ;
- Escrever a função distribuição de equilíbrio  $(f^{eq})$ , que está no espaço de velocidade, no espaço dos momentos:  $|m^{eq}\rangle = M_t |f^{eq}\rangle$ ;
- Escrever a função distribuição de partículas (m), que está no espaço dos momentos, no espaço gerado pelas velocidades:  $|f\rangle = M_t^{-1} |m\rangle$ ;
- Escrever a função distribuição de equilíbrio  $(m^{eq})$ , que está no espaço dos momentos, no espaço gerado pelas velocidades:  $|f^{eq}\rangle = M_t^{-1} |m^{eq}\rangle$

Somente o operador de colisão do LBM-MRT opera no espaço dos momentos. Neste sentido, observou-se que na etapa do operador de colisão, o código recebe  $f_{\alpha}$  e  $f_{\alpha}^{eq}$ , mas precisa transformá-las em  $m_{\alpha}$  e  $m_{\alpha}^{eq}$ . Procedimento análogo acorre na saída do operador de colisão, têm-se  $m_{\alpha}$  e  $m_{\alpha}^{eq}$  e é necessário obter  $f_{\alpha}$  e  $f_{\alpha}^{eq}$ .

O algoritmo para o LBM-MRT é descrito a seguir.

- 1) Definir o reticulado. Identificar o tamanho da malha, o passo temporal e o espacial. Estabelecer o valor para a constante de Smagorinsky, valor inicial para o parâmetro de relaxamento, valores da matriz diagonal  $\hat{S}$  e caracterize a geometria do canal.
- 2) Inicialização (t = 0):
  - a) Inicializa-se o valor da velocidade macroscópica nas direções x e y,  $u_x$  (x, y, 0) e  $u_y$  (x, y, 0), respectivamente;
  - b) Inicializa-se o valor da profundidade da água h(x, y, 0);
  - c) Calcular  $f_{\alpha}^{eq}$ , utilizando h(x, y, 0),  $u_x(x, y, 0)$  e  $u_y(x, y, 0)$ , por meio de (5.31);

- d) Inicializar  $f_{\alpha}(\vec{x},0)$  utilizando  $f_{\alpha}^{eq}(h,u_x,u_y)$ , ou seja  $f_{\alpha}(\vec{x},0)=f_{\alpha}^{eq}(h,u_x,u_y)$ .
- 3) Loop principal  $(t = 1 \text{ até } t_{max})$ :
  - a) Informar as condições de contorno e incorporá-las no código;
  - b) Atualizar as variáveis macroscópicas, profundidade e velocidades nas direções x e y, utilizando (5.36) e (5.42), respectivamente. Além disso, utiliza-se a subrotina de abordagem da turbulência para atualizar o parâmetro de relaxamento total por meio de (7.19);
  - c) Calcular  $m_{\alpha}^{eq}$  utilizando (5.58);
  - d) Cálcular o termo de força utilizando (5.12);
  - e) Cálcular a colisão usando a expressão (5.59). Neste momento ocorrem todas as etapas de transformação descritas nesta seção;
  - f) Cálculo da propagação usando (5.60);
  - g) Verificar as condições de estabilidade descritas em (5.55), (5.53) e (5.52);
  - h) Calcular o erro relativo entre a simulação no tempo atual e no tempo anterior.

# 8 APLICAÇÕES

Inicialmente, procede-se com a apresentação do primeiro problema simulado por meio do LBM, item a). Trata-se do escoamento de Poiseuille, que é governado pelo sistema de Navier-Stokes. Logo em seguida, apresentam-se nos itens b) e c) dois estudos de caso que são governados pelas equações de águas rasas. No caso do problema b), tem-se solução analítica e o problema c) possui dados experimentais, possibilitando em ambos os casos, a validação do modelo desenvolvido.

Os três estudos de caso simulados neste capítulo são descritos conforme segue,

- a) Simulação bidimensional do escoamento de Poiseuille por meio do LBM-BGK, sem abordagem da turbulência;
- b) Simulação unidimensional de uma onda no mar próximo à costa em uma região relativamente curta, com leito regular e profundidade variável, por meio do LBM-BGK sem abordagem da turbulência;
- c) Simulação bidimensional do escoamento de água ao redor de um cilindro localizado no centro de canal retangular, por meio do LBM-BGK e LBM-MRT, com abordagem da turbulência e com rotina de estabilidade.

### 8.1 ESCOAMENTO DE POISEUILLE

#### 8.1.1 Características do Problema

As primeiras simulações numéricas desenvolvidas neste trabalho de tese, fazem referência ao escoamento de Poiseuille. É um problema bastante usado para verificar se a simulação numérica está de acordo com a solução analítica, e assim, valiando o modelo computacional proposto.

O escoamento de Poiseuille, conforme Figura 11 possui solução analítica, e, deste modo, pode-se fazer a comparação entre os resultados numéricos e analíticos.

O escoamento plano de Poiseuille é permanente, bidimensionle unidirecional entre duas placas paralelas planas de comprimento infinito (LAI; RUBIN; KREMPL, 1993). É governado pelas equações de Navier-Stokes, e portanto, as variáveis que serão investigadas na simulação são a massa específica do fluido e a velocidade.

As equações governantes deste problema são as equações de Navier-Stokes com simplificações. O fluido é Newtoniano e incompressível. Na ausência de forças o problema

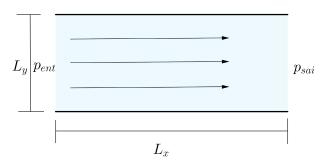


Figura 11 – Escoamento de Poiseuille ao longo de um canal retangular com comprimento  $L_x$  e largura  $L_y$ .

é modelado pelas equações,

$$\frac{d^2u}{dy^2} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dx},\tag{8.1}$$

$$\frac{dp}{dy} = 0 (8.2)$$

е

$$\frac{dp}{dz} = 0. (8.3)$$

A solução para a velocidade na direção x,

$$u_x(y) = -\frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} \left( L_y y - y^2 \right), \tag{8.4}$$

em que p é a pressão, dp/dx é o gradiente de pressão,  $\mu$ : é a viscosidade dinâmica que é dada por  $\mu = \rho \nu$ ,  $\nu$  é a viscosidade cinemática,  $\rho$  é a massa específica,  $u_x$  é a componente horizontal da velocidade,  $L_y$  é a largura do canal.

A velocidade máxima do escoamento de Poiseuille ocorre em  $y = L_y/2$  e a velocidade nula ocorre nos contornos, construindo um perfil parabólico de velocidade.

## 8.1.2 Resultados e Discussões

Os parâmetros reais do problema são: o canal simulado possui comprimento de  $L_x=1\,\mathrm{m}$ , a largura é  $L_y=0.1\,\mathrm{m}$ , a massa específica da água é  $\rho=1000\,\mathrm{kg/m^3}$ , a viscosidade cinemática é  $\nu=1\times10^{-6}\,\mathrm{m^2/s}$  e a velocidade máxima do escoamento é  $u_{max}=0.002\,\mathrm{m/s}$ . O número de Reynolds associado é  $R_e=200$ .

De acordo com Mohamad (2011), uma maneira de realizar a simulação no LBM é transformar os parâmetros físicos em parâmetros adimensionais na malha, em termos de reticulado. Inicialmente, optou-se por um domínio computacional que é representado

por uma malha retangular de  $400 \times 40$  reticulados nas direções x e y, respectivamente, e velocidade no reticulado de 0,1 m/s. A escolha deve ser feita respeitando-se o número de Reynolds do problema. Com essas configurações, obtêm-se o parâmetro de relaxamento  $\tau = 0,56$ , o passo espacial  $\Delta x = \Delta y = 0,0025$  m e o passo temporal  $\Delta t = 0,125$  s.

Como trata-se, neste estudo de caso, da simulação de um escoamento que ocorre por diferença de pressão, utilizou-se a condição de contorno de Zou e He apresentadas na seção 6.3.4. Estas condições de contorno são aplicadas na entrada e na saída do escoamento. Como relação as paredes superior e inferior, utilizou-se bounce-back para representar a velocidade nula nas paredes.

Na Figura 12, tem-se a solução numérica do escoamento de Poiseuille em unidades do reticulado. Pode-se analisar também na Figura 13 a solução numérica do escoamento para os dados físicos. Na Figura 14 tem-se a comparação da solução numérica e analítica no meio do canal  $(x=L_x/2)$ . O número de iterações foi de 20000, gerando um tempo de 2500 segundos. Este número de iterações é justificado pela Figura 15, na qual se observa a convergência da velocidade para  $u_{max} = 0,002 \,\mathrm{m/s}$  no ponto  $(L_x/2, L_y/2)$ , com o aumento do número de iterações. Utilizou-se o compilador GNU Fortran 5.3.0 em um computador com processador intel i7, CPU 2,2 GHz, 16 GB de memória RAM e sistema operacional 64-bit Windows 10. O tempo de processamento foi de 74 segundos.

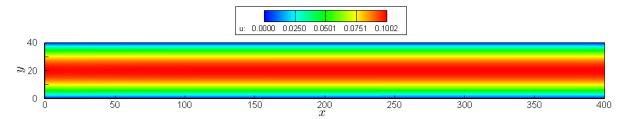


Figura 12 – Solução numérica do escoamento com dados na malha.

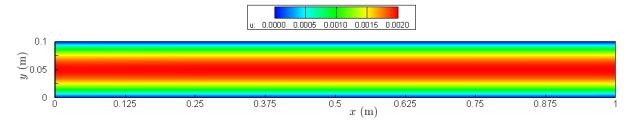


Figura 13 – Solução numérica do escoamento com dados físicos.

Este estudo de caso foi simulado utilizando, inicialmente, um fluido hipotético em que a viscosidade numérica utilizada na simulação foi de  $\nu=1\times 10^{-2}\,\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$ . Porém, o interesse foi em testar os limites do LBM na simualção de escoamento em que o número de Reynolds fica próximo de  $1\times 10^6$ . Deste modo, adaptou-se a simulação para uma viscosidade numérica  $\nu=1\times 10^{-6}\,\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$ .

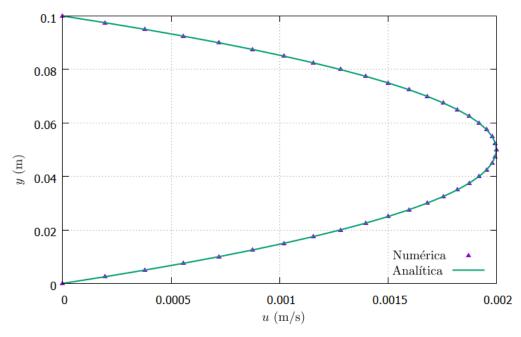


Figura 14 – Comparação entre a solução analítica e numérica em  $x = L_x/2$ .

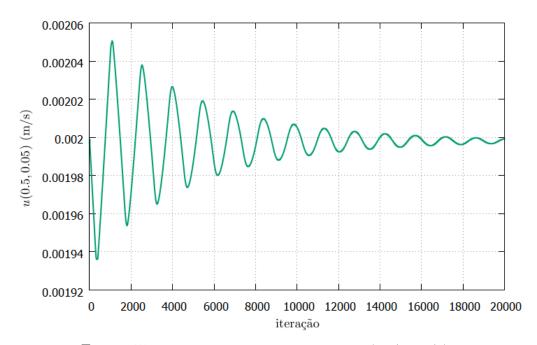


Figura 15 – Convergência da velocidade em  $(L_x/2, L_y/2)$ .

Com erro relativo máximo de 0,38%, quando comparou-se a solução analítica com a numérica, notou-se que o LBM foi capaz de representar com precisão o estudo de caso proposto. Apesar do escoamento de Poiseuille ser simples, tem-se a dificuldade de simular o escoamento de água, pois a viscosidade cinemática da água é muito baixa e acarreta dificuldade na calibração dos parâmetros. Observou-se que o erro máximo relativo ocorreu em alguns pontos próximos das paredes do canal. Com isto, entende-se que é importante fazer uma melhor abordagem da condição de contorno nas paredes.

# 8.2 SIMULAÇÃO DE UMA ONDA NO MAR PRÓXIMO À COSTA

#### 8.2.1 Características do Problema

Este estudo de caso é governado pelas equações de águas rasas, e portanto, as variáveis resultantes da simulação são a profundidade e velocidade da água. Os resultados apresentados representam as primeiras simulações realizadas por meio do LBM envolvendo problemas governados pelas equações de águas rasas.

Neste estudo de caso, considera-se a propagação de uma onda em uma região costeira relativamente curta, com leito regular e profundidade variável. Empregam-se as equações de águas rasas unidimensionais para representar o escoamento de água em um canal de largura infinita. A geometria do escoamento é representada na Figura 16, onde h(x,t) é a função que representa a altura da água acima do fundo do canal, H(x) é a função que representa a cota do fundo do canal em relação a um plano de referência profundidade e u(x,t) é a velocidade do fluido na direção do escoamento.

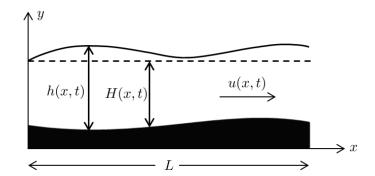


Figura 16 – Esquema para simulação do fluxo de maré.

A solução analítica assintótica do problema (8.5), juntamente com suas condições iniciais e de contorno, nas equações (8.6) e (8.7), são respectivamente (BERMUDEZ; VAZQUEZ, 1994),

$$h(x,t) = H(x) + \varphi(t), q(x,t) = h(x,t) u(x,t) = -\varphi'(t)(x-L) + \psi(t),$$
(8.5)

$$h(x,0) = h_o(x),$$
  
 $q(x,0) = q_o(x),$ 
(8.6)

$$h(0,t) = \varphi(t),$$
  

$$q(L,t) = \psi(t),$$
(8.7)

onde  $h_o$ ,  $q_o$ ,  $\varphi$  e  $\psi$  são funções conhecidas.

Na simulação deste estudo de caso, foi considerado um comprimento  $L = 16000 \,\mathrm{m}$ . A função  $z_b(x)$  que descreve o fundo do mar é obtida pela interpolação dos pontos da Tabela 1, com a utilização de spline cúbica.

Tabela 1 – Elevação do leito,  $z_b(x)$ 

x(m)	0.0	474.0	1053.0	4000.0	6000.0	7000.0
$z_b(x)(m)$	0.0	2.7	7.0	23.0	20.0	26.0
x(m)	8740.0	11000.0	14200.0	15000.0	16000.0	
$z_b(x)(m)$	37.0	28.0	51.5	53.0	54.0	

Considera-se ainda,

$$H(x) = 63 - z_b(x) (8.8)$$

e condições iniciais e de contorno,

$$h(x,0) = H(x), q(x,0) = 0,$$
(8.9)

$$h(0,t) = H(0) + 5 - 5 \operatorname{sen} \left[ \pi \left( \frac{t}{20000} + \frac{1}{2} \right) \right],$$
  

$$q(L,t) = 0.$$
(8.10)

Portanto, na posição x = 0 e t > 0, a função  $\varphi(t)$  fica escrita,

$$\varphi(t) = 5 - 5\operatorname{sen}\left[\pi\left(\frac{t}{20000} + \frac{1}{2}\right)\right]. \tag{8.11}$$

Para x=L e t>0, a função  $\psi(t)$  fica escrita,

$$\psi(t) = 0. \tag{8.12}$$

A expressão de h(0,t) em (8.10), simula uma onda de 5 m de amplitude. Sob estas condições, a solução analítica é determinada pelas equações,

$$h(x,t) = H(x) + 5 - 5 \operatorname{sen} \left[ \pi \left( \frac{t}{20000} + \frac{1}{2} \right) \right]$$
 (8.13)

е

$$u_x(x,t) = \frac{(x-L)\pi}{4000h(x,t)}\cos\left[\pi\left(\frac{t}{20000} + \frac{1}{2}\right)\right].$$
 (8.14)

#### 8.2.2 Resultados e Discussões

Usou-se o LBM-BGK sem a abordagem da turbulência. A simulação é unidimensional e para isto considera-se condição de contorno de deslizamento nas paredes do canal, conforme descrita na seção 6.1. Além disso, considera-se a condição de contorno de zero gradiente na entrada e saída do canal, estabelecida na seção 6.3.1. O reticulado usado é o D2Q9.

Os parâmetros utilizados no LBM são os seguintes: o comprimento do canal é  $L=16000\,\mathrm{m}$ , a quantidade de reticulados é 914, a velocidade no reticulado é  $c=200\,\mathrm{m/s}$  e o parâmetro de relaxamento é  $\tau=0.6$ . Com isso, tem-se o passo de tempo  $\Delta t=0.0875\,\mathrm{s}$ . O parâmetro de relaxamento é obtido por meio da expressão  $\tau=\frac{1}{2}+\frac{3\nu\Delta t}{\Delta x^2}$ .

