**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS**

Vinícius Pessoa Mapelli

**Solução numérica de escoamentos
termofluidodinâmicos bidimensionais laminares pelo
método de Lattice-Boltzmann**

São Carlos

2019

Vinícius Pessoa Mapelli

**Solução numérica de escoamentos
termofluidodinâmicos bidimensionais laminares pelo
método de Lattice-Boltzmann**

Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Térmica e Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Luben Cabezas Gómez

ESTE EXEMPLAR TRATA-SE DA VERSÃO
CORRIGIDA. A VERSÃO ORIGINAL
ENCONTRA-SE DISPONÍVEL JUNTO AO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
DA EESC-USP.

**São Carlos
2019**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues
Fontes da EESC/USP

M297s Mapelli, Vinícius Pessoa
Solução numérica de escoamentos termofluidodinâmicos bidimensionais laminares pelo método de Lattice-Boltzmann / Vinícius Pessoa Mapelli; orientador Luben Cabezas Gómez. -- São Carlos, 2019.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e Área de Concentração em Térmica e Fluidos -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2019.

1. Método de Lattice-Boltzmann. 2. Simulação numérica. 3. Convecção Natural. 4. Convecção forçada. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **VINÍCIUS PESSÔA MAPELLI**.

Título da dissertação: "Solução numérica de escoamentos termofluidodinâmicos bidimensionais laminares pelo método de Lattice-Boltzmann".

Data da defesa: 22/02/2019

Comissão Julgadora:

Resultado:

Prof. Associado **Luben Cabezas Gómez**
(Orientador)
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovado

Prof. Dr. **Leonardo Kleber Castelano**
(Universidade Federal de São Carlos/UFSCar)

Aprovado

Prof. Dr. **Alexys Bruno Alfonso**
(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP-Bauru)

Aprovado

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Mecânica:
Prof. Titular **Gherhardt Ribatski**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:
Prof. Titular **Luis Fernando Costa Alberto**

Dedico esse trabalho à minha família, em especial meus pais e irmãos, pelo amor e carinho. À minha futura esposa Izabela, pela paciência, apoio e companhia a todos os momentos

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Antônio e Sônia, que sempre me incentivaram e inspiraram a trilhar meus caminhos, dando conselhos e ensinamentos de valiosos de vida. Muito obrigado!

Aos meus irmãos, Victor e Mariana, que nunca deixaram a distância atrapalhar o companheirismo, e sempre me mostraram o caminho à minha frente. Obrigado pela amizade, amor, incentivo e conselhos.

À minha futura esposa Izabela, pelo amor, pelo carinho incomensurável, companheirismo, incentivo, compreensão, paciência e por tornar os dias da minha vida muito mais felizes.

À Isabel e Osvaldo, por serem grandes exemplos de humildade, força, persistência e fé. Meus agradecimentos pelos ensinamentos e pelo apoio.

Aos meus queridos avós, pelo exemplo de vida, em especial ao meu avô Nelson (in memoriam), pelo amor, carinho, dedicação à família e por mostrar as virtudes da humildade e simplicidade.

Aos meus amigos e colegas de classe, pela amizade, por tornar os dias mais divertidos e por me mostrarem o exemplo dos seguidores de excelência e conhecimento. Ao Bruno, Danilo, Eduardo, Francisco, Guilherme, João Pedro, Luiz, Maurício, Thales, Vágner, meus agradecimentos.

Ao meu orientador Prof. Dr. Luben Cabezas Gómez, pela oportunidade, pelo voto de confiança em meu trabalho, pelos ensinamentos e paciência.

Aos amigos do grupo de Lattice Boltzmann, Luiz Czelusniak, Matheus Guzella, Gustavo Ribeiro, pelas horas de compartilhamento de conhecimentos, e pela companhia em bons e maus momentos.

Ao Eduardo, pela companhia e hospitalidade durante todos os anos na cidade de São Carlos.

Aos meus amigos de longa data, Vítor Augusto, Hugo Jerônimo e Lucas Alves, pela constante presença e forte amizade.

Aos professores Dr. Alexys Bruno Alfonso e Dr. Leonardo Kleber Castelano, pela disponibilidade de comporem a banca examinadora e terem dados valiosas contribuições.

À CAPES e à FAPESP (processo 2016/09509-1), pelo apoio financeiro.

A todos que contribuíram de alguma forma para a realização desse trabalho.

RESUMO

MAPELLI, V. P. **Solução numérica de escoamentos termofluidodinâmicos bidimensionais laminares pelo método de Lattice-Boltzmann.** 2019. 139p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

O método de Lattice-Boltzmann (MLB) vem ganhando destaque nas últimas décadas pela sua capacidade de solução de escoamentos complexos como escoamentos multifásicos e multicomponentes, meios porosos e magnetohidrodinâmicos. Também existem extensões do método para a solução de problemas de advecção-difusão, que permitem acoplamento dessa metodologia para a solução numérica do conjunto de equação Navier-Stokes-Fourier. No trabalho presente, os objetivos iniciais podem ser resumidos no estudo dos conceitos básicos necessários para entender a derivação do método a partir da teoria cinética e estudo do método de Lattice Boltzmann, com operador de colisão mais simples conhecido como operador BGK, para problemas bidimensionais térmicos e fluidodinâmicos. A implementação numérica do método foi realizada em linguagem C, Matlab e CUDA C, com foco na solução de cinco problemas incompressíveis e laminares em regime permanente, conhecidos na literatura: equação viscosa de Burgers, escoamento de Poiseuille com transferência de calor, convecção natural em uma cavidade quadrada, regimes de convecção natural, forçada e mista em uma cavidade com uma das fronteiras móvel, e por fim, convecção forçada em uma cavidade ventilada, com uma entrada e uma saída. Além disso, um pequeno estudo no tempo computacional utilizando três implementações distintas foram testadas: implementação em série, uso de interpolações entre malhas grosseiras como condição inicial para malhas mais refinadas, e por fim, a adição da implementação do código em paralelo. Os ganhos de tempo entre a primeira e segunda estratégia ficaram entre 1.5 e 6, ao passo que o código paralelizado mostrou-se entre 20 e 25 vezes mais rápido que a segunda estratégia testada, comprovando o benefício de utilizar o processamento em paralelo em unidades gráficas. Os resultados obtidos para os problemas foram comparados com outros trabalhos da literatura, mostrando boa concordância para os primeiros quatro problemas estudados. Para a cavidade ventilada, diferenças relativas de até 15.7% no coeficiente de troca de calor e de até 28.38% para o coeficiente de queda de pressão adimensional foram observadas. Análises a respeito dos termos de erros do método apresentado, e a utilização de outras metodologias com método de Lattice Boltzmann, como por exemplo, o emprego de outros operadores de colisão, para trazerem mais estabilidade e precisão, podem elucidar melhor as divergências observados entre o trabalho presente e outros trabalhos da literatura.

Palavras-chave: Método de Lattice-Boltzmann. Simulação numérica. Convecção natural. Convecção forçada.