Como a massa da água é muito grande, os efeitos gravitacionais são preponderantes, podendo-se considerar desprezíveis os efeitos da resistência ao escoamento. Dessa forma, o termo de força dado em (5.12), fica determinado pela expressão,

$$F = -gh(x,t)\frac{\partial z_b}{\partial x}. (8.15)$$

O número de iterações realizadas foi de 125000, o que corresponde a um tempo de 10937,5 s. O tempo de processamento gasto no processamento foi de 128 segundos.

As Figuras 17 e 18 mostram a comparação das soluções numérica e analítica para a superfície e velocidade da água em  $t=10937,5\,\mathrm{s}.$ 

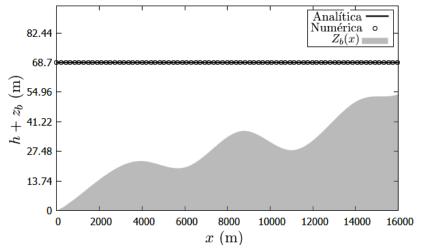


Figura 17 – Superfície da água em 10937,5 s.

A comparação dos resultados numéricos com a solução analítica mostra que para a profundidade da água, o erro relativo máximo é menor que 0.5%. Para a velocidade, o erro relativo máximo é menor que 5% até a posição  $x=15890\,\mathrm{m}$ . E um erro maior que 5% quando  $x>15890\,\mathrm{m}$ . Esse aumento no erro relativo à jusante, ocorre devido as imposição de a velocidade tender para zero quando x tende para  $16000\,\mathrm{m}$ . A velocidade

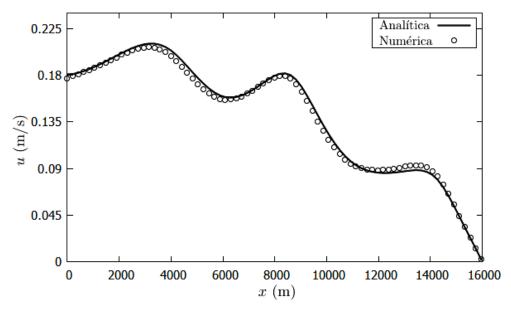


Figura 18 – Velocidade do escoamento em 10937,5 s.

torna-se muito pequena, não sendo o erro relativo adequado para a medida de precisão, normalmente utiliza-se o erro absoluto. Ao calcular o erro absoluto para as velocidades com erro relativo maior que 5%, obtém-se erro absoluto menor que  $0,0004\,\mathrm{m/s}$ .

Como trata-se um problema real com grandes dimensões, faz-se necessário que os passos espaciais e temporal sejam utilizados assumindo valores diferentes de 1. Verificou-se que  $\Delta x=17,5$  m e  $\Delta t=0,0875$  s são suficientemente bons para descrever corretamento o fenômenos físico. Usando valores menores para  $\Delta x$ , verificou-se que a simulação não apresenta mudanças significativas e a simulação aumenta o tempo computacional. Ao utilizar  $\Delta t$  e  $\Delta x$  diferentes de 1 no reticulado, é preciso incorporar esta mudança no modelo. Observou-se também o escoamento é menos sensível a instabilidades, devido as suas características geométricas. Esta verificação permite uma gama maior de possibilidades para os parâmetros de simulação. Observou-se, por meio do erro relativo, que a simulação numérica está coerente com a solução analítica, e portanto, os resultados apresentados mostram a precisão do LBM-BGK na simulação de escoamento de águas rasas.

# 8.3 ESCOAMENTO AO REDOR DE UM CILINDRO LOCALIZADO NO CENTRO DE UM CANAL

#### 8.3.1 Características do Problema

O estudo de caso abordado nesta seção também é governado pelas equações de águas rasas e trata-se de um problema clássico na Engenharia Hidráulica (YULISTIYANTO, 1997). A água escoa ao redor de um cilindro, localizado perpendicularmente no fundo e no centro do canal, conforme Figura 19. Este trabalho foi apresentado por Yulistiyanto (YULISTIYANTO, 1997), onde encontra-se a comparação entre a solução numérica, por

meio de diferenças finitas, e os dados experimentais. Em 2004, Zhou (ZHOU, 2004) repetiu a simulação utilizando o LBM com um tempo de relaxamento. Pilares de pontes e ilhas são exemplos reais em que este estudo de caso pode ser observado. Analisar o comportamento da profundidade e velocidade da água passando ao redor dos pilares de uma ponte, é importante para promover a mobilidade entre regiões separadas por rios, por exemplo.

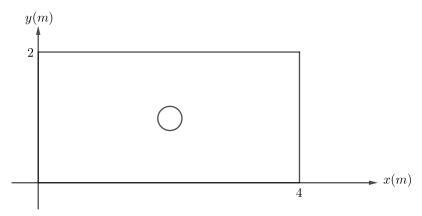


Figura 19 – Vista plano de um cilindro localizado no centro de um canal retangular.

O modelo desenvolvido para este estudo de caso, foi construído com base no modelo desenvolvido para a simulação do problema mostrado na seção 8.2. Complementouse o modelo, incorporando o operador de colisão MRT, subrotina da turbulência e de estabilidade. A simulação passou a ser bidimensional e portanto a condição de contorno também foi alterada.

A finalidade da simualção numérica deste estudo de caso é validar o modelo proposto, para posterior aplicação na simulação dos trechos escolhidos do Canal da Piracema.

#### 8.3.2 Resultados e Discussões

Apresenta-se a simulação numérica bidimensional do escoamento de água ao redor de um cilindro localizado no centro de um canal retangular. O reticulado utilizado é o D2Q9. Adotou-se o operador de colisão com múltiplos tempos de relaxamento (MRT) e uma técnica de simulação em grandes escalas (LES) para melhorar a estabilidade. Incorporou-se ao código uma rotina de estabilidade, que foi aplicada em todos os pontos da malha para cada passo de tempo. Como resultado, avalia-se o comportamento da profundidade da água, comparando-a com dados experimentais disponíveis na literatura.

Com relação as condições de contorno, nas paredes do cilindro, utilizou-se a condição de contorno bounce-back para representar velocidade zero, e nas paredes do canal considera-se condição de escorregamento. Na entrada do canal a vazão é constante e na saída têm-se altura fixa.

Os parâmetros utilizados neste estudo de caso são: o comprimento do canal é  $L_x = 4 \,\mathrm{m}$ , a largura é  $L_y = 2 \,\mathrm{m}$ , a vazão na entrada é  $Q = 0.248 \,\mathrm{m}^3/\mathrm{s}$ , a altura da água na saída é  $h = 0.185 \,\mathrm{m}$ , a inclinação do fundo do canal é  $\partial z_b/\partial x = -6.25 \times 10^{-4}$  na direção do escoamento. O coeficiente de Manning utilizado na simulação foi  $n_b = 0.012 \,\mathrm{m}^{-1/3}\mathrm{s}$ . A constante de Smagorinsky escolhida é  $C_s = 0.3$  (ZHOU, 2004),  $s_0 = \ldots = s_6 = 1.0$  e  $s_7 = s_8 = 1/\tau_t$  (PENG et al., 2014). Os dados experimentais podem ser encontrados em Yulistiyanto (1997), possibilitando a comparação com os resultados numéricos otidos nesta simulação.

A simulação foi realizada com passo espacial  $\Delta x = \Delta y = 0.035\,\mathrm{m}$ , o temporal  $\Delta t = 0.007\,\mathrm{s}$  e o parâmetro de relaxamento,  $\tau = 0.60$ . O número de iterações realizadas foi de 40000, o que corresponde a um tempo de 280 segundos, suficiente para atingir o regime permanente e o tempo de processamento foi de 298 segundos.

Na Figura 20, tem-se o perfil da profundidade da água em  $y=1\,\mathrm{m}$  e na direção do escoamento com o parâmetro de relaxamento  $\tau=0,60,$  e os dados experimentais. O erro relativo, comparando dados númericos e experimentais, na simulação é menor do que 1% no decorrer de todo o canal. Na Figura 21, observa-se que a profundidade da água aumenta ao se aproximar do cilindro, diminui nas laterais e atinge seu valor mínimo logo depois do cilindro. Tem-se na Figura 22 a velocidade da água na direção do escoamento. Nota-se que a mesma aumenta nas laterais do cilidro e atinge o valor mínimo logo depois do cilindro. A vorticidade do escoamento é apresentada na Figura 23 e pode-se notar maior magnitude da vorticidade em regiões próximas do cilíndro.

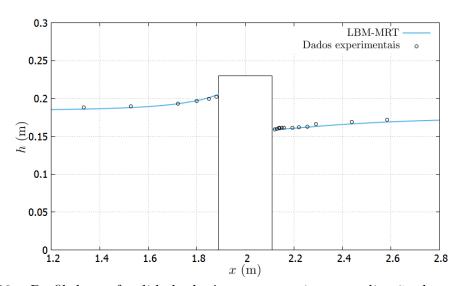


Figura 20 – Perfil da profundidade da água em y = 1 m e na direção do escoamento.

Pode-se calcular o erro relativo utilizando somente resultados da simulação. Esta forma de cálculo do erro fornece um indicativo da convergência da solução numérica para a solução analítica. É utilizada quando não existe solução analítica, ou comparação com outros métodos numéricos ou dados experimentais. Procede-se com a obtenção do erro

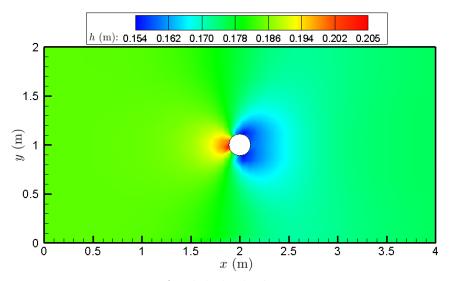


Figura 21 – Profundidade da água com  $\tau=0{,}60$ 

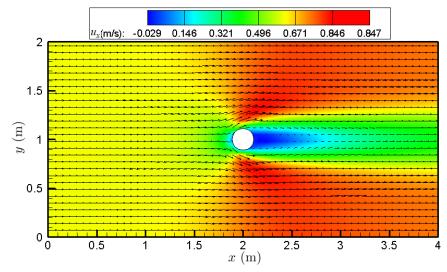


Figura 22 – Velocidade da água na direção do escoamento,  $u_x$  com  $\tau=0{,}60$ 

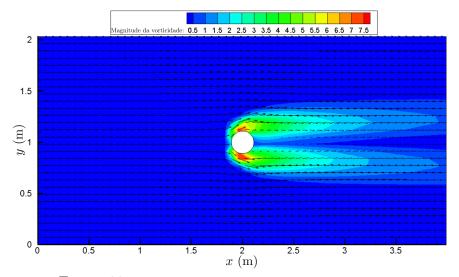


Figura 23 – Magnitude da vorticidade, com  $\tau = 0.60$ .

relativo por meio da seguinte expressão,

$$E_{rel} = \frac{\|h(\vec{x}, t + \Delta t) - h(\vec{x}, t)\|}{\|h(\vec{x}, t + \Delta t)\|} \times 100.$$
(8.16)

Na Figura 24, nota-se que o maior erro relativo é menor do que 0,01% quando aplica-se a expressão (8.16). Este erro atende aos requisitos de precisão da maioria dos problemas em Engenharia Hidráulica (ZHANG et al., 2016).

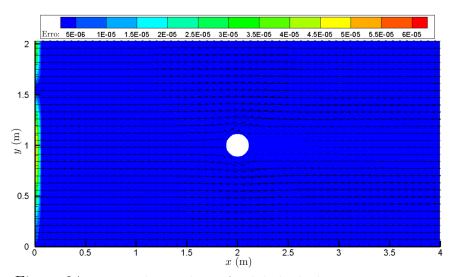


Figura 24 – Erro relativo da profundidade da água, com  $\tau = 0.60$ .

Quando diminuiu-se o parâmetro de relaxamento para  $\tau=0,501$ , o erro relativo calculado por meio de (8.16) é menor do que 0,45%. Ao utilizar  $\tau=0,5002$ , a viscosidade numérica se aproxima da viscosidade da água, o escoamento se torna muito turbulento, difícil de prever, e portanto, o erro aumenta. Quando  $\tau=0,5002$ , o erro relativo é menor que 3%. As novas configurações para a profundidade da água, velocidade e erro relativo podem ser vistas nas Figuras 25, 26 e 27, respectivamente.

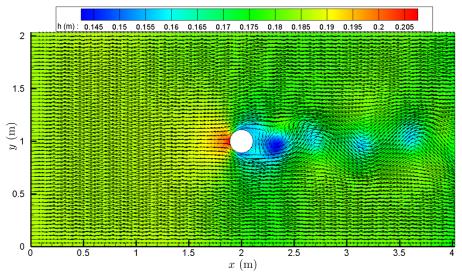


Figura 25 – Profundidade da água com  $\tau=0{,}5002$ 

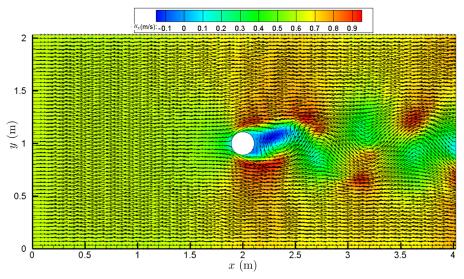


Figura 26 – Velocidade da água na direção do escoamento,  $u_x$  com  $\tau=0.5002$ 

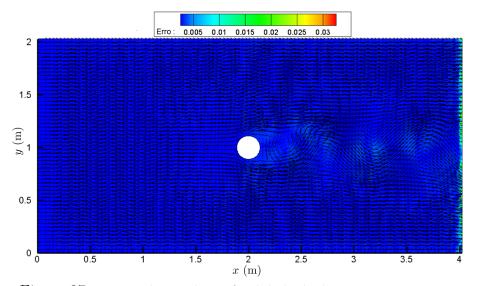


Figura 27 – Erro relativo da profundidade da água, com  $\tau = 0.5002$ .

Comparando as Figuras 23 e 28, nota-se que, com a diminuição do parâmetro de relaxamento de  $\tau=0.60$  para  $\tau=0.5002$ , a turbulência aumentou significativamente, provocando vórtices de maior intensidade.

Neste estudo de caso, o obstáculo não está submerso, portanto a água descola-se ao redor do cilindro e tem-se dados experimentais para comparação. Pode-se observar o aumento da instabilidade, quando comparado com o problema da seção 8.2. Observando-se frequentes instabilidades, incorporou-se ao código computacional um subrotina para verificar os motivos das instabilidades. Considerando as condições (5.51), (5.52), (5.53) e (5.55), frequentemente acorre falha em (5.55), pois os escoamentos reais podem apresentar características de supercríticos. Também pensando em melhorar a estabilidade, incorporouse ao modelo o operador de colisão com múltiplos tempos de relaxamento (MRT). O operador MRT, aliado com a subrotina da turbulência, permitiu que parâmetros  $\Delta t$ ,  $\Delta x$  e  $\tau$  fossem ajustados para obter o menor erro relativo possível, quando comparados a

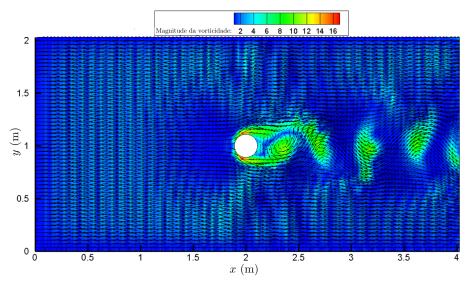


Figura 28 – Magnitude do vorticidade, com  $\tau = 0.5002$ .

solução numérica e os dados experimentais. Ao diminuir o parâmetro de relaxamento, mantendo os mesmos valores de  $\Delta t$  e  $\Delta x$ , a viscosidade cinemática também diminui devido a relação (5.51), e, o número de Reynolds aumenta, caracterizando um escoamento turbulento. Observa-se que o erro relativo aumenta significativamente quando o número de Reynolds aumenta.

Observando a concordância obtida entre a simulação numérica e os dados experimentais, tem-se que o LBM-MRT, com abordagem da turbulência, mostrou-se eficaz na simulação escoamento de água ao redor de um cilindro localizado no centro de um canal retangular e uma alternativa potencial para a simulação numérica de problemas envolvendo escoamento de fluidos.

#### 9 ESCOAMENTO EM CANAIS COM CHICANAS SUBMERSAS

Os dois estudos de caso apresentados nesta tese, fazem parte do Canal da Piracema, localizado no parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu em um trecho de fronteira entre o Brasil e o Paraguai. O Canal da Piracema, Figura 29, foi construído com o objetivo principal de manter o fluxo migratório das espécies de peixes nativas do Rio Paraná (MAKRAKIS, 2007). De acordo com as informações apresentadas no Jornal de Itaipu Eletrônico (2015), o Canal da Piracema possibilita a passagem de jusante para montante da Usina, fazendo a ligação do rio com o reservatório, vencendo um desnível médio de 120 m de altura. O Canal da Piracema possui 10 km de extensão e permite aos peixes migradores chegar às áreas de reprodução e berçários acima do reservatório. O retorno acontece no período de outono e inverno, quando ocorre a migração para áreas de alimentação.

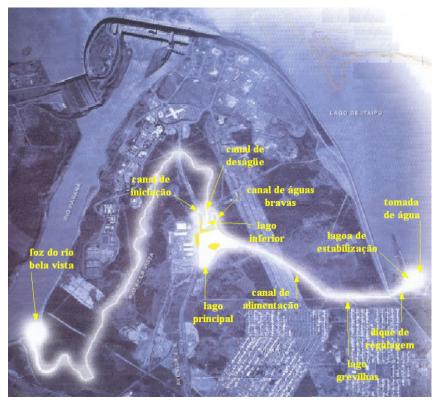


Figura 29 – Canal da Piracema localizado no parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu Fonte: Friedrich et al. (2007).

Neste capítulo, apresentam-se os dois estudos de caso propostos nesta tese, conforme apresentados na seção 1.1. São escoamentos em regime permanente e governados pelas equações de águas rasas (3.4), que serão resolvidas por meio do LBM com múltiplos tempos de relaxamento e com abordagem da turbulência.

Os dois estudos de caso simulados neste capítulo são descritos conforme segue,

- a) Simulação bidimensional do escoamento de água em um canal com chicanas submersas posicionadas a cada 5 m de uma margem até a outra, por meio do LBM-BGK e LBM-MRT, com abordagem da turbulência e com rotina de estabilidade. Esta simulação é baseada no primeiro trecho do canal de iniciação, construído no parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu. A função das chicanas é reduzir a velocidade da água e permitir a ocorrência da Piracema;
- b) Simulação bidimensional do escoamento de água em um canal com chicanas submersas distribuídas alternadamente nas suas margens, por meio do LBM-BGK e LBM-MRT, com abordagem da turbulência e com rotina de estabilidade. Esta simulação é baseada no primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira, construído no parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu.

A partir do modelo desenvolvido para o estudo de caso apresentado na seção 8.3, aplicou-se este mesmo modelo para os problemas principais desta tese, que são os trechos analisados do Canal da Piracema, descritos nos item a) e b). Alterou-se a geometria do canal, tipos de obstáculos e ajustes dos parâmetros para obter estabilidade numérica.

# 9.1 CANAL COM CHICANAS POSICIONADAS DE UMA MARGEM ATÉ A OUTRA

#### 9.1.1 Características do Problema

Este estudo é governado pelas equações de águas rasas (3.4) e inspirado em um trecho do canal de iniciação, com comprimento de 33 m e largura de 5 m, localizado entre o lago principal e o lago inferior. O canal de iniciação faz parte do Canal da Piracema, construído na Usina Hidrelétrica de Itaipu em 2002. Itaipu está localizada no rio Paraná, em um trecho de fronteira entre o Brasil e o Paraguai (MAKRAKIS, 2007).

O canal de iniciação possui chicanas (obstáculos submersos) posicionadas de uma margem até a outra, com altura de 0,3 m, largura da base 1 m e do topo 0,5 m, a seção transversal é trapezoidal. Outras informações sobre a geometria são descritas na Tabela 2 e podem ser encontradas em (MULLER; GIBERTONI, 2002).

Tabela 2 – Características do canal de iniciação que compõe o Canal da Piracema na Usina Hidrelétrica de Itaipu.

Extensão (m)	Declividade (%)	Largura do fundo (m)	Distância entre as chicanas (m)	Número de chicanas
443	1,4	5	5	88
64	0	5	-	-

Como o canal possui 507 m de comprimento, optou-se por simular um trecho de 33 m, com seção transversal retangular. Outras informações sobre a geometria do problema

simulado são descritas na Tabela 3. Na Figura 30, tem-se um trecho do canal de iniciação e na Figura 31, tem-se a representação computacional para o fundo deste canal.

Tabela 3 –	Características	do	trecho	escolhido	do	canal	de	iniciaçã	ão.

Extensão (m)	Declividade (%)	Largura do fundo (m)	Distância entre as chicanas (m)	Número de chicanas
30	1,4	5	5	6
3	0	5	-	-



Figura 30 – Trecho do canal de iniciação no parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu Fonte: Friedrich et al. (2007).

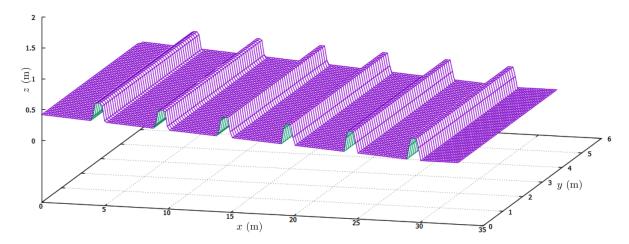


Figura 31 – Representação computacional para o fundo do trecho escolhido do canal de iniciação.

Para obter a Figura 31, primeiramente foi necessário construir as chicanas de forma que o leito do canal possua inclinação nula. Como as chicanas possuem altura de  $0.3\,\mathrm{m}$ ,

largura da base 1 m e do topo 0,5 m, a seção transversal é trapezoidal, a representação matemática do primeiro trecho do canal até o final da primeira chicana, fica descrito por,

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \le x \le 4, \\ \frac{6}{5}(x-4), & \text{se } 4 < x \le 4, 25, \\ \frac{3}{10}, & \text{se } 4, 25 < x \le 4, 75, \\ -\frac{6}{5}(x-5), & \text{se } 4, 75 < x \le 5. \end{cases}$$
(9.1)

Depois de construído o fundo do canal até a posição  $x=5\,\mathrm{m}$ , repete-se a construção dos outros trechos. Ao final têm-se as 6 chicanas em um canal com inclinação 0%.

Nota-se que o canal de iniciação possui inclinação real de 1,4%, portanto a construção feita em (9.1) precisa sofrer uma rotação de eixos, obtendo-se então a representação matemática do primeiro trecho do canal de iniciação até o final da primeira chicana, com rotação de 1,4%,

$$f_{rot}(x') = \begin{cases} -\frac{14}{1000}x', & \text{se } 0 \le x' \le \frac{1000000}{250049}, \\ \frac{2965}{2542}x' - \frac{6000}{1271}, & \text{se } \frac{1000000}{250049} < x' \le \frac{1063550}{250049}, \\ -\frac{14}{1000}x' + \frac{3}{10}, & \text{se } \frac{1063550}{250049} < x' \le \frac{1188550}{250049}, \\ -\frac{3035}{2458}x' + \frac{7500}{1229}, & \text{se } \frac{1188550}{250049} < x' \le \frac{1250000}{250049}. \end{cases}$$
(9.2)

Novamente repete-se a construção dos outros trechos do canal, pois a mesma configuração se repete de  $x=5\,\mathrm{m}$  em  $x=5\,\mathrm{m}$ . Ao final têm-se as 6 chicanas em um canal com inclinação 1,4%, resultando na Figura 31. Neste estudo de caso as chicanas são posicionadas de um lado até o outro do canal de iniciação.

A geometria do canal e das chicanas em uma vista de perfil na posição (x, ny/2) é apresentada na Figura 32,

#### 9.1.2 Resultados e Discussões

As equações governantes do escoamento são as equações de águas rasas (3.4), que são resolvidas por meio do método do reticulado de Boltzmann com múltiplos tempos de relaxamento. Devido às características deste estudo de caso, incorporou-se ao código computacional uma técnica de simulação em grandes escalas (LES - *Large Eddy Simulation*) e esta permite obter resultados mais próximos do comportamento real do escoamento. Além disso, avaliou-se a estabilidade da simulação em todos os pontos da malha para cada

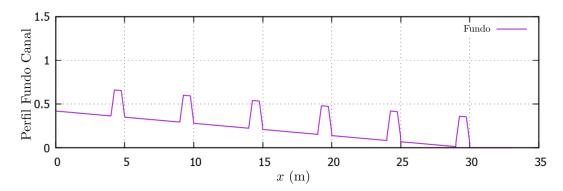


Figura 32 – Perfil do canal de iniciação em (x, ny/2).

passo de tempo e, juntamente com a propriedade da consistência do LBM, obtém-se a convergência da solução. A simulação forneceu a profundidade, velocidades nas direções x e y, e a magnitude da vorticidade da água.

Com relação as condições de contorno, nas paredes do canal, utilizou-se a condição de contorno bounce-back para representar não-escorregamento. Na entrada do canal considera-se vazão constante e na saída do canal tem-se altura constante. Além disso, foi feito um tratamento para cada um dos quatro pontos localizados nos cantos da malha.

Os parâmetros utilizados são, o comprimento do canal é  $L_x=33\,\mathrm{m}$ , a largura do canal é  $L_y=5\,\mathrm{m}$ , a altura inicial da água é  $h_0=1,30\,\mathrm{m}$ , a velocidade inicial na direção x é  $u_{x0}=1,0\,\mathrm{m/s}$ , a velocidade inicial na direção y é  $u_{y0}=0,0\,\mathrm{m/s}$  e o parâmetro de relaxamento é  $\tau=1,0$ . Os parâmetros foram escolhidos de forma mais próxima possível ao modelo real. O parâmetro de relaxamento foi considerado o mais próximo possível do valor mínimo limite, que é  $\tau>0,5$ , de forma que a simulação retorne resultado estáveis. A constante de Smagorinsky considerada é  $C_s=0,3$ , pois representa satisfatoriamente bem os efeitos da turbulência na simulação do escoamento (LIU; ZHOU; BURROWS, 2010),  $s_0=\ldots=s_6=1,0$  e  $s_7=s_8=1/\tau$  (PENG et al., 2014).

Foram realizadas simulações, das quais, têm-se os parâmetros de simulação e resultados apresentados na Tabela 4. O erro relativo foi calculado conforme expressão (8.16).

Para compor a Tabela 4, primeiramente, escolheu-se um valor para a velocidade do reticulado (e). Este parâmetro foi escolhido com base na expressão (5.53), ou seja,  $e > \sqrt{gh}$ . Os outros parâmetros,  $\Delta x$  e  $\Delta t$  são escolhidos de forma que a simulação retorne valores estáveis. A simulação é estável se as condições (5.52), (5.53) e (5.55) são satisfeitas simultaneamente. Os parâmetros e,  $\Delta x$  e  $\Delta t$  foram ajustados de forma a obter estabilidade numérica.

Quanto ao termo de força, foram negligenciados o parâmetro de Coriolis e a tensão de cisalhamento do vento na superfície da água. Dessa forma, o termo de força foi utilizado na forma descrita na expressão (5.12).

Tabela 1 Tarametros de simulação para e canar de iniciação.								
Velocidade no	Passo	Passo de	Escoamento	Erro				
reticulado	espacial	tempo	estável	relativo (%)				
$e\left(m/s\right)$	$\Delta x(m)$	$\Delta t\left(s\right)$	estavei	Máx. e Min.				
5,0	0,04	0,00800	Não	-				
$5,\!1$	0,04	0,00780	Não	-				
5,2	0,04	0,00770	Não	-				
5,3	0,04	0,00752	Não	_				
5,4	0,04	0,00741	Não	_				
5,5	0,04	0,00727	Sim	0,09 - 0,005				
5,6	0,04	0,00714	Sim	0,09 - 0,005				
5,7	0,04	0,00700	Sim	0,09 - 0,005				
6,0	0,04	0,00670	Sim	0,08 - 0,005				
10,0	0,04	0,00400	Sim	0,08 - 0,005				
15,0	0,04	0,00267	Sim	0,08 - 0,005				
20,0	0,04	0,00200	Sim	0,07 - 0,005				
26,67	0,04	0,00150	Sim	0,07 - 0,005				

Tabela 4 – Parâmetros de simulação para o canal de iniciação.

Os resultados apresentados a seguir são para o caso em que a velocidade no reticulado é de  $e=20\,\mathrm{m/s}$ , o espaçamento na malha é  $\Delta x=\Delta y=0.04\,\mathrm{m}$  e o passo de tempo  $\Delta t=0.002\,\mathrm{s}$ . O número de iterações realizadas foi de 50000, o que corresponde a um tempo de 100 segundos, suficiente para atingir o regime permanente eo tempo de processamento gasto no processamento foi de 6091 segundos.

A Figura 33 apresenta a profundidade da água ao longo do canal. Percebe-se que a restrição de altura mínima 0,80 m foi satisfeita. Ao se aproximar da chicana, a profundidade da água aumenta. Logo depois da água passar passar pela crista da chicana, a profundidade diminui. Em cima da chicana a lamina de água é menor do que no restante do canal.

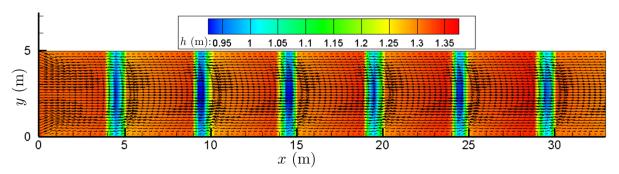


Figura 33 – Profundidade da água no canal com chicanas.

Mostra-se na Figura 34, que nos pontos localizados sobre as chicanas, a velocidade na direção x atinge seu ponto máximo. Na maioria dos pontos do canal a velocidade é menor do que  $1,4\,\mathrm{m/s}$ . Este resultado mostra que, de fato, as chicanas exercem seu papel de reduzir a velocidade da água, e deste modo, os peixes podem usufruir do espaço perto

das chicanas, onde a velocidade é menor, como espaço de descanso. A velocidade máxima é menor do que  $2\,\mathrm{m/s}$ . Para este estudo de caso, a velocidade pode ser excedida em cima das chicanas (MULLER; GIBERTONI, 2002). A Figura 35 mostra que, utilizando os mesmos parâmetros de simulação, porém sem as chicanas, a velocidade na direção x, é máxima em uma grande região do canal. A comparação entre as Figuras 34 e 35, ratifica a importância das chicanas, cuja função é reduzir a velocidade da água.

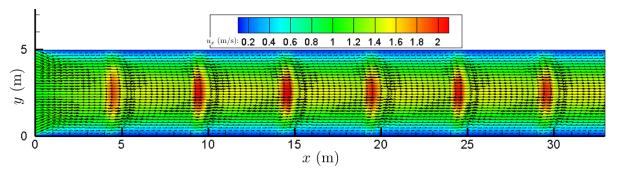


Figura 34 – Velocidade da água na direção x no canal de iniciação com chicanas.

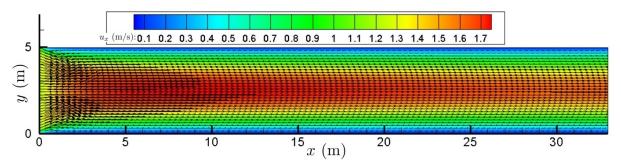


Figura 35 – Velocidade da água na direção x no canal de iniciação sem chicana.

Tem-se também, a velocidade da água na direção y, conforme Figura 36, onde pode-se observar a simetria da simulação. Nas chicanas e na entrada do canal, a velocidade é mais representativa. Percebe-se que na Figura 37, os vórtices acorrem com maior intensidade nas paredes do canal próximo das chicanas.

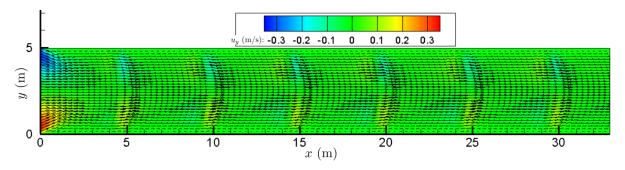


Figura 36 – Velocidade da água na direção y no canal de iniciação com chicanas.

Na Figura 38, nota-se que o maior erro relativo, na ordem de  $7 \times 10^{-4}$  ocorre na entrada do canal, alertando para a busca de condições de contorno que representem melhor as características físicas do problema.