ABSTRACT

MAPELLI, V. P. **Numerical solution of two-dimensional laminar thermofluidynamic flows using Lattice-Boltzmann Method.** 2019. 139p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

Lattice-Boltzmann Method (LBM) has gained attention over last decades due to its performance in solving complex flows such as multiphase and multicomponent flow, porous media and magnetohydrodynamics. There are also further techniques which makes LBM able to solve advection-difussion problems, which allows coupling this methodology to solve Navier-Stokes-Fourier equations. In this work, initial goals are, in a few words, studying main concepts required to understand numerical method origins from kinectic thery, and studying the method implemetantion to solve 2D fluid dynamic and thermal problems. Numerical implemetation was written in C, CUDA C and Matlab languages, keeping in focus five different cases of laminar incompressible flows in steady state: viscous Burgers' equation, thermal Poiseuille, natural convection in square cavities, natural, forced and mixed convection in a lid driven cavity, and, finally, forced convection in a ventilated cavity, with one inlet and outlet ports. Besides that, a quick study regarding impact in simulation time of three distinct approaches was conducted. First approach consists in implementing a serial code, the second in using interpolation for coarser grids results as initial condition for finer meshes, and the last one is adding parallelized code implementation. Time gains between first and second approach range from 1.5 to 6, while parallelized code was able to converge from 20 to 25 times faster than second approach, confirming great benefits in using graphics processing units. Results obtained from numerical solutions of problems were compared with other works from literature, and a good agreement among them was observed, specially in the first four problems studied. In ventilated cavity problem, relative differences up to 15.7% in heat transfer coefficient and up to 28.38% in dimensionless pressure drop coefficient were observed. A further error terms analysis of method used in this work, and use of distinct approaches, such as different collision operators, in order to increase numerical solution stability and accurarcy, may shed a light on results divergences observed between this work and others from literature.

Keywords: Lattice-Boltzmann Method. Numerical Simulation. Natural Convection. Forced convection.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Comparação das escalas de tempo e espaço em Mecânica dos Fluidos	29
Figura 2 – Diagrama esquemático dos passos necessários para implementação numérica.	36
Figura 3 – Representação esquemática dos principais conjuntos de velocidades utilizados para simulação de problemas hidrodinâmicos.	41
Figura 4 – Duas interpretações possíveis para o mesmo domínio (a) <i>link-wise</i> e (b) <i>wet-node</i>	50
Figura 5 – Representação esquemática de uma parede superior coincidente com a direção horizontal das velocidades discretizadas. As populações desconhecidas são representadas por linhas tracejadas, e as conhecidas do passo de propagação, em linhas contínuas.	53
Figura 6 – Representação esquemática do problema estudado no caso 2 do trabalho presente.	57
Figura 7 – Representação esquemática do escoamento com convecção natural em uma cavidade quadrada, estudado no caso 3.	58
Figura 8 – Representação esquemática do problema estudado no caso 4	60
Figura 9 – Representação esquemática do problema estudado no caso 5.	61
Figura 10 – Máquinas utilizadas para simulações numéricas (a) Máquina 1, (b) Máquina 2.	64
Figura 11 – Resultados obtidos pelo MLB (pontos) e solução analítica (linha contínua) para diferentes instantes de tempo ($\nu = 0.005$).	65
Figura 12 – Resultados obtidos pelo MLB (pontos) e solução analítica (linha contínua) para diferentes instantes de tempo ($\nu = 0.0005$).	66
Figura 13 – Teste de acurácia no instante de tempo $t = 2.4$ e $\nu = 0.005$ comparando a metodologia atual e resultados de Gao, Le e Shi (2013) e Duan, Liu e Jiang (2008).	67
Figura 14 – Temperatura adimensional com $Re = 20$ e $Pr = 0.71$ para números de Eckert Ec (a) 0.1, (b) 20, (c) 50 e (d) 100, obtidos pela solução numérica (pontos) e analítica (linhas sólidas).	68
Figura 15 – Temperatura adimensional com $Re = 20$ e $Pr = 0.71$ para números de Eckert Ec (a) 0.1, (b) 20, (c) 50 e (d) 100, obtidos pela solução numérica (pontos) e analítica (linhas sólidas).	69
Figura 16 – Velocidade axial em função da altura do canal obtida pelo MLB (pontos) e dada pela solução analítica (linha sólida).	70
Figura 17 – Variação do número de Nusselt médio com número de pontos $N \times N$ da malha com a estratégia serial (S).	73
Figura 18 – Variação do número de Nusselt médio com número de pontos $N \times N$ da malha com a estratégia serial com interpolação (SI).	74

Figura 19 – Variação do número de Nusselt médio com número de pontos $N \times N$ da malha com código paralelizado (P).	75
Figura 20 – Linhas de corrente obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^3$	78
Figura 21 – Linhas de corrente obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^4$	78
Figura 22 – Linhas de corrente obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^5$	79
Figura 23 – Linhas de corrente obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^6$	79
Figura 24 – Linhas isotérmicas obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^3$	80
Figura 25 – Linhas isotérmicas obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^4$	80
Figura 26 – Linhas isotérmicas obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^5$	81
Figura 27 – Linhas isotérmicas obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^6$	81
Figura 28 – Variação do perfil de velocidade horizontal no plano médio vertical de acordo com o número de pontos.	84
Figura 29 – Regime de convecção forçada: (a) trabalho presente, (b) Aydm (1999).	87
Figura 30 – Perfil de velocidades adimensional no plano médio vertical para correntes de convecção (a) favoráveis e (b) contrárias ao movimento da fronteira esquerda.	87
Figura 31 – Campos de temperatura e linhas de corrente em sete valores diferentes de Ri com gradiente de temperatura (a) favorável e (b) adverso ao movimento da fronteira esquerda.	88
Figura 32 – Perfil de velocidades adimensional horizontal no plano médio vertical (linha superior), e velocidades verticais no plano médio horizontal no plano médio horizontal (linha inferior), para $Re = 50$ (à esquerda) e $Re = 100$ (à direita).	90
Figura 33 – Perfil de temperaturas adimensional no plano médio vertical para diferentes números de pontos na malha, para $Re = 50$ (à esquerda) e $Re = 100$ (à direita).	91
Figura 34 – Perfil de temperaturas adimensional no plano médio horizontal para diferentes números de pontos na malha, para $Re = 50$ (à esquerda) e $Re = 100$ (à direita).	92
Figura 35 – Linhas de corrente para número de Reynolds 20, 40, 50, 80, 100 e 200.	94
Figura 36 – Comparação das linhas de corrente obtidas no trabalho presente (a) e por Mioralli et al. (2018).	94
Figura 37 – Comparação das linhas de corrente e campo de temperaturas obtidos para $Re = 100$ no trabalho presente (a) e por Chabani et al. (2017).	95
Figura 38 – Comparação das linhas de corrente e campo de temperaturas obtidos para $Re = 200$ no trabalho presente (a) e por Chabani et al. (2017).	95
Figura 39 – Linhas isotérmicas para número de Prandtl fixo em 5.0, e diferentes números de Reynolds.	97
Figura 40 – Linhas isotérmicas para diferentes números de Prandtl e Reynolds.	97

Figura 41 – Linhas isotérmicas para número de Reynolds igual a 50, e diferentes números de Prandtl obtidos (a) no trabalho presente, e (b) Mioralli et al. (2018). . . .	98
Figura 42 – Linhas isotérmicas para número de Reynolds igual a 100, e diferentes números de Prandtl obtidos (a) no trabalho presente, e (b) Mioralli et al. (2018). .	98
Figura 43 – Comparação entre os números de Nusselt locais para $Re = 50$ e 100 e $Pr = 0.7, 3.0$ e 5.0 entre (a) trabalho presente e (b) Mioralli et al. (2018). .	101
Figura 44 – Número de Nusselt local para $Re = 200$ e números de Prandtl $0.7, 3.0$ e 5.0 .	102
Figura 45 – Comparação entre os resultados para $Re = 100$ e $Pr = 0.7$ do número de Nusselt local obtido (a) no trabalho presente, e em (b) Chabani et al. (2017).	102
Figura 46 – Comparação entre os resultados para $Re = 100$ e $Pr = 0.7$ do número de Nusselt local obtido (a) no trabalho presente, e em (b) Chabani et al. (2017).	103

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Conjuntos de velocidades para simulação de problemas uni-, bi- e tridimensionais, e suas propriedades.	41
Tabela 2 – Relação entre as variáveis físicas (1ª linha) e as unidades escritas descritas em unidades de <i>lattices</i> (2ª linha)	55
Tabela 3 – Principais componentes das máquinas utilizadas para as simulações numéricas no trabalho presente.	64
Tabela 4 – Erro para $\nu = 0.005$ e $t = 2.4$ obtidos no trabalho presente e de acordo com trabalhos da literatura.	67
Tabela 5 – Erros para diferentes números de Eckert e respectivos tempos de simulação.	69
Tabela 6 – Erros para diferentes números de Prandtl e respectivos tempos de simulação.	70
Tabela 7 – Tempos de processamento até a convergência segundo as estratégias, para $Ra = 10^3$	73
Tabela 8 – Tempos de processamento até a convergência segundo as estratégias, para $Ra = 10^4$	74
Tabela 9 – Tempos de processamento até a convergência segundo as estratégias, para $Ra = 10^5$	75
Tabela 10 – Tempos de processamento até a convergência segundo as estratégias, para $Ra = 10^6$	76
Tabela 11 – Comparação entre os resultados obtidos com as três estratégias do trabalho presente (S,SI,P) e comparação com trabalhos da literatura: I - Guo, Shi e Zheng (2002), II - Guo et al. (2007), III - Hortmann, Perić e Scheuerer (1990), IV - Mohamad e Kuzmin (2010)	82
Tabela 12 – Variação do perfil de velocidades no plano médio vertical entre duas malhas com número de pontos distintos.	84
Tabela 13 – Valores de Nusselt médio da cavidade para diferentes condições de escoamento.	100
Tabela 14 – Valores de Nusselt médio da cavidade para diferentes números de Reynolds e Prandtl fixo em 5.0.	103
Tabela 15 – Valores de Nusselt médio considerando a parede esquerda e inferior da cavidade, para $Re = 100$ e 200 e $Pr = 0.7$	104
Tabela 16 – Coeficientes de queda de pressão adimensional para diferentes condições de escoamento.	105

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BGK	Bhatnagar, Gross e Krook
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CUDA	<i>Computer Unified Device Architecture</i>
FD	<i>Finite Differences</i>
FE	<i>Finite Elements</i>
GPU	<i>Graphics processing unit</i>
LGCA	<i>Lattice-Gas Cellular Automata</i>
MLB	Método de Lattice-Boltzmann
MRT	<i>Multiple relaxation time</i>
NEBB	Método de <i>bounce-back</i> de não-equilíbrio
P	Implementação paralelizada
S	Implementação do código em série
SI	Implementação em série com uso de interpolações
SRT	<i>Single relaxation time</i>
TMLB	Método de Lattice-Boltzmann térmico

LISTA DE SÍMBOLOS

Latinos

c_i	Conjunto de velocidades discretas
c_p	Calor específico a pressão constante
C_p	Coeficiente de queda de pressão adimensional
c_s	Velocidade do som no <i>lattice</i>
D	Número de dimensões
e	Energia interna específica
E	Energia total específica
Ec	Número de Eckert
f	Função de distribuição de partículas
F	Termo de forças volumétricas
$\mathbf{g}$	Vetor de aceleração gravitacional
Gr	Número de Grashof
H	Altura
h	Função de distribuição relacionada à solução de conservação de energia
K	Número de Knudsen
L	Comprimento característico
ℓ	Escala típica em que os gradientes das propriedades são relevantes
ℓ_a	Escala dos átomos ou moléculas do fluido
ℓ_{mfp}	Escala do caminho livre médio das partículas
ℓ_S	Escala do sistema
Ma	Número de Mach
$\mathbf{n}$	Vetor na direção normal à parede
Nu	Número de Nusselt

p	Pressão termodinâmica
Pe	Número de Péclet
Pr	Número de Prandtl
q	Fluxo de calor
R	Constante específica do gás
Ri	Número de Richardson
$\mathbf{t}$	Vetor na direção tangente a fronteira do domínio
T	Temperatura
$\mathbf{u}$	Velocidade vetorial macroscópica
$\mathbf{v}$	Velocidade aleatória da partícula
w_i	Pesos da quadratura relacionados ao conjunto de velocidades
$\mathbf{x}$	Coordenada espacial em $\mathbb{R}^3$

Gregos

β	Coeficiente de expansão térmica
γ	Coeficiente de expansão adiabática
ϵ	Parâmetro de ordem de grandeza
ε	Parâmetro calculado para comparação com critério de parada
η_B	Viscosidade volumétrica
θ	Temperatura adimensional
λ	Coeficiente de transporte térmico
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Viscosidade cinemática
ξ	Velocidade vetorial da partícula
ξ_x	Velocidade da partícula no eixo x
ξ_y	Velocidade da partícula no eixo y
ξ_z	Velocidade da partícula no eixo z

ρ	Densidade
σ	Tensor de tensões
τ	Tempo de relaxação
Ω	Operador de colisão

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	29
2.1	Teoria Cinética dos Gases	30
2.1.1	Função de Distribuição	31
2.1.2	Função de Equilíbrio	32
2.1.3	Equação de Boltzmann	32
2.1.4	Equações de conservação	33
2.1.4.1	Considerações finais sobre a Teoria Cinética dos Gases	35
2.2	O método de Lattice-Boltzmann	36
2.2.1	Discretização no espaço de velocidades	36
2.2.1.1	Expansão de Mach	37
2.2.1.2	Quadratura de Gauss-Hermite	38
2.2.1.3	Equação de Lattice-Boltzmann discretizada no espaço de velocidades	39
2.2.2	Conjuntos de velocidades	39
2.2.3	Discretização no espaço-tempo	42
2.2.4	Análise do método LBGK	43
2.2.5	Influência de campos externos	44
2.3	Soluções para a equação de conservação de energia	45
3	METODOLOGIA	49
3.1	Algoritmo	49
3.2	Abordagens	50
3.3	Condições de contorno	51
3.3.1	Condições periódicas	51
3.3.2	Esquema de equilíbrio	51
3.3.3	Extrapolação de não-equilíbrio	52
3.3.4	<i>Bounce-back</i> de não equilíbrio	52
3.4	Unidades de <i>lattices</i>	54
3.5	Casos numéricos	56
3.5.1	Caso 1	56
3.5.2	Caso 2	57
3.5.3	Caso 3	58
3.5.4	Caso 4	59
3.5.5	Caso 5	61
3.5.5.1	Cálculo do número de Nusselt local e médio	62