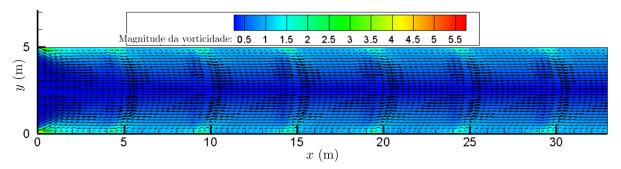


Figura 37 – Magnitude dos vórtices no canal de iniciação com chicanas.

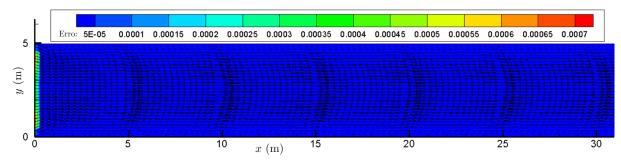


Figura 38 – Erro relativo para a profundidade da água no canal de iniciação com chicanas.

Exceto nos primeiros pontos da entrada do canal, o erro relativo da profundidade da água é menor do que 0,01%. Este erro atende aos requisitos de precisão da maioria dos problemas em Engenharia Hidráulica (ZHANG et al., 2016). Os resultados mostram a capacidade e a precisão do LBM-MRT, com abordagem da turbulência, na simulação de escoamento em canais com obstáculos submersos, governado pelas equações de águas rasas. Observa-se que a simulação cumpriu as condições para a ocorrência da Piracema, ou seja, as velocidades não ultrapassaram 3 m/s nas seções transversais ao longo do trecho analisado, a profundidade da água é superior a 0.8 m e áreas molhadas nas seções transversais superiores a 6 m<sup>2</sup>. Além disso, ao se aproximar da chicana, a profundidade da água aumenta. Em cima da chicana a lâmina de água diminui e a velocidade aumenta. Notou-se também que a profundidade da água logo depois da chicana é menor que antes da chicana. Este processo se repete ao longo do trecho analisado. Outro ponto interessante é que o LBM-MRT foi capaz de confirmar que as chicanas exercem o papel de reduzir a velocidade da água. A abordagem da turbulência e o operador de colisão MRT permitiram a diminuição do parâmetro de relaxamento e consequentemente, os resultados descrevem a situação física de forma mais realista. Sem esta implementação, utilizando o LBM-BGK, o valor mínimo alcançado para o parâmetro de relaxamento foi 1,5, enquanto que no LBM-MRT  $\tau = 1,0$ . A presença no código da rotina de estabilidade trouxe, juntamente com a consistência do método, a garantia da convergência da solução numérica.

# 9.2 CANAL COM CHICANAS DISTRIBUÍDAS ALTERNADAMENTE NAS SUAS MARGENS

#### 9.2.1 Características do Problema

O problema simulado é inspirado no primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira, com comprimento de 30 m e largura de 8 m, que faz parte do sistema de transposição de peixes (Canal da Piracema) construído na Usina Hidrelétrica de Itaipu em 2002. O canal de alimentação em trincheira está localizado entre o dique de regulagem e o lago das Grevilhas. O dique de regulagem atua junto com a estrutura de tomada da água e controlam a vazão que escoa pelo canal. O lago das Grevilhas é uma lagoa artificial construída como local de descanso para os peixes (FRIEDRICH et al., 2007).

As dimensões e parâmetros reais do trecho escolhido encontram-se listadas na Tabela 5 (MULLER; GIBERTONI, 2002). Cada chicana possui 7 m de comprimento, largura da base igual a 1 m e largura do topo igual a 0,5 m.

Tabela 5 – Características reais no primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira que compõe o Canal da Piracema na Usina Hidrelétrica de Itaipu.

Extensão (m)	Declividade (%)	Largura do fundo (m)	Distância entre as chicanas (m)	Número de chicanas	Altura das chicanas (m)
24	5	8	4	6	0,6
6	0	8	_	_	_

Devido a problemas de instabilidade numérica, ocasionada principalmente pelo escoamento em regime supercrítico, escolheu-se a caracterização para o trecho de acordo com a Tabela 6. Portanto, o estudo de caso abordado nesta seção, é baseado no primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira.

Tabela 6 – Características baseadas no primeiro trecho do canal de alimentação em trincheira que compõe o Canal da Piracema na Usina Hidrelétrica de Itaipu.

Extensão (m)	Declividade (%)	Largura do fundo (m)	Distância entre as chicanas (m)	Número de chicanas	Altura das chicanas (m)
24	1	8	4	6	0,4
6	0	8	-	-	-

Na Figura 39 tem-se o trecho do canal de alimentação em trincheira. Pode-se ver na Figura 40, a representação computacional tridimensional para o fundo do canal.

Para obter a Figura 40, primeiramente foi necessário construir as chicanas de forma que o leito do canal possua inclinação nula. Nota-se que as chicanas estão posicionadas

alternadamente em relação as margens, deste modo, é necessário construir uma chicana para cada lado do canal e, de forma análoga, repete-se a construção dos outros trechos. Como as chicanas possuem altura de 0,4 m, largura da base 1 m e do topo 0,5 m, a seção transversal é trapezoidal, a representação matemática do trecho do canal de alimentação em trincheira até o final da primeira chicana localizada na parede inferior do canal, fica descrito por,

$$f_{1}(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \le x \le 3, \\ \frac{8}{5}(x-3), & \text{se } 3 < x \le 3, 25, \\ \frac{3}{10}, & \text{se } 3, 25 < x \le 3, 75, \\ -\frac{8}{5}(x-4), & \text{se } 3, 75 < x \le 4. \end{cases}$$
(9.3)

A descrição feita em (9.3) refere-se ao trecho localizado no início do canal (x=0) até o final da chicana número 1 apresentada na Figura 41.

A representação matemática do trecho do canal de alimentação em trincheira até o final da primeira chicana localizada na parede superior do canal, fica descrito por,

$$f_{2}(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \le x \le 7, \\ \frac{8}{5}(x-7), & \text{se } 7 < x \le 7, 25, \\ \frac{3}{10}, & \text{se } 7, 25 < x \le 7, 75, \\ -\frac{8}{5}(x-8), & \text{se } 7, 75 < x \le 8. \end{cases}$$
(9.4)

A descrição feita em (9.4) refere-se ao trecho localizado em  $x=4\,\mathrm{m}$  até o final da chicana número 2 apresentada na Figura 41.

Depois de construído o fundo do canal até a posição  $x=4\,\mathrm{m}$ , basta otimizar a construção dos outros trechos, pois a mesma configuração se repete de  $x=4\,\mathrm{m}$  em  $x=4\,\mathrm{m}$ . Ao final têm-se as 6 chicanas em um canal com inclinação 0%.

Devido a problemas de instabilidade numérica o canal de alimentação em trincheira foi simulado, neste estudo de caso, com inclinação de 1%, portanto a construção feita em (9.1) precisa sofrer uma rotação de eixos, obténdo-se a representação matemática do primeiro trecho do canal de iniciação até o final da primeira chicana no lado inferior e

superior do canal, com rotação de 1%, respectivamente,

$$f_{1_{rot}}(x') = \begin{cases} -\frac{1}{100}x', & \text{se } 0 \le x' \le \frac{30000}{10001}, \\ \frac{1195}{512}x' - \frac{225}{32}, & \text{se } \frac{30000}{10001} < x' \le \frac{32560}{10001}, \\ -\frac{1}{100}x' + \frac{6}{10}, & \text{se } \frac{32560}{10001} < x' \le \frac{37560}{10001}, \\ -\frac{1205}{488}x' + \frac{600}{61}, & \text{se } \frac{37560}{10001} < x' \le \frac{40000}{10001}, \end{cases}$$

$$(9.5)$$

e

$$f_{2rot}(x') = \begin{cases} -\frac{1}{100}x', & \text{se } \frac{40000}{10001} \le x' \le \frac{70000}{10001}, \\ \frac{1195}{512}x' - \frac{525}{32}, & \text{se } \frac{70000}{10001} < x' \le \frac{72560}{10001}, \\ -\frac{1}{100}x' + \frac{6}{10}, & \text{se } \frac{72560}{10001} < x' \le \frac{77560}{10001}, \\ -\frac{1205}{488}x' + \frac{1200}{61}, & \text{se } \frac{77560}{10001} < x' \le \frac{80000}{10001}. \end{cases}$$
(9.6)

Novamente é necessário otimizar a construção dos outros trechos do canal, pois a mesma configuração se repete de  $x=4\,\mathrm{m}$  em  $x=4\,\mathrm{m}$ . Ao final têm-se as 6 chicanas, posicionadas alternadamente em relação as margens, em um canal com inclinação 1,0%, resultando na Figura 40. Neste estudo de caso as chicanas são posicionadas alternadamente em relação as margens do canal de alimentação em trincheira. Com o objetivo de melhorar a visualização do canal, na Figura 41 tem-se a vista plana.

A ocorrência da Piracema está condicionada às seguintes restrições: velocidades médias não superiores a  $3\,\mathrm{m/s}$  nas seções transversais ao longo do complexo do parque de barragem, profundidade da água superior a  $0.8\,\mathrm{m}$  e áreas molhadas nas seções transversais superiores a  $6\,\mathrm{m}^2$  (pode ser de  $4\,\mathrm{m}^2$  em trechos curtos). O não atendimento aos requisitos citados somente serão permitidos em trechos bastante curtos e em condições especiais, como por exemplo, sobre os obstáculos (chicanas) construídas ao longo do canal e nas aberturas das chicanas (MULLER; GIBERTONI, 2002). Simulações computacionais do escoamento unidimensional realizadas por Muller e Gibertoni (2002), concluíram que nas proximidades das chicanas ocorre a diminuição da profundidade da água acompanhada de um aumento de velocidade e no trecho onde o canal não apresenta obstáculo, o escoamento tende a voltar a condição anterior acontecendo um aumento de profundidade e consequentemente diminuição de velocidade. Além disso, a vazão ideal no canal é de  $Q = 11.5\,\mathrm{m}^3/\mathrm{s}$ ,



Figura 39 – Trecho do canal de alimentação em trincheira no parque da Usina Hidrelétrica de Itaipu.

Fonte: Friedrich et al. (2007)

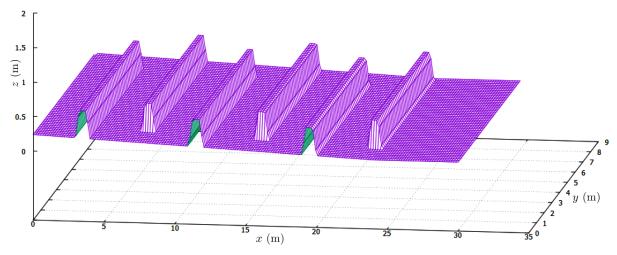


Figura 40 — Representação computacional tridimensional para o fundo do trecho escolhido do canal de alimentação em trincheira.

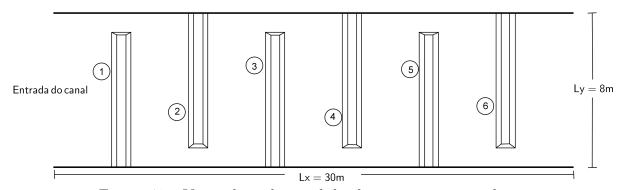


Figura 41 – Vista plana do canal de alimentação em trincheira.

#### 9.2.2 Resultados e Discussões

Apresenta-se a simulação numérica bidimensional do escoamento de água em um canal retangular com chicanas submersas distribuídas alternadamente nas suas margens. As equações governantes do escoamento são as equações de águas rasas, que foram resolvidas por meio do método do reticulado de Boltzmann (LBM) com múltiplos tempos de relaxamento (MRT). Devido às características do problema que pretende-se simular, incorporou-se ao código computacional uma técnica de simulação em grandes escalas (LES - Large Eddy Simulation) e esta permite obter resultados mais próximos do comportamento real do escoamento. Além disso, avaliou-se a estabilidade da simulação em todos os pontos da malha para cada passo de tempo e, juntamente com a propriedade da consistência do LBM, obtém-se a convergência da solução. A simulação fornece a profundidade, velocidades nas direções x e y, e a magnitude da vorticidade da água.

Com relação as condições de contorno, nas paredes do canal, utilizou-se a condição de contorno bounce-back para representar velocidade zero (ZHOU, 2004; LIU, 2009). Na entrada do canal utilizou-se vazão constante. Na saída do canal tem-se altura constante. Além disso, foi realizado um tratamento para cada um dos quatro pontos localizados nos cantos da malha. Estas configurações podem ser vistas em Liu (2009)

Os parâmetros utilizados são, o comprimento do canal é  $L_x=30\,\mathrm{m}$ , a largura do canal é  $L_y=8\,\mathrm{m}$ , a altura inicial da água é  $h_0=1,40\,\mathrm{m}$ , a velocidade inicial na direção x é  $u_{x0}=1,0\,\mathrm{m/s}$ , a velocidade inicial na direção y é  $u_{y0}=0,\mathrm{m/s}$  e o parâmetro de relaxamento é  $\tau=1,1$ . Os parâmetros foram escolhidos de forma mais próxima possível ao modelo real. O parâmetros de relaxamento foi escolhido o mais próximo possível do valor mínimo limite, que é  $\tau>0,5$ , de forma que a simulação retorne resultado estáveis. A constante de Smagorinsky escolhida é  $C_s=0,3$  (LIU; ZHOU; BURROWS, 2010),  $s_0=\ldots=s_6=1,0$  e  $s_7=s_8=1/\tau$  (PENG et al., 2014).

Foram realizadas várias simulações, das quais, têm-se os parâmetros de simulação e resultados apresentados na Tabela 7. O erro relativo foi calculado conforme expressão (8.16).

Iniciou-se a simulação escolhendo-se a velocidade no reticulado (e). Este número é escolhido levando em consideração a condição (5.53) de estabilidade, que representa a relação entre a velocidade das partículas no reticulado e a celeridade.

Quanto ao termo de força, foram negligenciados o parâmetro de Coriolis e a tensão de cisalhamento do vento na superfície da água. Dessa forma, o termo de força é dado conforme expressão (5.12).

Os resultados apresentados a seguir são para o caso em que a velocidade no reticulado é de  $e=5.7\,\mathrm{m/s}$ , o espaçamento no malha é  $\Delta x=\Delta y=0.04\,\mathrm{m}$  e o passo de tempo  $\Delta t=0.007\,\mathrm{s}$ . O número de iterações realizadas foi de 50000, o que corresponde a

		_		_
Veloc. no	Passo	Passo de		Erro
reticulado	espacial	tempo	Estável	relativo (%)
$e\left(m/s\right)$	$\Delta x(m)$	$\Delta t\left(s\right)$		Máx. e Min.
5,0	0,04	0,00800	Não	-
5,1	0,04	0,00780	Não	-
5,2	0,04	0,00770	Não	-
5,3	0,04	0.00752	Não	-
5,4	0,04	0,00741	Não	-
5,5	0,04	0,00727	Sim	0,023 - 0,005
5,6	0,04	0,00714	Sim	0,023 - 0,005
5,7	0,04	0,0070	Sim	0,022 - 0,005
6,0	0,04	0,00670	Sim	0,022 - 0,005
6,5	0,04	0,00615	Sim	0,021 - 0,005
7,0	0,04	0,00570	Sim	0,021 - 0,005
10,0	0,04	0,00400	Sim	0,021 - 0,005
20,0	0,04	0,00200	Sim	0,021 - 0,005
25,0	0,04	0,00160	Sim	0,021 - 0,005

Tabela 7 – Parâmetros de simulação para o canal de alimentação em trincheira.

um tempo de 350 segundos, suficiente para atingir o regime permanente e o tempo de processamento gasto no processamento foi de 8780 segundos.

A Figura 42 apresenta a profundidade da água ao longo do canal. Perceba que a restrição de altura mínima  $0.80\,m$  foi satisfeita. Ao se aproximar da chicana a profundidade da água aumenta. Logo depois da água passar pela crista da chicana, a profundidade diminui. Em cima da chicana a lamina de água é menor do que no restante do canal. Além disso, na abertura da chicana, a profundidade diminui e torna a subir quando se aproxima da próxima chicana.

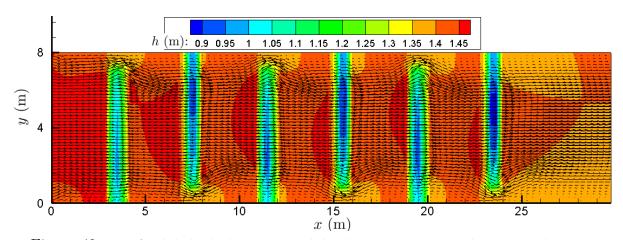


Figura 42 – Profundidade da água no canal de alimentação em trincheira com chicanas.

Na Figura 43, somente nos pontos em cima e na abertura das chicanas, a velocidade na direção x atinge seu ponto máximo. Na maioria dos pontos do canal a velocidade é menor do que  $1,2\,\mathrm{m/s}$ . Este resultado mostra que, de fato, as chicanas exercem seu papel

de conter a velocidade da água. Nota-se também que, a velocidade máxima é menor do que  $3\,\mathrm{m/s}$ , que é a velocidade máxima permitida para a ocorrência da Piracema. Esta velocidade só pode ser excedida, na abertura ou em cima da chicana. A Figura 44 mostra que, utilizando os mesmos parâmetros de simulação, porém sem as chicanas, a velocidade na direção x, é máxima em uma grande região do canal. A comparação entre as Figuras 43 e 44, ratifica a importância das chicanas.

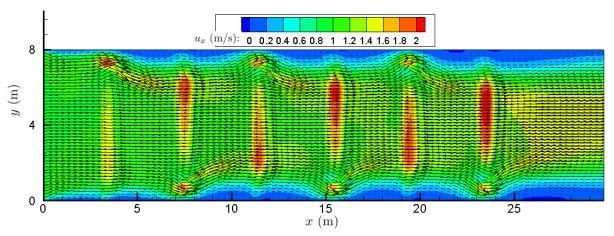


Figura 43 – Velocidade da água na direção x no canal de alimentação em trincheira com chicana.

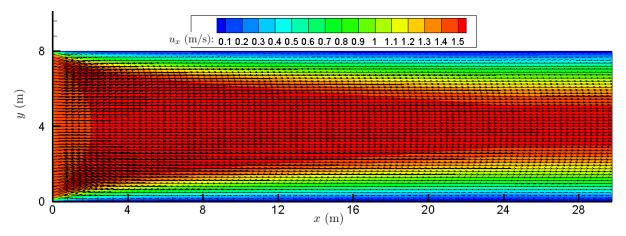


Figura 44 – Velocidade da água na direção x no canal de alimentação em trincheira sem chicana.

Tem-se também, a velocidade da água na direção y, conforme Figura 45. Observouse a simetria da simulação e percebeu-se que nas aberturas das chicanas, a velocidade é mais representativa. Na Figura 46, os vórtices acorrem com maior intensidade nas paredes do canal próximo da abertura das chicanas e a apresentação deste resultado foi possível devido a incorporação da técnica LES, por meio do modelo de Smagorinsky, que permitiu capturar da magnitude dos vórtices.

Na Figura 47, nota-se que o maior erro relativo ocorre na entrada do canal, alertando para a busca de condições de contorno que representem melhor as características físicas do problema. O tratamento especial para os cantos da malha apresentou uma melhora significativa no erro relativo máximo da simulação, diminuindo de 0.2% para 0.02%.

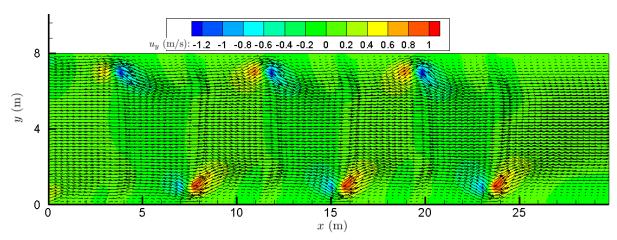


Figura 45 – Velocidade da água na direção y no canal de alimentação em trincheira com chicana.

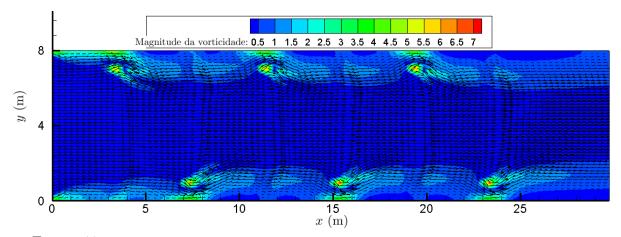


Figura 46 – Magnitude dos vórtices no canal de alimentação em trincheira com chicana.

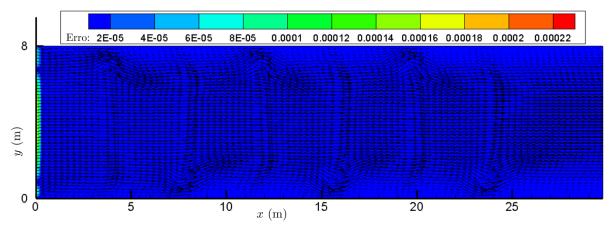


Figura 47 — Erro relativo para a pronfidade da água no canal de alimentação em trincheira com chicanas.

Notou-se, conforme Figura 48, que o número de Froude aumenta na passagem da água pela lateral e por cima das chicanas. Tentou-se diminiur a altura e aumentar a velocidade da água, porém todas as simulações retornaram número de Froude maior do um, e consequentemente, instabilidade numérica na simulação. A altura mínima da água, considerada como condição inicial na simulação, foi de 1,40 m e a velocidade máxima foi de  $u_x = 1,0$  m/s.

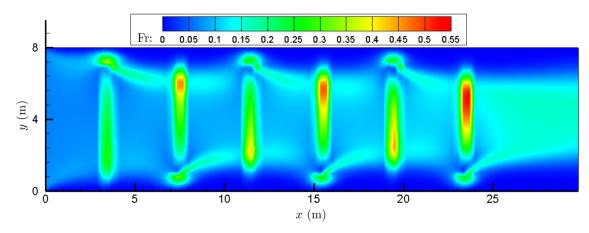


Figura 48 – Variação do número do Froude no canal de alimentação em trincheira com chicanas.

No processo de simulação deste estudo de caso, notou-se que, a partir da velocidade no reticulado igual a 6,5 m/s, o erro relativo da profundidade da água não apresentou melhora, conforme pode-se verificar na Tabela 7. Exceto nos primeiros pontos da entrada do canal, o erro relativo é menor do que 0,01%. Este erro atende aos requisitos de precisão da maioria dos problemas em Engenharia Hidráulica (ZHANG et al., 2016).

Devido a problemas de instabilidades numéricas, oriundas do fato de que canal de alimentação em trincheira possui trechos com escoamento supercrítico, não foi possível fazer a simulação bidimensional com os mesmos parâmetros reais. Esta é uma deficiência do LBM.

Considerando as limitações do LBM, a proposta desta tese foi atendida, pois verificou-se a capacidade do LBM na simulação bidimensional de problemas com geometrias complexas, em particular, em canais com fundo inclinado e com chicanas submersas com aberturas laterais. Com a incorporação do operador de colisão MRT e a técnica LES, o modelo desenvolvido foi capaz de capturar as características do escoamento no canal de alimentação em trincheira. A simulação cumpriu as condições para a ocorrência da Piracema. Notou-se que, ao se aproximar da chicana, a profundidade da água aumenta. Em cima e na abertura da chicana a lâmina de água diminui e a velocidade aumenta. A profundidade da água logo depois da chicana é menor que antes da chicana e o LBM-MRT foi capaz de confirmar que as chicanas exercem o papel de reduzir a velocidade da água. A abordagem da turbulência e o operador de colisão MRT permitiram a diminuição do parâmetro de relaxamento e consequentemente, os resultados descrevem a situação física de forma mais realista. Sem esta implementação, utilizando o LBM-BGK, o valor mínimo alcançado para o parâmetro de relaxamento foi 1,5, enquanto que no LBM-MRT  $\tau = 1,0$ . A presença no código da rotina de estabilidade trouxe, juntamente com a consistência do método, a garantia da convergência da solução numérica.

# 10 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

#### 10.1 CONCLUSÃO

Os métodos numéricos são indispensáveis no estudo e previsão do comportamento de problemas reais. Em particular, o LBM apresenta-se como uma ferramenta potencial na simulação de escoamentos.

O operador de colisão BGK, presente na equação do reticulado de Boltzmann, é eficiente, porém, quando são avaliados problemas com geometrias complexas, o operador MRT torna-se mais adequado, por ser mais estável do que o BGK.

Aliada ao LBM-MRT, a abordagem da turbulência, por meio da técnica LES, permitiu simular o canal com chicanas submersas espalhadas alternadamente em relação às margens. O parâmetro de relaxamento turbulento ( $\tau_e$ ) atua na simulação, capturando informações em escalas menores do que a discretização da malha. Este processo faz com que o parâmetro de relaxamento total ( $\tau_t = \tau + \tau_e$ ) seja modificado nos pontos da malha, conforme a necessidade. Estas mudanças no valor de  $\tau_t$  ocorrrem com maior intensidade nos pontos onde a água forma turbilhões. A abordagem da turbulência e o operador de colisão MRT permitiram a diminuição do parâmetro de relaxamento e consequentemente, os resultados descrevem a situação física de forma mais realista. Sem esta implementação, utilizando o LBM-BGK, o valor mínimo alcançado para o parâmetro de relaxamento utilizado no canal de iniciação foi 1,5, enquanto que no LBM-MRT  $\tau=1,0$ . Para o canal de alimentação em trincheira, reduziu-se o parâmetro de relaxamento de 1,5 para 1,1

A incorporação da rotina de verificação da estabilidade numérica, ajudou na identificação dos trechos dos canais de iniciação e alimentação em trincheira, onde o escoamento é supercrítico. Como o modelo computacional, baseado no LBM, desenvolvido nesta tese não tem a capacidade de simular escoamentos supercrícitos, os parâmetros de simulação foram ajustados de forma a obter estabilidade numérica e a simulação considerou o escomento subcrítico. Até o momento, não há resgistros na literatura de simulações bidimensionais de escoamentos supercríticos, e portanto, esta é uma deficiência do LBM. Outra desvantagem é que, em algumas aplicações, os refinamentos espacial e temporal, tornan o processamento honeroso. Assim, indica-se uma análise detalhada do problema antes de simulá-lo por meio do LBM.

Como pontos positivos, destaca-se que o algorítmo é de simples implementação. Esta vantagem acorre principalmente pelo fato de que o LBM não faz discretização das equações governates e possui etapas bem definidas (transmissão e colisão). Outros pontos positivos referem-se a localidade das operações algébricas, possibilitando a paralelização do código e ao fato de que a função distribuição de partículas a valores reais, é definida por

meio de médias amostrais, característica que permitiu diminuir o ruído estatítico, presente no seu antecessor, o LGCA.

A partir das simulações realizadas nos capítulos 8 e 9, pode-se perceber que, para iniciar uma simulação no LBM, parte-se do condição (5.53) de estabilidade. Nesta condição, tem-se que a velocidade no reticulado deve ser maior do que a celeridade, ou seja,  $e > \sqrt{gh}$ . Os outros parâmetros,  $\Delta x$  e  $\Delta t$  são escolhidos de forma que a simulação retorne valores estáveis.

A proposta desta tese foi atendida, pois verificou-se a capacidade do LBM na simulação bidimensional de canais com fundo inclinado contendo chicanas submersas com e sem aberturas laterais. Esta verificação foi confirmada por meio do cálculo do erro relativo, que, exceto nos primeiros pontos da entrada dos canaais, é menor do que 0,01%. Este erro atende aos requisitos de precisão da maioria dos problemas em Engenharia Hidráulica. Com a incorporação do operador de colisão MRT e a técnica LES, o modelo desenvolvido foi capaz de capturar as características do escoamento no canal de alimentação em trincheira. A simulação cumpriu as condições para a ocorrência da Piracema. Notou-se que, ao se aproximar da chicana, a profundidade da água aumenta. Em cima e na abertura da chicana a lâmina de água diminui e a velocidade aumenta. A profundidade da água logo depois da chicana é menor que antes da chicana e o LBM-MRT foi capaz de confirmar que as chicanas exercem o papel de reduzir a velocidade da água. A presença no código da rotina de estabilidade trouxe, juntamente com a consistência do método, a garantia da convergência da solução numérica.

# 10.2 RECOMENDAÇÕES PARA PESQUISAS FUTURAS

Ao longo da pesquisa desta tese dificuldades surgiram, algumas foram ultrapassadas, porém outras requerem mais estudos. Neste sentido, destacam-se algumas indicações de pesquisas deixadas em aberto, sem comprometê-lo:

- Estender os estudos de caso realizados nas seções 9.1 e 9.2 considerando escoamento não-permanente. Deste modo, a vazão varia na entrada do canal e as condições de contorno deverão ser ajustadas;
- Extender os estudos de caso realizados nas seções 8.3, 9.1 e 9.2 substituindo a seção retangular do canal pela trapezoidal. Analisar as implicações desta mudança;
- Ampliar o estudo feito na seção 9.1 considerando o escoamento supercrítico. Neste estudo de caso, as chicanas estão localizadas de uma margem até a outra do canal de iniciação, e portanto, a simulação pode ser abordada de forma unidimensional. Neste sentido, pretende-se utilizar o reticulado D1Q3 assimétrico, e assim, simular o escoamento supercrítico;

- Ampliar o estudo feito na seção 9.2 considerando o escoamento supercrítico. No estudo de caso apresentado na seção 9.2, as chicanas estão posicionadas alternadamente em relação às margens. Uma abordagem numérica unidimensional não representa corretamente a geometria do canal. Portanto, deve-se considerar um reticulado bidimensioanl assimétrico para similar o escoamento supercrítico, permitindo a comparação dos resultados numéricos com os reais. O escoamento supercrítico em problemas bidimensionais, por meio do LMB, é assunto de interesse atual de diversos pesquisadores;
- Aplicar paralelização nos modelos desenvolvidos, tanto para o LBM-BGK como para o LBM-MRT, e comparar seus desempenhos.

## REFERÊNCIAS

- ALIM, U. R. The Lattice-Boltzmann Model for the Visual Simulation of Smoke. Dissertação (Mestrado) University of Rochester, 2001.
- AMARAL, F. R. d. Estudo do efeito aeroacústico de um selo localizado na cova do eslate. Dissertação (Mestrado) Universidade de São Paulo, São Carlos SP, 2015.
- ASLAN, E.; TAYMAZ, I.; BENIM, A. C. Investigation of the lattice boltzmann srt and mrt stability for lid driven cavity flow. *International Journal of Materials, Mechanics and Manufacturing*, v. 2, n. 4, p. 317–324, 2014.
- BAO, Y. B.; MESKAS, J. Lattice Boltzmann Method for Fluid Simulations. 2011.
- BARDOS, C.; UKAI, S. The classical incompressible navier-stokes limit of the boltzmann equations. *Math. Models Meth. Appl. Sci.*, v. 2, p. 235 257, 1991.
- BENZI, R.; SUCCI, S. Two-dimensional turbulence with the lattice boltzmann equation. *Journal of physics. A*, v. 23, 1990.
- BENZI, R.; SUCCI, S.; VERGASSOLA, M. The lattice boltzmann equation: Theory and applications. *Physics Reports*, v. 222, n. 3, p. 145 197, 1992.
- BERMUDEZ, A.; VAZQUEZ, M. E. Upwind methods for hyperbolic conservation laws with source terms. *Computers Fluids*, v. 23, n. 8, p. 1049 1071, 1994.
- BETTAIBI, S.; KUZNIK, F.; SEDIKI, E. Hybrid lattice boltzmann finite difference simulation of mixed convection flows in a lid-driven square cavity. *Physics Letters A*, v. 378, n. 32, p. 2429–2435, 2014.
- BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, v. 94, n. 3, p. 511 525, 1954.
- BOGO, R. L. Simulação do Tráfego de Veículos Usando Autômatos Celulares. Tese (Doutorado) Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brasil, abril 2015. 130 p.
- BUDINSKI, L. Mrt lattice boltzmann method for 2d flows in curvilinear coordinates. *Computers & Fluids*, v. 94, p. 288–301, 2014.
- CARGNELUTTI, J.; GALINA, V.; KAVISKI, E.; GRAMANI, L. M.; LOBEIRO, A. M. Simulation of the two-dimensional flow of the initiation channel of the itaipu hydroelectric power plant by the lattice boltzmann method. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, (to appear), 2017.
- CARGNELUTTI, J.; GALINA, V.; KAVISKI, E.; GRAMANI, L. M.; LOBEIRO, A. M. Two-dimensional numerical simulation of channel flow with submerged obstacles using the lattice boltzmann method. Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería, (to appear), 2017.