3.5.5.2	Coeficiente de queda de pressão adimensional	62
3.5.6	Critério de parada e erro numérico	63
3.6	Equipamentos	63
4	RESULTADOS	65
4.1	Caso 1	65
4.2	Caso 2	67
4.3	Caso 3	71
4.3.1	Influência do número de pontos nas malhas	71
4.3.2	Convecção Natural	77
4.4	Caso 4	83
4.4.1	Influência do número de pontos nas malhas	83
4.4.2	Regimes de escoamento	85
4.5	Caso 5	89
4.5.1	Influência do número de pontos nas malhas	89
4.5.2	Linhas de corrente	93
4.5.3	Campos de temperatura	95
4.5.4	Número de Nusselt local e médio	99
4.5.5	Coeficiente de queda de pressão adimensional	105
4.6	Considerações finais aos resultados	105
5	CONCLUSÃO	107
5.1	Sugestões para trabalhos futuros	108
	REFERÊNCIAS	111
	ANEXOS	115
	ANEXO A – TRABALHOS EM CONGRESSOS	117

1 INTRODUÇÃO

A Mecânica dos Fluidos Computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*) é uma das grandes vertentes da área da Mecânica dos Fluidos. Juntamente com a área experimental e estudos teóricos, a Mecânica dos Fluidos Computacional tem permitido grandes avanços nas fronteiras do conhecimento a respeito de diversas aplicações de engenharia. Com a evolução dos computadores e contínuo aumento na velocidade de processamento nas últimas décadas, também houve aumento no interesse nos estudos e desenvolvimento de métodos numéricos para os mais diversos tipos de escoamento.

Atualmente, os métodos numéricos no contexto da Mecânica dos Fluidos Computacional podem ser divididos em dois grandes grupos (KRÜGER et al., 2017). O primeiro deles consiste nos métodos ditos tradicionais.

Os métodos tradicionais lidam com as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia válidas para um meio contínuo. No geral, o domínio do problema é discretizado, e as variáveis de interesse são avaliadas em cada nó do domínio. A partir da discretização, monta-se um sistema de equações que respeitam as equações de conservação, que são relacionadas aos gradientes temporais e espaciais dos campos de interesse. Existem diferentes estratégias na solução das equações de conservação, o que dá origem a três grandes grupos conhecidos: Volumes Finitos (FV, do inglês *Finit Volume*), Diferenças Finitas (FD, do inglês *Finite Differences*) e Elementos Finitos (FE, do inglês *Finite Elements*).

O segundo grupo é chamado de método baseados em dinâmicas de partículas. Os métodos desse grupo geralmente não trabalham diretamente com as equações de conservação, mas com as equações que regem o comportamento, por exemplo, de um átomo, molécula, um grupo de moléculas, uma fração de um fluido macroscópico. Nesse sentido, vários métodos para problemas muito específicos podem surgir, sendo difícil separar em estratégias de solução, como no caso dos métodos tradicionais. Nesse grupo, está inserido o Método de Lattice-Boltzmann (MLB), que trabalha com equações que regem a função de distribuição de um grupo de moléculas.

O método de Lattice-Boltzmann foi introduzido inicialmente por Mcnamara e Zanetti (1988), baseado em um modelo autômato celular, denominado *Lattice-Gas Cellular Automata* (LGCA), basicamente, descrito por um modelo de propagação e colisão de partículas, com o objetivo de resolver numericamente equações de continuidade e de quantidade de movimento. O MLB também carrega esses conceitos de propagação e colisão de partículas, mas as variáveis booleanas do LGCA são substituídas por uma função de distribuição no espaço de fase das partículas, que traz informações de um conjunto de partículas. A evolução no tempo desta função de distribuição pode ser estudada através dos conceitos de Teoria Cinética, de onde consegue-se mostrar que a equação governante desse fenômeno é a denominada equação de Boltzmann.

Algumas das vantagens do método de Lattice-Boltzmann podem ser resumidas a seguir: a solução numérica da função de distribuição garante a conservação local de massa e quantidade de movimento, reduzindo o número de equações em relação aos métodos tradicionais; por se tratar de um esquema explícito, seu algoritmo é altamente paralelizável, sendo bastante adequado para implementação com uso de unidades de processamento gráfico (GPU) (KRÜGER et al., 2017); e a sua capacidade de lidar com fenômenos complexos com a inclusão de termos fontes na equação de Boltzmann, expandindo o campo de atuação do método para diversas aplicações como escoamentos multifásicos e multicomponentes (HE; CHEN; ZHANG, 1999), escoamentos em meios porosos (GUO; ZHAO, 2002), acústica (BRÈS; PÉROT; FREED,) e magnetohidrodinâmica (MARTINEZ et al., 1994).

No presente trabalho, o método de Lattice-Boltzmann é utilizado para analisar escoamentos incompressíveis bidimensionais com transferência de calor. O método se mostra versátil para a resolução dessa classe de problemas, que são comuns em aplicações de engenharia. O trabalho está dividido nos seguintes capítulos:

Capítulo 1 Uma breve introdução.

Capítulo 2 Um resumo do conteúdo disponível do MLB na literatura é realizada, apresentando os conceitos básicos, partindo da teoria cinética, exibindo a equação de Boltzmann, a derivação do método de Lattice-Boltzmann a partir dessa equação, e a extensão do método para solução da equação de conservação de energia.

Capítulo 3 A metodologia comumente utilizada na literatura é apresentada, assim como a que foi utilizada para a solução dos cinco problemas abordados no trabalho presente: equação viscosa de Burgers, escoamento de Poiseuille com transferência de calor, convecção natural em uma cavidade quadrada, regimes de convecção natural, forçada e mista em uma cavidade com uma das fronteiras móvel, e por fim, convecção forçada em uma cavidade ventilada, com uma entrada e uma saída.

Capítulo 4 Os resultados obtidos e análises pertinentes.

Capítulo 5 As conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Anexos Os trabalhos apresentados em congressos derivados dessa dissertação são apresentados em anexo.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Antes de iniciar as discussões a respeito do método de Lattice-Boltzmann em si e as aplicações abordadas nesse trabalho, é importante contextualizar a origem e as teorias que dão base ao método.