- CASULLI, V.; ZANOLLI, P. Semi-implicit numerical modeling of non-hydrostatic free-surface flows for environmental problems. *Mathematical and computer modelling*, v. 36, p. 1131 1149, 2002.
- CERCIGNANI, C. The Boltzmann Equation and Its Applications. Berlin: Springer, 1994. (Applied Mathematical Sciences, v.67).
- CHAUDHRY, M. H. Open-Channel Flow. New York, USA: Springer, 2008.
- CHEN, S.; CHEN, H. D.; MARTINEZ, D.; MATTHAEUS, W. Lattice boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Physical Review Letters*, v. 67, p. 3776 3779, 1991.
- CHEN, S.; DOOLEN, G. D. Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 30(1), p. 329–364, 1998.
- CHEN, X. A. A fully hydrodynamic model for three-dimensional, free-surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 43, p. 929 952, 2003.
- CHOPARD, B.; DROZ, M. Cellular Automata Modeling of Physical Systems. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- CHOPARD, B.; DUPUIS, A.; MASSELOT, A.; LUTHI, P. Cellular automata and lattice boltzmann techniques: An approach to model and simulate complex systems. *World Scientific Publishing Company*, v. 5, n. 2, p. 103 246, 2002.
- CHOPARD, B.; MASSELOT, A. Cellular automata and lattice boltzmann methods: a new approach to computational fluid dynamics and particle transport. *Future Generation Computer Systems*, v. 16, p. 249 257, 1999.
- CHOPARD, B.; PHAM, V. T.; LEFèVRE, L. Asymmetric lattice boltzmann model for shallow water flows. *Computers & Fluids*, v. 88, p. 225 231, 2013.
- DA SILVEIRA NETO, A.; MANSUR, S. S.; SILVESTRINI, J. H. Equações da turbulência: Média versus filtragem. In: *III Escola de Primavera: Transição e Turbulência*. Florianópolis, SC: [s.n.], 2002.
- DEWDNEY, A. K. A cellular universe of debris, droplets, defects and demons. *Scientific American*, v. 261, n. 2, p. 102 105, 1989.
- D'HUMIÈRES, D. Generalized lattice boltzmann equations. in rarefied gas dynamics: Theory and simulations, shizgal bd, weaver dp (eds). *Progress in Astronautics and Aeronautics.*, v. 159, n. 450-458, 1992.
- D'HUMIÈRES, D.; GINZBURG, I.; KRAFCZYK, M.; LALLEMAND, P.; LUO, S.-L. Multiple-relaxation-time lattice boltzmann models in three dimensions. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, v. 360, n. 1792, p. 437–451, 2002.
- DOTTORI, F.; TODINI, E. A. A 2d flood inundation model based on cellular automata approach. In: XVIII International Conference on Water Resources. Barcelona: [s.n.], 2010.
- FERRAS, L. J. L. Condições fronteira nas interfaces Descontinuidade no campo de velocidades. Dissertação (Mestrado) Universidade do Porto, Porto, 2007.

- FILIPPOVA, O.; SUCCI, S.; MAZZOCCO, F.; ARRIGHETTI, C.; BELLA, G.; HANEL, D. Multiscale lattice boltzmann schemes with turbulence modeling. *Journal of Computational Physics*, v. 170, p. 812 829, 2001.
- FRIEDRICH, M. F.; TERABE, F. R.; OTA, J. J.; SAKS, N. d. C. Levantamento de informações durante visitas a sistemas de transposição de peixes no brasil. In: XVII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos. São Paulo, SP. Brasil: [s.n.], 2007.
- FRISCH, U. Relation between the lattice boltzmann equation and the navier-stokes equations. Physica D, v. 47, p. 231 232, 1991.
- FRISCH, U.; D'HUMIÈRES, D.; HASSLACHER, B.; LALLEMAND P.AND POMEAU, Y.; RIVET, J. P. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems*, v. 1, p. 649 707, 1987.
- FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice gas cellular automata for the navier-stokes equations. *Physical Review Letters*, v. 56, n. 14, p. 1505 –1508, 1986.
- GALINA, V.; CARGNELUTTI, J.; KAVISKI, E.; GRAMANI, L. M.; LOBEIRO, A. M. Simulação de onda de maré por meio do método do reticulado de boltzmann. In: UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANá. *I Simpósio de Métodos Numéricos em Engenharia*. Curitiba Brasil, 2016.
- GALINA, V.; CARGNELUTTI, J.; KAVISKI, E.; GRAMANI, L. M.; LOBEIRO, A. M. Application of lattice boltzmann method for surface runoff in watershed. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, (to appear), 2017.
- GINZBURG, I. Equilibrium-type and link-type lattice boltzmann models for generic advection and anisotropic-dispersion equation. *Advances in Water Resources*, v. 28, p. 1171–1195, 2005.
- GOKALTUN, S.; DULIKRAVICH, G. S. Lattice boltzmann method for rarefied channel flows with heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 78, p. 796 804, 2014.
- GOLBERT, D. R. Modelos de Lattice-Boltzmann Aplicados à Simulação Computacional do Escoamento de Fluidos Incompressíveis. Dissertação (Mestrado) Laboratório Nacional de Computação Científica, Rio de Janeiro, 2009.
- GOLBERT, D. R. Método de lattice Boltzmann em hemodinâmica computacional: interações fluido-estrutura e modelos acoplados 1D-3D. Tese (Doutorado) Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, RJ Brasil, Abril 2013.
- GOLBERT, D. R.; BLANCO, P. J.; FEIJóO, R. A. Tuning a lattice-boltzmann model for applications in computational hemodynamics. *Medical Engineering & Physics*, v. 34, p. 339–349, 2012.
- HARDY, J.; PAZZIS, O. d.; POMEAU. Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions. *Physical Review A*, v. 13, p. 1949 1961, 1976.
- HE, X.; LUO, L. Lattice boltzmann model for the incompressible navier-stokes equation. J. Stat. Phys., v. 88, n. 1, p. 927 – 944, 1997b.

- HE, X.; LUO, L. S. A priori derivation of the lattice boltzmann equation. *Physical Review* E, v. 55, n. 6, p. 6333 6336, 1997.
- HENDERSON, F. M. Open Channel Flow. New York: Macmillan, 1966.
- HIGUERA, F. J.; JIMÉNEZ, J. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *EPL* (Europhysics Letters), v. 9, n. 7, p. 663 668, 1989.
- HOU, S.; STERLING, J.; CHEN, S.; DOOLEN, G. D. A lattice boltzmann subgrid model for high reynolds number flows. *Fields Institute Communications*, v. 6, p. 151–166, 1996.
- HOU, S.; ZOU, Q.; CHEN, S.; DOOLEN, G.; COGLEY, A. C. Simulation of cavity flow by the lattice boltzmann method. *J. Comput. Phys.*, v. 118, p. 329 347, 1995.
- ILIO, G. D.; CHIAPPINI, D.; UBERTINI, S.; BELLA, G.; SUCCI, S. Hybrid lattice boltzmann method on overlapping grids. *Physical Review E*, v. 95, n. 1, p. 013309, 2017.
- JANBEN, C. F.; GRILLI, S. T.; KRAFCZYK, M. Efficient simulations of long wave propagation and runup using a lbm approach on gpgpu hardware. In: *Proceedings of the Twenty-second International Offshore and Polar Engineering Conference*. Rodes, Grécia: [s.n.], 2012. p. 17 22.
- JANELA, J.; SEQUEIRA, A.; PONTRELLI G. SUCCI, S.; UBERTINI, S. Unstructured lattice boltzmann method for hemodynamic flows with shear-dependent viscosity. *International Journal of Modern Physics C*, v. 21, n. 6, p. 795–811, 2010.
- JANKOWSKI, J. A. A non-hydrostatic model for free surface Flows. Tese (Doutorado) Hannover University, Germany, 1999.
- JORNAL DE ITAIPU ELETRôNICO. Piracema: restrição à pesca de espécies nativas começa no domingo. 2015. Disponível em: <a href="http://jie.itaipu.gov.br">http://jie.itaipu.gov.br</a>.
- JUDICE, S. F. P. P. Animação de fluido via modelos do tipo lattice gás e lattice Boltzmann. Dissertação (Mestrado) Laboratório Naciaonal de Computação Científica, Petrópolis, RJ, Agosto 2009.
- KARI, J. Theory of cellular automata: a survey. Theoretical Computer Science, v. 334, p. 3-33, 2005.
- KREMER, G. M. *Uma Introdução à Equação de Boltzmann*. São Paulo: Universidade de São Paulo, 2005.
- KUTAY, M. E.; AYDILEK, A. H.; MASAD, E. Laboratory validation of lattice boltzmann method for modeling pore-scale flow in granular materials. *Computer and Geotechnics*, v. 33, p. 381 395, 2006.
- LA ROCCA, M.; ADDUCE, C.; SCIORTINO, G. Development of a lattice boltzmann method for two-layered shallow-water flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 70, p. 1048–1072, 2012.
- LA ROCCA, M.; MONTESSORI, A.; PRESTININZI, P.; SUCCI, S. A multispeed discrete boltzmann model for transcritical 2d shallow water flows. *Journal of Computational Physics*,, v. 284, p. 117 132, 2015.

- LAI, W. M.; RUBIN, D.; KREMPL, E. An introduction to continuum mechanics. Oxford: Pergamon Press, 1993.
- LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Theory of the lattice boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, v. 61, p. 6546–6562, 2000.
- LEGRAS, B.; SANTANGELO, P.; BENZI. High-resolution numerical experiments for forced two-dimensional turbulence. *Europhysics Letters*, 1988.
- LI, S.; HUANG, P.; LI. A modified lattice boltzmann model for shallow water flows over complex topography. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 77, p. 441 458, 2015.
- LI, Y.; HUANG, P. A coupled lattice boltzmann model for advection and anisotropic dispersion problem in shallow water. *Advances in Water Resources*, v. 31, p. 1719–1730, 2008.
- LIU, H. Lattice Boltzmann Simulations for Complex Shallow Water Flows. Tese (Doutorado) University of Liverpool, Liverpool, Inglaterra, 2009.
- LIU, H.; LI, M.; SHU, A. Large eddy simulation of turbulent shallow water flows using multi-relaxation-time lattice boltzmann model. *international journal for numerical methods in fluids*, v. 70, p. 1573–1589, 2012.
- LIU, H.; WANG, H.; LIU, S.; HU, C.; DING, Y.; ZHANG, J. Lattice boltzmann method for the saint-venant equations. *Journal of Hydrology*, v. 524, p. 411 416, 2015.
- LIU, H.; ZHOU. Lattice boltzmann approach to simulating a wetting-drying front in shallow flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 743, p. 32–59, 2014.
- LIU, H.; ZHOU, J. G.; BURROWS, R. Numerical modeling of turbulent compound channel flow using the lattice boltzmann method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 59(7), p. 753 765, 2009.
- LIU, H.; ZHOU, J. G.; BURROWS, R. Lattice boltzmann simulations of the transient shallow water flows. *Advances in Water Resources*, v. 33, p. 387–396, 2010.
- LIU, N. The numerical simulation of one-dimensional overland flow by lattice boltzmann method. In: 5th International Conference on Advanced Design and Manufacturing Engineering. China: [s.n.], 2015.
- LUO, L.-s. The lattice-gas and lattice Boltzmann methods: past, present, and future. 2000.
- MACHADO, R. On the generalized hermite-based lattice boltzmann construction, lattice sets, weights, moments, distribution functions and high-order models. Frontiers of Physics, v. 9, n. 4, p. 490 510, 2014.
- MAKRAKIS, S. O canal da Piracema como sistema de transposição. Tese (Doutorado) Universidade Estadual de Maringá, Maringá, PR. Brasil, 2007.
- MCNAMARA, G.; ALDER, B. Analysis of the lattice boltzmann treatment of hydrodynamics. *Physica A*, v. 194, p. 218 228, 1993.

- MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 20, p. 2332 2335, 1988.
- MELOTTI, G. Aplicação de Autômatos Celulares em Sistemas Complexos: Um Estudo de Caso em Espalhamento de Epidemias. Dissertação (Mestrado) Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil, fevereiro 2009.
- MOHAMAD, A. A. Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes. [S.l.]: Springer, 2011.
- MULLER, I. I.; GIBERTONI, R. C. Projeto HG-169: Estudos computacionais do comportamento hidráulico dos canais do complexo do parque da barragem e do rio Bela Vista. LACTEC CEHPAR, Curitiba, PR, 2002.
- NAMIN, M. M.; LIN, B.; FALCONER, R. A. An implicit numerical algorithm for solving non-hydrostatic free-surface flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 35(3), p. 341 356, 2001.
- OLIVEIRA, D. S. Aproximação tempo de relação: Modelos alternativos em teoria cinética clássica. Dissertação (Mestrado) Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.
- PAULA, M. D. *Parque da Barragem*. Rio de Janeiro, RJ: [s.n.], 1998. Revista ECO21. Edição 33. Disponível em: <a href="http://www.eco21.com.br/textos/textos.asp?ID=971">http://www.eco21.com.br/textos/textos.asp?ID=971</a>.
- PELLICCIONI, O.; CERROLAZA, M.; HERRERA, M. Análisis tridimensional de la interacción fluido-estructura en una válvula cardíaca mecánica doble hoja utilizando la ecuación generalizada de lattice boltzmann. Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería, v. 22, n. 4, p. 377–392, 2006.
- PENG, Y. Lattice Boltzmann Simulations of Environmental Flow Problems in Shallow Water Flows. Tese (Doutorado) University of Liverpool, liverpool, Inglaterra, 2012.
- PENG, Y.; ZHANG, J. M.; ZHOU, J. G. Lattice boltzmann model using two relaxation times for shallow-water equations. *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 142, n. 2, 2016.
- PENG, Y.; ZHOU, J. G.; BURROWS, R. Modelling solute transport in shallow water with the lattice boltzmann method. *Computers & Fluids*, v. 50, p. 181–188, 2011.
- PENG, Y.; ZHOU, J. G.; ZHANG, J. M.; BURROWS, R. modeling moving boundary in shallow water by lbm. *International Journal of Modern Physics C*, v. 24, n. 1, 2013.
- PENG, Y.; ZHOU, J. G.; ZHANG, J. M.; LIU, H. Lattice boltzmann modeling of shallow water flows over discontinuous beds. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 75, p. 608–619, 2014.
- PHILIPPI, P. C.; HEGELE, L. A.; SANTOS, L. dos; SURMAS, R. From the continuous to the lattice boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. *Physical Review E*, v. 73, n. 5, parte 2, 2006.
- PIOMELLI, U. Large-eddy simulation: Achievements and challanges. *Progress in Aerospace Sciences*, v. 35, p. 335–362, 1999.
- PORTO, R. M. Hidráulica Básica. 4. ed. São Carlos: EESC-USP, 2006.

- PRESTININZI, P.; MONTESSORI, A.; LA ROCCA, M.; SCIORTINO, G. Simulation of arrested salt wedges with a multi-layer shallow water lattice boltzmann model. *Advances in Water Resources*, v. 96, p. 282–289, 2016.
- QIAN, Y. H.; D'HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P. Lattice bgk models for navier-stokes equation. *Europhysics Letters*, v. 17, n. 6, p. 479 484, 1992.
- ROSIS, A. D. A central moments-based lattice boltzmann scheme for shallow water equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 319, p. 379–392, 2017.
- ROTHMAN, D. H. Lattice-Gas Cellular Automata: Simple Models of Complex Hydrodynamics. [S.l.]: Cambridge University Press, 2004.
- ROTHMAN, D. H.; ZALESKI, S. Lattice-gas models of phase separation: interfaces, phase transitions and multiphase flow. *Review of Modern Physics*, v. 66, p. 1417 1479, 1994.
- SKORDOS, P. A. Initial and boundary conditions for the lattice boltzmann method. *Physical Revied E*, v. 48, p. 4823 4842, 1993.
- STANSBY, P. K.; ZHOU, J. G. Shallow-water solver with non-hydrostatic pressure: 2d vertical plane problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 28(3), p. 541 563, 1998.
- STELLING, G.; ZIJLEMA, M. An accurate and afficient finite difference algorithm for non-hydrostatic free-surface flow with application to wave propagation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 43(1), p. 1-23, 2003.
- STERLING, J.; CHEN, S. Stability analysis of lattice boltzmann methods. *Journal of Computational Physics*, v. 123(1), p. 196 206, 1996.
- SUCCI, S. The Lattice Boltzmann Equation for Dynamics and Beyond. New York: Oxford University Press Inc., 2001.
- SUKOP, M. C.; THORNE-JR., D. T. Lattice Boltzmann ModModel: An introduction for geoscientists and engineers. Berlin: Springer, 2006.
- SURMAS, R. Simulação de fenômenos termo-fluidodinâmicos pelo emprego do método de diferenças finitas a solução da equação de Boltzmann. Tese (Doutorado) Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC., 2010.
- SZYMKIEWICZ, R. Numerical Modelin in Open Channel Hydraulics. London, New York: Springer, 2010.
- TEIXEIRA, C. M. Incorporating turbulence models into the lattice-boltzmann method. *International Journal of Modern Physics C*, v. 9, n. 8, p. 1159 1175, 1998.
- THANG, P. van; CHOPARD, B.; LEFèVRE, L.; ONDO, D. A.; MENDES, E. Study of the 1d lattice boltzmann shallow water equation and its coupling to build a canal network. *Journal of Computational Physics*, v. 229, n. 19, p. 7373–7400, 2010.
- THÖMMES, G.; SEAïD, M.; BANDA, M. K. Lattice boltzmann methods for shallow water flow applications. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 55, n. 7, p. 673–692, 2007.