Na Figura 1, podemos ver as diferentes escalas de tempo e espaço envolvidas em um problema fluidodinâmico. Dentre as escalas típicas, temos a escala dos átomos ou moléculas do fluido ℓ_a , escala do caminho livre médio das partículas ℓ_{mfp} (distância média percorrida entre duas colisões sucessivas de partículas), escala típica em que os gradientes das propriedades são relevantes ℓ e a escala do sistema ℓ_S . Nos problemas típicos, tem-se $\ell_a \ll \ell_{mfp} \ll \ell \ll \ell_S$.

Figura 1: Comparação das escalas de tempo e espaço em Mecânica dos Fluidos

Fonte: Krüger et al. (2017, p. 12)

Assim, no contexto de fluidos, geralmente, separam-se os problemas em três grupos: microscópicos, mesoscópicos e macroscópicos. A Mecânica dos Fluidos clássica se baseia na hipótese do contínuo, ou seja, assume-se que o problema é visto em escalas de tempo e espaço suficientemente grandes, de tal forma que pode-se considerar que variações em nível atômico ou molecular não vão influenciar as variáveis de interesse. Ou seja, problemas macroscópicos, que são regidos pelas equações de Navier-Stokes, por exemplo. Já os problemas microscópicos levam em conta as moléculas e átomos, seus movimentos e interações. Sendo assim, as equações que regem esse tipo de problema são ditadas pelas leis dinâmicas de Newton. Entre as escalas micros e macroscópicas, existe a escala mesoscópica. Nesses tipos de problema, ao invés de manter o foco do estudo no movimento de um átomo e/ou partícula, mantêm-se o foco em

uma distribuição ou um grupo de átomos e partículas, utilizando ferramentas estatísticas. Nesse campo é que se encontra a Teoria Cinética dos Gases, que será discutida brevemente a seguir e é a base teórica do método de Lattice-Boltzmann.

2.1 Teoria Cinética dos Gases

A Teoria Cinética dos Gases procura descrever como um grupo de partículas ou átomos se comportam em um gás, em escalas de tempo e espaço da ordem do caminho livre médio entre duas colisões sucessivas (ℓ_{mfp}) entre as partículas. Para isso, procura-se estudar como estão distribuídas as partículas em um certo volume. A princípio, essa ideia pode ser utilizada para descrever qualquer tipo de fluido, desde que as hipóteses pertinentes sejam levadas em conta. Para os fins necessários à melhor compreensão do Método de Lattice-Boltzmann, será suficiente a discussão a respeito de um gás rarefeito.

Em um gás rarefeito, o caminho livre médio das moléculas é muito grande quando comparado à escala atômica ou molecular ($\ell_a \ll \ell_{mfp}$). Essa hipótese permite estudar as interações entre as partículas como colisões binárias. Ou seja, a maior parte das interações entre as moléculas ou átomos que compõem aquele gás ocorre em um curto espaço de tempo e quase sempre entre duas partículas. Esse cenário não é uma hipótese adequada para gases densos, por exemplo, em que além de ocorrer um maior número maior de colisões em um menor intervalo de tempo devido ao menor caminho livre médio, também ocorrem com maior frequência a interação entre três ou mais partículas, tornando esse fenômeno mais relevante para descrição do comportamento desse gás. Para líquidos, os átomos ou moléculas que o compõem sempre estão interagindo entre si através de forças intermoleculares, que devem ser corretamente modeladas para descrever o comportamento do fluido a partir dessa abordagem (GOMBOSI, 1994).

Além de um gás rarefeito, outras hipóteses podem ser utilizadas para a simplificação do problema de descrever o comportamento de um gás. Uma dessas hipóteses é assumir um gás monoatômico. Com isso, simplifica-se ainda mais o problema, pois não há graus de liberdade internos de uma partícula, como ocorre nos gases poliatômicos, que podem apresentar relevantes movimentos rotacionais ou de vibração. Assim, para o gás monoatômico, apenas os movimentos translacionais das partículas precisam ser levados em conta. Além disso, considera-se que as colisões entre as partículas são elásticas. Ou seja, a energia antes e após a colisão entre duas partículas é conservada. Para gases poliatômicos, embora o princípio de conservação de energia seja adotado, durante as colisões pode haver conversão de energia translacional para rotacional ou de vibração, muitas vezes sendo necessário incluir efeitos quânticos para descrever corretamente essas interações durante uma colisão. Apesar de todas essas simplificações, muitas vezes o comportamento de gases poliatômicos podem ser descritos através do comportamento de um gás monoatômico, uma vez que as energias rotacionais e de vibração passam a ser mais significativas somente a altas temperaturas.

2.1.1 Função de Distribuição

Como discutido anteriormente, a Teoria Cinética dos Gases procura descrever os fenômenos em uma escala mesoscópica. Isso é feito através do estudo da variável fundamental da Teoria Cinética, que é a função de distribuição das partículas. Nesta seção, será discutido o conceito básico da função de distribuição, sendo que a descrição mais detalhada pode ser encontrada em [Krüger et al. \(2017\)](#) e [Gombosi \(1994\)](#).

A função de distribuição de partículas f pode ser entendida como uma generalização da densidade, levando em conta também o espaço de velocidades das partículas. Por exemplo, enquanto $\rho(\mathbf{x}, t)$ representa a densidade na coordenada $\mathbf{x}$ e tempo t , a função $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ representa a densidade de partículas com uma determinada velocidade $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$, em uma determinada coordenada no espaço físico tri-dimensional $\mathbf{x}$ em um determinado instante t .

A relação entre a função de distribuição e as variáveis macroscópicas pode ser feita através dos cálculos dos momentos dessa função ponderada através da velocidade das partículas $\boldsymbol{\xi}$. Por exemplo, podemos encontrar a densidade ρ através de:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.1)$$

com isso, pode-se identificar que a unidade, em SI, da função de distribuição é dada por $\frac{\text{kg} \cdot \text{s}^3}{\text{m}^6}$.

Ao integrar no espaço de velocidades, estamos considerando a contribuição na densidade das partículas com todas as velocidades possíveis. Também é possível encontrar outras relações macroscópicas como, por exemplo, a densidade de quantidade de movimento e a densidade de energia total, dadas por:

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.2)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) E(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.3)$$

A energia total específica (E) leva em conta a contribuição devido ao movimento do fluido como um todo ($\rho|\mathbf{u}|^2/2$) e a energia interna devido ao movimento aleatório térmico das partículas. Caso seja de interesse apenas a contribuição térmica, associada a esses movimentos aleatórios, podemos calcular a densidade de energia interna:

$$\rho(\mathbf{x}, t) e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\mathbf{v}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.4)$$

em que e é a energia interna específica, e $\mathbf{v}$ a velocidade relativa, dada pela diferença entre a velocidade média local e a velocidade da partícula:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t). \quad (2.5)$$