- TOSSOU, E. E. Extension of the 2DH Saint-Venant Hydrodynamic Model for Flows with Vertical Acceleration. Tese (Doutorado) Laval University, Quebec, Canada, 2009.
- TUBBS, K. Lattice Boltzmann Modeling for Shallow Water Equations Using High Performance Computing. Tese (Doutorado) — Louisiana State University, Luisiana, Estados Unidos, 2010.
- TUCCI, C. E. M. *Modelos Hidrológicos*. Porto Alegre, RS Brasil: Editora da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1998.
- TUTAL, M.; HOLDO, A. E. Computational modelling of flow around a circular cylinder in sub-critical flow regime with various turbulence models. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 35, p. 763–784, 2001.
- WALSH, P. Lattice boltzmann model. Janeiro 2003.
- WEI, X.; LI, W.; MUELLER, K.; KAUFMAN, A. E. The lattice boltzmann method for gaseous phenomena. In: *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*. [S.l.: s.n.], 2004. v. 10, n. 2, p. 164 176.
- WOLF, F. G. Modelagem da Interação Fluido-sólido para Simulação de Molhabilidade e Capilaridade Usando o Modelo Lattice-Boltzmann. Tese (Doutorado) Universidade Federal do Santa Catarina, Florianópolis, SC Brasil, 2006.
- WOLF-GLADROW, D. A. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models An Introduction. Berlin: [s.n.], 2005.
- WOLFRAM, S. Statistical mechanics of cellular automata. Reviews of Modern Physics, v. 55, n. 3, p. 601–644, 1983.
- WOLFRAM, S. Cellular automaton fluids 1 basic theory. J. Stat. Phys.,, v. 45, n. 3 e 4, p. 471 526, 1986.
- WOLFRAM, S. Cellular Automata and Complexity: Collected Papers. 1994. Disponível em: <a href="http://www.stephenwolfram.com/publications/books/ca-reprint/">http://www.stephenwolfram.com/publications/books/ca-reprint/</a>.
- WYLIE, B. J. N. Application of Two-Dimensional Cellular Automaton Lattice-Gas Models to the Simulation of Hydrodynamics. Tese (Doutorado) University of Edinburgh, 1990.
- YULISTIYANTO, B. Flow around a cylinder installed in a fixed-bed open channel. Tese (Doutorado) École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, 1997.
- ZARITA, R.; HACHEMI, M. Microchannel fluid flow and heat transfer by lattice boltzmann method. In: 4th Micro and Nano Flows Conference. Londres, Inglaterra: [s.n.], 2014.
- ZERGANI, S.; AZIZ, Z. A.; VISWANATHAN, K. K. A shallow water model for the propagation of tsunami via lattice boltzmann method. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, v. 23, n. 1, p. 012007, 2015.
- ZHANG, C.-z.; Y.-G., C.; WU, J.-Y.; DIAO, W. Lattice boltzmann simulation of the open channel flow connecting two cascaded hydropower stations. *Journal of Hydrodynamics*, v. 28, n. 3, p. 400–410, 2016.

- ZHANG, J.; LIU, Y.; ZHANG, J.; YANG, J. Study of force-dependent and time-dependent transition of secondary flow in a rotating straight channel by the lattice boltzmann method. *Physica A*, v. 338, p. 288 294, 2009.
- ZHANG, X.; FENG, J.; YANG, T. Lattice boltzmann method for overland flow studies and its experimental validation. *Journal of Hydraulic Research*, v. 53, n. 5, p. 561–575, 2015.
- ZHAO, Z.; HUANG, P.; LI, Y.; LI, J. A lattice boltzmann method for viscous free surface waves in two dimensions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 71, p. 223 248, 2013.
- ZHAO, Z.-m.; HUANG, P.; LI, S.-t. Lattice boltzmann model for shallow water in curvilinear coordinate grid. *Journal of Hydrodynamics*, v. 29, n. 2, p. 251–260, 2017.
- ZHONG, L.; FENG, S.; GAO, S. Wind-driven ocean circulation in shallow water lattice boltzmann model. *Advances in Atmospheric Sciences*, v. 22, p. 349–358, 2005.
- ZHOU, J. G. An elastic-collision scheme for lattice boltzmann methods. *International Journal of Modern Physics*, v. 12(3), p. 387 401, 2001.
- ZHOU, J. G. A lattice boltzmann model for the shallow water equations. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 191, p. 3527 3539, 2002.
- ZHOU, J. G. A lattice boltzmann model for the shallow water equations with turbulence modelling. *International Journal of Modern Physics C*, v. 13, p. 1135–1150, 2002.
- ZHOU, J. G. Lattice Boltzmann Method for Shallow Water Flows. New York: Springer, 2004.
- ZHOU, J. G. Enhancement of the labswe for shallow water flows. *Journal of Computational Physics*, v. 230, p. 394–401, 2011.
- ZHOU, J. G.; LIU, H. Determination of bed elevation in the enhanced lattice boltzmann method for the shallow-water equations. *Physical Review E*, v. 88, p. 023302, 2013.
- ZHOU, J. G.; LIU, H.; SHAFIAI, S.; PENG, Y.; BURROWS, R. Lattice boltzmann method for open-channel flows. *Engineering and Computational Mechanics*, v. 163, p. 243 249, 2010.
- ZOU, Q.; HE, X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. *Physics of Fluids*, v. 9(6), p. 1591 1598, 1997.

# **GLOSSÁRIO**

COMPRIMENTO DE MISTURA DE PRANDTL: O físico alemão Prandtl (1875-1953) propôs que o processo turbulento poderia ser visto como um transporte aleatório de "blocos" de partículas fludias de uma região que apresentam uma certa velocidade para uma outra região com velocidade diferente. A distância deste transporte foi denominada comprimento de mistura L.

CONDIÇÕES CINEMÁTICAS: A condição de fronteira cinemática impõe que sua derivada material seja nula. Fisicamente, esta condição requer que a superfície se mova com o fluido, de modo a sempre conter a mesmas particulas dele.

**EXPANSÃO CHAPMAN-ENSKOG:** Esta expansão baseia-se fundamentalmente em dividir os fenomenos difusivos e convectivos nas respectivas escalas de tempo, e agrupar os termos separadamente.

EXPANSÃO MULTIESCALA: Para relacionar a equação do reticulado de Boltzmann com alguma equação diferencial parcial é necessário separar formalmente escalas de tempo diferentes. Desta forma os fenômenos físicos que acontecem nas diferentes escalas são discutidos separadamente, contribuindo individualmente para as equações de movimento finais.

INVARIÂNCIA GALILEANA: Denomina-se invariância Galileana o princípio de relatividade segundo o qual as leis fundamentais da Física são as mesmas em todos os sistemas de referência inerciais, isto é, a forma das equações físicas não podem depender do estado de movimento de um observador, uma vez que o movimento é relativo.

FORÇA DE CORPO: É uma força que atua no volume de um corpo. Na mecânica dos fluidos forças de volume são uma parte das equações de Navier-Stokes, descrevendo a influência de forças externas.

FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO DE MAXWELL-BOLTZMANN: Ela mostra como as velocidades das moléculas são distribuídas para um gás ideal.

MAGNETO-HIDRODINÂMICA: É o estudo das equações hidrodinâmicas em fluidos condutores, em particular, em plasmas. Entre os principais interesses em MHD está o estudo do equilíbrio do fluido, transporte de partícula e energia, e a interação de baixa frequência de campos eletromagnéticos com o fluido condutor.

MODELAGEM E ALGORITMO MULTIESCALA: A modelagem multi-escala refere-se a um estilo de modelagem em que múltiplos modelos, em diferentes escalas, são usados simultaneamente para descrever um sistema. Os diferentes modelos geralmente se concentram em diferentes escalas de resolução, por exemplo, como a Mecânica Contínua e Dinâmica Molecular. Os algoritmos multi-escala permitem usar ideias multi-escala para

projetar algoritmos computacionais.

**NÚMERO DE FROUDE**: Representa razão entre velocidade das partículas e velocidade das ondas. O Número de Froude desempenha importante papel no estudo dos canais, permitindo definir os regimes de escoamento (Subcrítico, Supercrítico e Crítico).

**NÚMERO DE KNUDSEN**: É uma medida adimensional definido como a razão entre o comprimento do caminho livre médio molecular e uma escala de comprimento fisicamente representativa.

**NÚMERO DE MACH**: É uma unidade de medida de velocidade, definido como a relação entre a velocidade do objeto e a velocidade do som.

**NÚMERO DE PRANDTL**: É um número adimensional que aproxima a razão de difusividade de momento (viscosidade cinemática) e difusividade térmica de um fluido, expressando a relação entre a difusão de quantidade de movimento e a difusão de quantidade de calor dentro do próprio fluido.

**NÚMERO DE REYNOLDS**: O coeficiente, número ou módulo de Reynolds é um número adimensional usado em Mecânica dos Fluidos para o cálculo do regime de escoamento de determinado fluido sobre uma superfície.

TEOREMA-H: Em 1872 Boltzmann mostrou que a quantidade

$$H(t) = \int d^3v \, d^3x f(\vec{x}, \, \vec{v}, \, t) \, \ln f(\vec{x}, \, \vec{v}, \, t) \,, \qquad (10.1)$$

onde  $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$  é qualquer função que satisfaz a equação de Boltzmann, que cumpre a seguinte restrição,

$$\frac{dH}{dt} \le 0,\tag{10.2}$$

e o sinal de igual se aplica somente se f é uma distribuição de maxwell.

TRANSFORMAÇÃO GALILEANA: As transformações de Galileu são utilizadas na comparação de fenomenos que ocorrem em referênciais inerciais distintos, dentro da Física Newtoniana ou Mecânica Clássica. Assim, conhecendo-se o estado de movimento num dado sistema de coordenadas, ao aplicarem-se as equações das transformações de Galileu, é possível expressar-se o estado desse movimento usando como referência outro sistema inercial.

TURBULÊNCIA HOMOGÊNIA: Quando a turbulência apresenta qualitativamente a mesma estrutura em todas as partes do escoamento, é denominada turbulência homogênea.

**VORTICIDADE**: É uma grandeza física empregada em mecânica de fluidos e no mundo meteorológico para quantificar a rotação das partículas de um fluido em movimento.

## APÊNDICE A - SUB-ROTINAS

Sub-rotina que verifica a estabilidade no método computacional desenvolvido:

```
1 subroutine stability
3 integer :: i, j
  real :: ujuj, e, ee
  e = dx/dt
7 | ee = e*e
9 \mid do j = 0, ny
  do i = 0, nx
11 | ujuj = u(i,j)*u(i,j) + v(i,j)*v(i,j)
  if (ujuj/ee >= 1.0 \text{ or. } ujuj/(g*h(i,j)) >= 1 \text{ or. } g*h(i,j)/ee >= 1) \text{ then}
13 print *, 'Instabilidade!'
  print*
15 print*, 'iteracao, x, y : ', time, i*dx, j*dy
  print *, 'ujuj/ee = ', ujuj/ee
|print*, 'ujuj/(g*h(x,y))| = ', ujuj/(g*h(i,j))
  print*, 'g*h(x,y)/ee = ', g*h(i,j)/ee
19 print*
  print*, \ \ 'h(i,j)\,, \ u(i,j)\,, \ v(i,j)\,, \ ujuj\,, \ ee \ : \ ', \ h(i,j)\,, \ u(i,j)\,, \ v(i,j)\,, \ ujuj
      , ee
21 | print *
  print*, 'Tecle para continuar ou encerre programa.'
23 read (*,*)
  end if
25 end do
  end do
2.7
  end subroutine stability
```

Sub-rotina que apresenta a colisão para o LBM-MRT:

```
11 s (7:8)
                        = 1.0 \, d0 / tau
     s(0)
                         = 1.0 d0
13 | s (1)
                         = 1.0 d0
     s(2)
                         = 1.0 d0
|s| (3:5:2) = 1.0 d0
     s(4:6:2) = 1.0 d0
17
     do j = 0, ny
19 | do i = 0, nx
     m(0) = f(0,i,j)+f(1,i,j)+f(2,i,j)+f(3,i,j)+f(4,i,j)+f(5,i,j)+f(6,i,j)+f(7,i,j)
             , j)+f(8, i, j)
21 | m(1) = -4.0 d0 * f(0, i, j) - f(1, i, j) + 2.0 d0 * f(2, i, j) - f(3, i, j) + 2.0 d0 * f(4, i, j) - f(5, i, j) + 2.0 d0 * f(4, i, j) - f(5, i, j) + 2.0 d0 * f(4, i, j) - f(5, i, j) + 2.0 d0 * f(6, i, j) + 2.0 d0 *
             i, j) + 2.0 d0 * f(6, i, j) - f(7, i, j) + 2.0 d0 * f(8, i, j)
     m(2) = 4.0 d0 * f(0,i,j) - 2.0 d0 * f(1,i,j) + f(2,i,j) - 2.0 d0 * f(3,i,j) + f(4,i,j) - 2.0 d0
             *f(5,i,j)+f(6,i,j)-2.0d0*f(7,i,j)+f(8,i,j)
23|\mathbf{m}(3)| = f(1,i,j) + f(2,i,j) - f(4,i,j) - f(5,i,j) - f(6,i,j) + f(8,i,j)
     m(4) = -2.0 d0 * f(1, i, j) + f(2, i, j) - f(4, i, j) + 2.0 d0 * f(5, i, j) - f(6, i, j) + f(8, i, j)
25|m(5)| = f(2,i,j) + f(3,i,j) + f(4,i,j) - f(6,i,j) - f(7,i,j) - f(8,i,j)
     m(6) = f(2,i,j) - 2.0d0 * f(3,i,j) + f(4,i,j) - f(6,i,j) + 2.0d0 * f(7,i,j) - f(8,i,j)
27|m(7) = f(1,i,j)-f(3,i,j)+f(5,i,j)-f(7,i,j)
    m(8) = f(2,i,j)-f(4,i,j)+f(6,i,j)-f(8,i,j)
29
     !atualiza tau total
31 \mid tau_t = tau_eff(i,j)
     s(7:8) = 1.0 d0/tau_t
33
     do a = 0, 8
35|m(a)| = m(a) - s(a)*(m(a) - meq(a,i,j))
     end do
37
     fColl(0,i,j) = (1.0d0/9) * m(0) - (1.0d0/9) * m(1) + (1.0d0/9) * m(2)
39 \mid fColl(1,i,j) = (1.0d0/9) * m(0) - (1.0d0/36) * m(1) - (1.0d0/18) * m(2) + (1.0d0/6) *
              m(3) - (1.0 d0/6) * m(4) + (1.0 d0/4) * m(7)
     fColl(2, i, j) = (1.0 d0/9) * m(0) + (1.0 d0/18) * m(1) + (1.0 d0/36) * m(2) + (1.0 d0/6) *
              m(3) + (1.0 d0/12) * m(4) + (1.0 d0/6) * m(5) + &
41 \left( 1.0 \, d0 / 12 \right) * m(6) + (1.0 \, d0 / 4) * m(8)
     fColl(3, i, j) = (1.0 d0/9) * m(0) - (1.0 d0/36) * m(1) - (1.0 d0/18) * m(2) + (1.0 d0/6) *
              m(5) - (1.0 d0/6) * m(6) - (1.0 d0/4) * m(7)
43 | fColl(4,i,j) = (1.0 d0/9) * m(0) + (1.0 d0/18) * m(1) + (1.0 d0/36) * m(2) - (1.0 d0/6) *
              m(3) - (1.0d0/12) * m(4) + (1.0d0/6) * m(5) + &
     (1.0 d0/12) * m(6) - (1.0 d0/4) * m(8)
45 | fColl(5,i,j) = (1.0d0/9) * m(0) - (1.0d0/36) * m(1) - (1.0d0/18) * m(2) - (1.0d0/6) *
              m(3) + (1.0 d0/6) * m(4) + (1.0 d0/4) * m(7)
     fColl(6, i, j) = (1.0 d0/9) * m(0) + (1.0 d0/18) * m(1) + (1.0 d0/36) * m(2) - (1.0 d0/6) *
              m(3) - (1.0 d0/12) * m(4) - (1.0 d0/6) * m(5) - &
47 \left[ (1.0 \, d0 / 12) * m(6) + (1.0 \, d0 / 4) * m(8) \right]
     fColl(7, i, j) = (1.0 d0/9) * m(0) - (1.0 d0/36) * m(1) - (1.0 d0/18) * m(2) - (1.0 d0/6) *
```