2.1.2 Função de Equilíbrio

Ao se considerar um gás pouco denso como um conjunto de partículas, a correta modelagem das colisões binárias torna-se um tópico de interesse. Uma das formas mais simples é considerar colisões elásticas entre esferas rígidas, semelhantes a bolas de bilhar. No entanto, muitas vezes efeitos de forças de campo, como forças eletromagnéticas podem ter uma contribuição significativa, assim como efeitos quânticos. Uma discussão mais detalhada a respeito das colisões binárias pode ser encontrada em [Gombosi \(1994\)](#). Seja como for modelado, os cálculos das colisões binárias são bastante sensíveis em relação à posição inicial relativa. No entanto, com o tempo, as colisões tendem a apresentar uma distribuição angular uniforme no espaço de velocidades, em torno da velocidade média das partículas $\mathbf{u}$. Assim, quando não há perturbações externas, um gás, com o passar do tempo, tende a apresentar uma função de distribuição $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ conhecida como a função de distribuição de equilíbrio $f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, que é isotrópica no espaço de velocidades em torno da velocidade média $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. Ou seja, em um referencial com velocidade $\mathbf{u}$, a função de distribuição de equilíbrio, no que diz respeito ao espaço de velocidades, dependerá apenas do módulo da velocidade relativa da partícula $f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t)$. Pode-se mostrar que a função de distribuição pode ser expressa como ([KREMER, 2005](#); [GOMBOSI, 1994](#)):

$$f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t) = \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-|\mathbf{v}|^2/(2RT)}. \quad (2.6)$$

Essa expressão foi primeiramente desenvolvida por Maxwell, no ano de 1867, utilizando-se de hipóteses simplificadoras da teoria cinética de gás, e por um procedimento de separação de variáveis. Entre os anos de 1866 e 1872, Boltzmann também publicou uma série de artigos, com deduções mais rigorosas, mostrando que a equação de distribuição de equilíbrio é única e também satisfaz a segunda lei da termodinâmica, através do teorema $\mathcal{H}$ de Boltzmann. Por essa razão, a função de equilíbrio também é conhecida como função de distribuição de Maxwell-Boltzmann. Uma dedução mais detalhada a respeito da função de equilíbrio pode ser encontrada em [Gombosi \(1994\)](#) e [Kremer \(2005\)](#).

2.1.3 Equação de Boltzmann

Com a ideia apresentada da função de distribuição anteriormente, o passo seguinte dentro da Teoria Cinética é tentar entender como a função $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ se comporta ao longo do tempo. Isso pode ser feito calculando a derivada total de f sabendo que esta é uma função da posição $\mathbf{x}$, velocidade da partícula $\boldsymbol{\xi}$ e tempo t .

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta} \right) \frac{dx_\beta}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} \right) \frac{d\xi_\beta}{dt}. \quad (2.7)$$

Analisando os termos do lado direito da Equação (2.7), sabemos que a velocidade da partícula $dx_\beta/dt = \xi_\beta$ e que, pela segunda lei de Newton $d\xi_\beta/dt = F_\beta/\rho$. Dessa forma,

utilizando a notação $df/dt = \Omega(f)$, podemos escrever:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \xi_\beta \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta}\right) + \frac{F_\beta}{\rho} \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta}\right) = \Omega(f). \quad (2.8)$$

A Equação (2.8) é conhecida como a Equação de Boltzmann. É interessante notar que a equação pode ser entendida como uma equação de advecção da função de distribuição, com a função f advecada na velocidade das partículas ξ , levando em conta também a influência das forças externas nessa velocidade. O termo $\Omega(f)$ é um termo fonte que representa como a função de distribuição f é afetada localmente devido às colisões entre as partículas. Por essa razão, o termo $\Omega(f)$ é conhecido como o operador de colisão. O termo de colisão considerando um gás monoatômico pouco denso é descrito por uma integral dupla no espaço de velocidades levando em conta resultados de estudos de colisões binárias. A dedução completa pode ser vista nos trabalhos de Gombosi (1994) e Kremer (2005). Dessa forma, a equação de Boltzmann original pode ser definida como um equação íntegro-diferencial bastante complexa de ser resolvida. Porém, é possível utilizar formas simplificadas para o termo de colisão, sendo um dos mais simples o operador de colisão proposto por Bhatnagar, Gross e Krook (BHATNAGAR; GROSS; KROOK, 1954), também conhecido como operador BGK:

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}). \quad (2.9)$$

O operador BGK consegue capturar a tendência da função distribuição f a atingir o valor da função de equilíbrio f^{eq} . A constante de tempo τ , também chamada de tempo de relaxação, está diretamente relacionada com os coeficientes de transporte macroscópicos, como viscosidade e difusividade térmica.

2.1.4 Equações de conservação

As equações de conservação macroscópicas podem ser deduzidas a partir dos cálculos dos momentos da equação de Boltzmann. O procedimento completo para encontrar as equações de conservação de quantidade de movimento e energia está bem descrito nos trabalhos de Gombosi (1994) e Kremer (2005). Para exemplificar o procedimento, mostraremos aqui apenas como pode-se chegar à equação de conservação de massa.

Como mostrado na Equação (2.1), pode-se relacionar a função distribuição com a variável macroscópica densidade, calculando o momento de ordem zero da função f . Seguindo na mesma linha de raciocínio, podemos encontrar o comportamento macroscópico da densidade ao calcular o momento de ordem zero da Equação (2.8), a qual descreve o comportamento da função de distribuição $f(\mathbf{x}, \xi, t)$. Assim:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f d\xi + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int \xi_\beta f d\xi + \frac{F_\beta}{\rho} \int \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} d\xi = \int \Omega(f) d\xi. \quad (2.10)$$

Avaliando termo a termo, sabemos a partir das Equações (2.1) e (2.2) que $\int f d\boldsymbol{\xi} = \rho$, $\int \xi_\beta f d\boldsymbol{\xi} = \rho u_\beta$. O termo $\int \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} d\boldsymbol{\xi}$ pode ser mostrado que é igual a 0, uma vez que ao derivarmos e integramos a função de distribuição f no espaço de velocidades, acabamos com uma avaliação da própria função de distribuição f com velocidades de partículas que tendem a $+\infty$ e $-\infty$. Como a função f representa uma possibilidade de encontrar partículas com uma certa velocidade, em um certo instante e local no espaço, pode-se dizer que a probabilidade de encontrar partículas com velocidade com magnitude tendendo a infinito é igual a zero. O termo de colisão $\Omega(f)$ leva em conta resultados das colisões das partículas que compõem o gás. Como as colisões são elásticas, o termo de colisão é conservativo em relação à massa, quantidade de movimento e energia. Dessa forma, sabe-se que $\int \Omega(f) d\boldsymbol{\xi} = 0$, $\int \xi_\beta \Omega(f) d\boldsymbol{\xi} = 0$ e $\int 1/2 |\boldsymbol{\xi}|^2 \Omega(f) d\boldsymbol{\xi} = 0$. Assim, obtemos o resultado equivalente à conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\beta)}{\partial x_\beta} = 0. \quad (2.11)$$

Da mesma forma, podemos calcular os momentos de ordem 1 e 2 da Equação de Boltzmann (2.8) ao multiplicá-la por, respectivamente, ξ_β e $\xi_\alpha \xi_\beta$ e integrar no espaço de velocidades. Assim, obtemos as seguintes equações macroscópicas:

$$\frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{x_\beta} + F_\alpha, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\beta E)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial(u_\alpha \sigma_{\alpha\beta})}{\partial x_\beta} + F_\beta u_\beta - \frac{\partial q_\beta}{\partial x_\beta}, \quad (2.13)$$

em que $\sigma_{\alpha\beta}$ é o tensor de tensões de Cauchy, que é relacionado com a função de distribuição por:

$$\sigma_{\alpha\beta} = - \int v_\alpha v_\beta f d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.14)$$

e o fluxo de calor q_β :

$$q_\beta = \frac{1}{2} \int v_\alpha v_\alpha v_\beta f d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.15)$$

Note que as Equações (2.11), (2.12) e (2.13) representam equações de conservação de, respectivamente, massa, quantidade de movimento e energia. Esse sistema de equações ainda não pode ser considerado completo, pois os termos correspondentes ao tensor de tensões e fluxo de calor dependem de uma avaliação correta da função de distribuição f . Como a função f é desconhecida a priori, surgem aproximações para avaliar esses termos de formas explícitas.

A aproximação mais simples de ser feita é assumir que a função de distribuição f é igual à função de equilíbrio $f \approx f^{eq}$. Quando essa aproximação é utilizada, pode-se mostrar as Equações (2.12) e (2.13) replicam as equações de Euler de quantidade de movimento e energia. Essas equações são utilizadas para descrever escoamentos em que fenômenos de dissipação viscosa e difusividade de calor não tem influência relevante.

Para recuperar equações de conservação que levam em conta efeitos viscosos e de difusão de calor, o método mais estabelecido na literatura é a *Análise de Chapman-Enskog*. A ideia principal dessa análise é expressar a função de distribuição f como uma perturbação em torno da função de equilíbrio f^{eq} :

$$f = f^{eq} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots \quad (2.16)$$

sendo o parâmetro ϵ utilizado para diferenciar os termos de ordens diferentes relacionadas ao número de Knudsen, que é dado pela relação entre o caminho livre médio das partículas ℓ_{mfp} e o comprimento característico do escoamento ℓ ($Kn = \ell_{mfp}/\ell$). Utilizando as aproximações até os termos de ordem $O(\epsilon)$, é possível mostrar que recupera-se as equações de Navier-Stokes-Fourier (VIGGEN, 2014), com o tensor de tensões:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma'_{\alpha\beta} - p\delta_{\alpha\beta}, \quad (2.17)$$

sendo p a pressão termodinâmica e $\sigma'_{\alpha\beta}$ o tensor de tensões viscosas, dado por:

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \mu \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right) + \eta_B \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma}, \quad (2.18)$$

sendo μ a viscosidade dinâmica, e η_B , a viscosidade volumétrica, cujos efeitos são normalmente desprezados quando efeitos de compressibilidade não são relevantes ao escoamento. Da mesma forma, o fluxo de calor recuperado por essa aproximação é dado por:

$$q_\beta = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_\beta}. \quad (2.19)$$

em que λ é o coeficiente de transporte térmico, também denominado de condutividade térmica.

O desenvolvimento completo da análise de Chapman-Enskog pode ser vista com mais detalhe no trabalho de Vigen (2014). Também, os coeficientes de transporte são relacionados com o fator de relaxação:

$$\mu = p\tau, \quad \eta_B = 0, \quad \lambda = \frac{5}{2} R p \tau, \quad (2.20)$$

em que R é a constante específica do gás.

Outras aproximações para a função de distribuição f também são possíveis, levando em conta termos de ordens maiores. Por exemplo, se termos até ordem $O(\epsilon^2)$ forem levados em conta, as equações recuperam o chamado modelo de Burnett (CHAPMAN; COWLING, 1952), que é mais adequado para escoamentos com números de Knudsen elevados.

2.1.4.1 Considerações finais sobre a Teoria Cinética dos Gases

Até este ponto, uma breve revisão bibliográfica a respeito da Teoria Cinética dos Gases foi apresentada, com breves noções dos conceitos principais que são a base para o entendimento da equação de Boltzmann. Em poucas palavras, pode-se resumir que o objetivo dessa seção

foi mostrar a origem dos conceitos-chave como a função de distribuição de partículas, como essa função se comporta no espaço, tempo e espaço de velocidades para um gás monoatômico (Equação de Boltzmann), e como é possível relacionar esse comportamento com as equações de conservação do contínuo (análise de Chapman-Enskog). É importante ter em mente que todos esses conceitos foram desenvolvidos a partir de funções contínuas no tempo, espaço e espaço de velocidades, levando em conta as hipóteses para um gás pouco denso.

A partir da próxima seção, será apresentada uma breve revisão de como essas equações podem ser utilizadas para resolver numericamente as equações de conservação de massa e quantidade de movimento, que regem o comportamento de gases e fluidos (problemas fluidodinâmicos), e conservação de energia, em sólidos, fluidos ou gases (problemas termofluidodinâmicos).

2.2 O método de Lattice-Boltzmann

Com uma breve noção dos conceitos apresentados na Seção 2.1, pode-se mostrar com um pouco mais de clareza os conceitos numéricos do Método de Lattice-Boltzmann (MLB), também conhecido na literatura nacional por Método de Boltzmann em rede ou Método do Reticulado de Boltzmann. O objetivo nessa seção é apresentar as ideias e ferramentas que são utilizadas para tornar possível a implementação numérica, apontando os trabalhos da literatura, onde os detalhes matemáticos podem ser vistos com mais profundidade.

A equação de Boltzmann, como visto na seção anterior, descreve o comportamento da função de distribuição f , a qual depende das coordenadas espaciais, $\mathbf{x}$, temporal t e do espaço de velocidades $\boldsymbol{\xi}$. Já nesse ponto, pode-se notar que a implementação numérica deve lidar com uma discretização adequada em todas essas coordenadas. Esquemáticamente, já conseguimos esboçar um caminho que deve ser seguido para transformar a equação de Boltzmann em uma equação discreta, possível de ser implementada em um programa de computador, exibido na Figura 2.

Figura 2: Diagrama esquemático dos passos necessários para implementação numérica.

Fonte: Elaborado pelo autor.

2.2.1 Discretização no espaço de velocidades

A discretização no espaço de velocidades é uma das partes que envolve diferentes técnicas matemáticas interessantes, cujos desenvolvimentos e provas formais de todos os passos que

comprovam sua veracidade são muito extensos. Por essa razão, priorizou-se a apresentação das ferramentas, o motivo de seu uso e como ela pode ser utilizada para chegar ao objetivo final dessa subseção, que é a discretização no espaço de velocidades.

De forma simplificada, podemos separar a discretização do espaço de velocidades em dois passos. O primeiro deles se resume em conseguir representar a função de distribuição f e a função de equilíbrio f^{eq} através de uma série de funções, com características conhecidas e que sejam mais simples para se realizar operações, como por exemplo, uma série de polinômios. Nessa etapa, duas ferramentas podem ser citadas como as mais comuns na literatura. O método mais simples é através de uma expansão por série de Taylor na variável da velocidade média $\mathbf{u}$, até termos de ordem $O(\mathbf{u}^2)$ (HE; LUO, 1997). Esse método é conhecido como expansão de Mach.