# Sub-rotina que apresenta o processo de transmissão no LBM-MRT:

```
1 subroutine stream_mrt(f,fColl)
3 double precision, intent(inout) :: f(0:8,0:nx,0:ny)
  double precision, intent(in) :: fColl(0:8,0:nx,0:ny)
                                      :: i,j,indxf,indyf,indxb,indyb
5 integer
  double precision
                             :: e
  e = dx/dt
9
  do j = 0, ny
|11| \operatorname{indyf} = j + 1
  indyb = j - 1
13
  do i = 0, nx
|15| \operatorname{indxf} = i + 1
  indxb = i - 1
17
  ! Following 4 lines Implement periodic BCs
19 if (indxf > nx) indxf = 0
  if (indxb < 0) indxb = nx
21 if (indyf > ny) indyf = 0
  if (indyb < 0) indyb = ny
23
  f(0, i, j)
                = fColl(0,i,j) + (dt/(6.0d0*e*e)) * (ex(0)*force_x(0,i,j)+ey
      (0)*force_y(0,i,j)
25 | f(1, indxf, j)| = fColl(1, i, j) + (dt/(6.0d0*e*e)) * (ex(1)*force_x(1, i, j)+ey
      (1)*force_y(1,i,j)
  f(2, indxf, indyf) = fColl(2, i, j) + (dt/(6.0d0*e*e)) * (ex(2)*force_x(2, i, j)+
      \operatorname{ey}(2) * \operatorname{force}_{y}(2, i, j)
27 | f(3,i,indyf) = fColl(3,i,j) + (dt/(6.0d0*e*e)) * (ex(3)*force_x(3,i,j)+ey
      (3)*force_y(3,i,j)
  f(4, indxb, indyf) = fColl(4, i, j) + (dt/(6.0d0*e*e)) * (ex(4)*force_x(4, i, j)+
      ey(4)*force_y(4,i,j)
29 | f(5, indxb, j)| = fColl(5, i, j) + (dt/(6.0d0*e*e)) * (ex(5)*force_x(5, i, j)+ey
      (5)*force_y(5,i,j)
  f(6, indxb, indyb) = fColl(6, i, j) + (dt/(6.0d0*e*e)) * (ex(6)*force_x(6, i, j)+
      ey(6)*force_y(6,i,j))
```

## APÊNDICE B - OUTROS RETICULADOS SIMÉTRICOS

#### B.1 TIPOS DE RETICULADOS

Além do reticulado D2Q9 que foi apresentado na seção 5.1.2, serão apresentados outros reticulados mais usados.

O reticulado fornece as possíveis direções de movimento das partículas no método do reticulado de Boltzmann. Inicialmente os reticulados apresentados foram definidos em duas e três dimensões. Somente mais tarde foram apresentados reticulados unidimensionais (WEI et al., 2004).

Estas famílias de reticulados foram classificadas pela dimensão e pelo número de velocidades DXQY, onde X representa a dimensão e Y a quantidade de velocidades do reticulado (possibilidades de movimento para as partículas).

# B.1.1 Reticulado HPP/D2Q5

O primeiro modelo de reticulado foi proposto por Hardy, Pazzis e Pomeau (1976), com a finalidade de simulação de escoamentos de fluidos, baseado em uma rede quadrada com quatro possibilidades de movimento (direções cardeais). As direções possíveis do movimento de cada partícula são,

$$\begin{cases}
\vec{e_0} = e \ (0,0), \\
\vec{e_1} = e \ (1,0), \\
\vec{e_2} = e \ (0,1), \\
\vec{e_3} = e \ (-1,0), \\
\vec{e_4} = e \ (0,-1).
\end{cases}$$
(B.1)

O modelo é bidimensional com velocidades e posições discretas, ou seja, uma partícula em um determinado nó salta para um nó adjacente mais próximo em uma das quatro direções do reticulado. Se houver outra partícula chegando no mesmo nó, no mesmo passo de tempo, ocorre a colisão de forma que o número total de partículas e o momento total são conservados. Este modelo é o chamado HPP (Handy, Pomeau e De Pazzis). Utilizando a notação DnQm, este reticulado também é denominado por D2Q5. O número 5 representa o total de velocidades (quatro não-nulas e uma nula), ou seja, quatro direções de deslocamento e uma posição estática.

Como o reticulado é quadrado somente com direções cardeais, a distância percorrida por uma partícula em qualquer uma das quatro direções, é a mesma. Devido à sua anisotropia (a estrutura dos gases não é isotrópica, pois o modelo não garante invariância rotacional), o modelo HPP não representa de forma precisa o comportamento de um gás, como sua difusão (WEI et al., 2004).

# B.1.2 Reticulado FHP/D2Q7

Ratificando a importância dos modelos baseados em autômatos celulares do tipo gás de rede e pensando em resolver os problemas do modelo HPP, dez anos depois Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986) descobriram as simetrias que permitem recuperar corretamente as equações de Navier-Stokes. Com base em uma estrutura hexagonal de seis velocidades, o novo modelo proposto é chamado de FHP (Frisch, Hasslacher e Pomeau).

Assim como o seu antecessor, o reticulado FHP é bidimensional. Utilizando a notação DnQm, este reticulado também é denominado por D2Q7. O número 7 representa o total de velocidades (seis não-nulas e uma nula). Como o reticulado é hexagonal, a distância percorrida por uma partícula em qualquer uma das seis direções, é a mesma.

As direções do movimento das partículas são dadas por Alim (2001),

$$\begin{cases}
\vec{e_0} = (0,0), \\
\vec{e_\alpha} = e \left(\cos\frac{2\pi i}{6}, sen\frac{2\pi i}{6}\right) & \alpha = 1, ..., 6.
\end{cases}$$
(B.2)

Os modelos de reticulados D2Q5 e D2Q7 foram apresentados geometricamente na seção (4.2), ver Figuras 4 e 5, respectivamente.

Nos modelos de reticulados tridimensionais, também é necessário que a geometria seja simétrica. Considera-se quatro tipos de sub-reticulados e a combinação deles pode gerar diferentes modelos bidimensionais ou tridimensionais. Tem-se aqui quatro módulos de velocidades distintas: velocidade nula, vizinhos mais próximos, segundos vizinhos mais próximos e os nós vizinhos mais distantes (ALIM, 2001).

- 1. **Sub-reticulado 0**: Este sub-reticulado consiste somente da posição (0,0,0), ou seja, é a possibilidade que uma partícula tem de permanecer na mesma posição durante um passo de tempo;
- 2. **Sub-reticulado 1**: Neste sub-reticulado as partículas tem seis possibilidades de direções e trata-se dos seis vizinhos mais próximos. São eles: (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1), (-1,0,0), (0,-1,0), (0,0,-1);
- 3. Sub-reticulado 2: As doze possibilidades de direções de uma partícula neste sub-reticulado são  $(\pm 1, \pm 1, 0)$ ,  $(\pm 1, 0, \pm 1)$ ,  $(0, \pm 1, \pm 1)$ . Perceba que as partículas que deslocam-se por estas arestas precisam de uma velocidade maior, ou seja,  $\sqrt{2}c$ , onde  $c = \Delta x/\Delta t$ ;

4. **Sub-reticulado 3**: No último sub-reticulado, encontram-se as velocidades mais rápidas com módulo  $\sqrt{3}c$  com as seguintes oito possibilidades de direções para as partículas  $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ .

Cada um dos sub-reticulados descritos acima pode ser observado na Figura (49), que segue no texto.

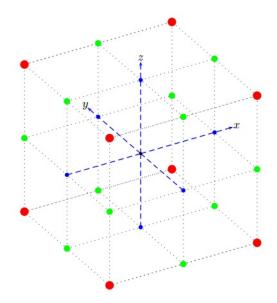


Figura 49 – Representação dos quatro sub-reticulados. Na centro do cubo, observa-se o nó (0,0,0) e tem-se o sub-reticulado 0. O sub-reticulado 1 é formado pelos quatro vetores azuis. Os nós verdes formam o sub-reticulado 2 e os nós vermelhos indicam a formação do sub-reticulado 3

Fonte: Alim (2001)

#### B.1.3 Reticulado D3Q15

Modelo tridimensional com 14 velocidades não-nulas e uma nula. Esta estrutura é formada utilizando os sub-reticulados 0, 1 e 3. O sub-reticulado 0 fornece uma velocidade, o sub-reticulado 1 fornece 4 e sub-reticulado 3 dá as outras 8. Deste modo, as possíveis direções neste reticulado são,

$$\vec{e}_{\alpha} = \begin{cases} (0,0,0) & \text{se } \alpha = 0, \\ e(\pm 1,0,0), e(0,\pm 1,0), e(0,0,\pm 1) & \text{se } \alpha = 1,..., 6, \\ e(\pm 1,\pm 1,\pm 1) & \text{se } \alpha = 7,..., 14. \end{cases}$$
(B.3)

Nota-se que os sub-reticulados foram formados de acordo com o tamanho das arestas e consequentemente os módulos das velocidades para cada um deles é diferente, conforme já explicado anteriormente.

Os pesos  $w_{\alpha}$  associados a cada uma das direções do modelo são,

$$w_{\alpha} = \begin{cases} \frac{2}{9}, & \text{se } \alpha = 0, \\ \frac{1}{9}, & \text{se } \alpha = 1, ..., 6, \\ \frac{1}{72} & \text{se } \alpha = 7, ..., 14. \end{cases}$$
(B.4)

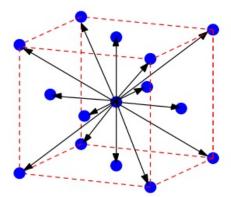


Figura 50 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D3Q15. Fonte: Kutay, Aydilek e Masad (2006)

## B.1.4 Reticulado D3Q19

Reticulado tridimensional cúbico com 18 velocidades (possibilidades de movimento) não-nulas, (ver Figura 51). Percebe-se também que neste reticulado é preciso atribuir dois valores diferentes para a velocidades, pois algumas arestas são maiores do que as outras. Tem-se que, velocidade e associada às direções  $\vec{e}_{\alpha}$  com  $\alpha=1,\,2,\,3,\,4,\,5,\,6$  e velocidade  $\sqrt{2}e$  associada as direções  $\vec{e}_{\alpha}$  com  $\alpha=7,...,18$ .

Fazendo relação com os sub-reticulados, tem-se que esta estrutura é formada utilizando os sub-reticulados 0, 1 e 2.

As possíveis direções neste reticulado são,

$$\vec{e}_{\alpha} = \begin{cases} (0,0,0) & \text{se } \alpha = 0, \\ e(\pm 1,0,0), e(0,\pm 1,0), e(0,0,\pm 1) & \text{se } \alpha = 1,..., 6, \\ e(\pm 1,\pm 1,0), e(0,\pm 1,\pm 1), e(\pm 1,0\pm 1) & \text{se } \alpha = 7,..., 18. \end{cases}$$
(B.5)

Os pesos  $w_{\alpha}$  associados a cada uma das direções do modelo são,

$$w_{\alpha} = \begin{cases} \frac{1}{3}, & \text{se } \alpha = 0, \\ \frac{1}{18}, & \text{se } \alpha = 1, ..., 6, \\ \frac{1}{36} & \text{se } \alpha = 7, ..., 18. \end{cases}$$
(B.6)

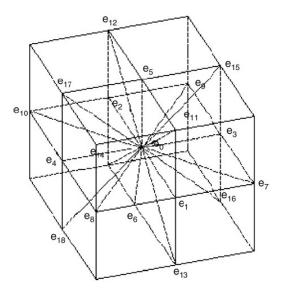


Figura 51 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D3Q19. Fonte: Zhang et al. (2009)

#### B.1.5 Reticulado D3Q27

Modelo tridimensional com 26 velocidades não-nulas e uma nula. Esta estrutura consiste da união de todos os sub-reticulados. Deste modo, as possíveis direções neste reticulado são,

$$\vec{e}_{\alpha} = \begin{cases} (0,0,0) & \text{se } \alpha = 0, \\ e(\pm 1,0,0), e(0,\pm 1,0), e(0,0,\pm 1) & \text{se } \alpha = 1,..., 6, \\ e(\pm 1,\pm 1,0), e(0,\pm 1,\pm 1), e(\pm 1,0\pm 1) & \text{se } \alpha = 7,..., 18, \\ e(\pm 1,\pm 1,\pm 1) & \text{se } \alpha = 19,..., 26. \end{cases}$$
(B.7)

Os pesos  $w_{\alpha}$  associados a cada uma das direções do modelo são,

$$w_{\alpha} = \begin{cases} \frac{8}{27}, & \text{se } \alpha = 0, \\ \frac{2}{27}, & \text{se } \alpha = 1, \dots, 6, \\ \frac{1}{54} & \text{se } \alpha = 7, \dots, 18, \\ \frac{1}{216} & \text{se } \alpha = 19, \dots, 26. \end{cases}$$
(B.8)

Algumas informações são importantes com relação aos três reticulados tridimensionais. O reticulado D3Q15 é menos isotrópico e mais vulnerável a instabilidades numéricas. Por outro lado, o D3Q19 é mais eficiente em relação ao D3Q27 e melhor estabilidade quando comparado com o D3Q15. O D3Q27 é mais isotrópico, mas nem sempre garante os melhores resultados (ALIM, 2001). O reticulado D3Q19 possui graus de liberdade maior do que o D3Q15 (GOLBERT, 2013), porém com custo computacional menor do que o D3Q27.

#### B.1.6 Reticulado D1Q3

Este reticulado é unidimensional com 2 velocidades não-nulas e uma nula, (ver Figura 52). As duas não-nulas tem mesma direção, sentidos opostos e se movem para seus vizinhos mais próximos. (LIU et al., 2015).

$$ec{e}_2$$
  $ec{e}_0$   $ec{e}_1$ 

Figura 52 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D1Q3. Fonte: A autora (2017)

Tem-se que a velocidade  $e = \Delta x/\Delta t$  e se considerando que  $\Delta x = 1 m$  e  $\Delta t = 1 s$ , as possíveis direções neste reticulado são,

$$\vec{e}_{\alpha} = \begin{cases} 0 & \text{se } \alpha = 0, \\ e & \text{se } \alpha = 1, \\ -e & \text{se } \alpha = 2. \end{cases}$$
(B.9)

Os pesos  $w_{\alpha}$  associados a cada uma das direções do modelo são (WALSH, 2003),

$$w_{\alpha} = \begin{cases} \frac{4}{6}, & \text{se } \alpha = 0, \\ \frac{1}{6}, & \text{se } \alpha = 1, 2. \end{cases}$$
 (B.10)

#### B.1.7 Reticulado D1Q5

O modelo D1Q5 estende o reticulado D1Q3 para mais dois nós vizinhos, ou seja, considera dois nós para a direita e dois para a esquerda, conforme Figura 53.

$$\vec{e_4}$$
  $\vec{e_2}$   $\vec{e_0}$   $\vec{e_1}$   $\vec{e_3}$ 

Figura 53 – Direções de movimento de uma partícula no reticulado D1Q5. Fonte: A autora (2017)

As possíveis direções que uma partícula pode se deslocar neste reticulado são (MA-CHADO, 2014),

$$\vec{e}_{\alpha} = \begin{cases} 0 & \text{se } \alpha = 0, \\ e & \text{se } \alpha = 1, \\ -e & \text{se } \alpha = 2, \\ 2e & \text{se } \alpha = 3, \\ -2e & \text{se } \alpha = 4. \end{cases}$$
(B.11)

Os pesos  $w_{\alpha}$  associados a cada uma das direções do modelo são (WALSH, 2003),

$$w_{\alpha} = \begin{cases} \frac{6}{12}, & \text{se } \alpha = 0, \\ \frac{2}{12}, & \text{se } \alpha = 1, 2, \\ \frac{1}{12}, & \text{se } \alpha = 3, 4. \end{cases}$$
 (B.12)