O segundo método é expandir as funções f e f^{eq} em uma série de polinômios multidimensionais de Hermite (SHAN; YUAN; CHEN, 2006). Nessa abordagem, o objetivo é escrever as funções de interesse de acordo com uma base ortogonal de polinômios em todo o conjunto dos números reais, conhecidos como polinômios de Hermite. A ortogonalidade da série infinita de polinômios se mostra uma grande vantagem, facilitando os cálculos dos momentos das funções, que representam as variáveis de interesse (densidade, quantidade de movimento e energia). Embora a série ortogonal seja infinita, o que significa que para representarmos de maneira exata a função nessa base de funções seriam necessários infinitos termos, é possível mostrar que com apenas os três primeiros termos da série, consegue-se manter a conservação dos três primeiros momentos de f e f^{eq} , o que já é suficiente para recuperar as equações de Navier-Stokes.

Ambos métodos resultam no mesmo formato de equações discretizadas, quando o objetivo é recuperar as equações de Navier-Stokes. No entanto, para recuperar modelos mais complexos, como por exemplo as equações de Navier-Stokes-Fourier ou o modelo de Burnett, a abordagem utilizando os polinômios de Hermite tem se mostrado uma ferramenta mais adequada. No trabalho presente, inicialmente, focaremos nas equações de Navier-Stokes, e por simplicidade, seguiremos pelo método da Expansão de Mach. A abordagem por polinômios de Hermite pode ser vista no trabalho de Shan, Yuan e Chen (2006), e também em Krüger et al. (2017).

2.2.1.1 Expansão de Mach

Pelo método de expansão de Mach, tomamos a função de equilíbrio:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, |\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}|, t) = \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{D/2} \exp \left(-(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 / 2RT \right) \quad (2.21)$$

sendo D o número de dimensões consideradas no problema. É possível mostrar que, expandindo o termo $(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2$, e aplicando uma expansão em série de Taylor nos termos relacionados à velocidade média $\mathbf{u}$, obtém-se o seguinte resultado:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp \left(-\boldsymbol{\xi}^2 / 2RT \right) \left[1 + \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u}}{RT} + \frac{1}{2} \left(\frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u}}{RT} \right)^2 - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right]. \quad (2.22)$$

Os termos de ordem $O(\mathbf{u}^3)$ podem ser ignorados para escoamentos com número de Mach $Ma \ll 1$ (HE; LUO, 1997), o que é uma condição comumente obtida em escoamentos incompressíveis.

Note que f^{eq} na Equação (2.22) ainda é contínua em todas as coordenadas (temporal, espaço de velocidades e de configuração). O resultado obtido é apenas uma forma de aproximar a função de equilíbrio até um polinômio de segundo grau em $\mathbf{u}$.

2.2.1.2 Quadratura de Gauss-Hermite

A segunda parte da discretização no espaço de velocidades se baseia no fato de que o interesse final está no cálculo dos momentos até ordem 2 das funções f e f^{eq} . Matematicamente, os momentos são definidos por integrais no espaço de velocidades, como mostrado da Equação (2.1) até Equação (2.3). Além disso, como já mencionado, do estudo das colisões binárias na Teoria Cinética dos Gases, é possível mostrar que o termo de colisão é conservativo, o que implica que os momentos de ordem 0, 1 e 2 são iguais para f e f^{eq} .

Dado o panorama geral, essa etapa da discretização pode ser resolvida através de uma ferramenta matemática muito interessante no cálculo de integrais: a Quadratura de Gauss-Hermite. Resumindo em poucas palavras, a quadratura de Gauss é uma técnica matemática que permite escolher, de uma forma adequada, n pontos do domínio, e atribuindo pesos relacionados a cada um desses pontos, consegue-se calcular de forma exata a integral de polinômios de grau até $2n - 1$. A quadratura de Gauss-Hermite é o uso dessa ideia para integrais específicas, que possuem o seguinte formato:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} f(\xi) d\xi, \quad (2.23)$$

sendo $f(\xi)$ a função de interesse a ser integrada.

Esse formato é exatamente o que obtivemos da etapa anterior de aproximação de f^{eq} , uma função exponencial multiplicado por um polinômio de ordem 2. Assim, a quadratura de Gauss-Hermite permite calcular a integral pela seguinte expressão:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} f(\xi) d\xi \approx \sum_i^n w_i f(\xi_i), \quad (2.24)$$

em que w_i são os pesos associados. Os valores dos pontos da abscissa ξ_i e os pesos w_i estão relacionados aos polinômios de Hermite nessa quadratura (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1964). Pensando em um caso unidimensional, para o cálculo do momento de segunda ordem das funções de distribuição, em que temos a integral de um polinômio de quarto grau, pode-se fazer a integral de forma exata com apenas três pontos do domínio. Os casos bi e tri-dimensionais podem ser obtidos através de um produto tensorial do caso unidimensional, e dessa forma, seriam necessários 9 e 27 pontos, respectivamente.

Dois detalhes nesse passo são importantes de serem comentados. O primeiro deles é que o termo exponencial da equação depende da temperatura local. Esse fato é um dos impasses

inerentes ao método, e implicaria que, a cada instante de tempo, teríamos diferentes pontos do domínio do espaço de velocidade a serem utilizados. Para eliminar essa dependência da temperatura, utiliza-se a hipótese isotérmica, ou seja, assume-se uma temperatura de referência conveniente (SHAN; YUAN; CHEN, 2006). Com isso, consegue-se fixar os pontos de interesse para todos os instantes de tempo. A contrapartida é que essa técnica acaba deteriorando o significado do momento de ordem 2, e a equação de conservação de energia não é mais obtida por esse método. Por essa razão, uma abordagem diferente deve ser utilizada para a equação de conservação de energia, que serão comentadas em uma seção posterior. No entanto, a hipótese isotérmica mostra-se adequada para recuperar as equações de Navier-Stokes.

O segundo detalhe importante de ser comentado é que os pontos da abcissa de interesse obtidos da quadratura possuem muitos valores múltiplos de $\sqrt{3}$. Assim, é muito comum a velocidade de partícula ξ ser reescalada para $c_i = \xi_i/\sqrt{3}$. Com isso, é possível mostrar que a função de equilíbrio discretizada no espaço de velocidades é dada por:

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{c_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta (c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} \right), \quad (2.25)$$

em que c_s é a velocidade do som no *lattice*. Para a função de distribuição f , é possível definir a função discretizada f_i :

$$f_i(\mathbf{x}, t) = w_i \sqrt{2\pi} e_i^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i, t), \quad (2.26)$$

de forma que a quadratura de Gauss-Hermite é satisfeita. Com isso, garante-se a discretização da função discretizada f no espaço de velocidades de forma coerente com o número de pontos utilizados na discretização no espaço de velocidades f^{eq} .

2.2.1.3 Equação de Lattice-Boltzmann discretizada no espaço de velocidades

Após a discretização, obtivemos q funções de equilíbrio f_i^{eq} e de distribuição f_i , cada uma relacionadas a uma velocidade discreta c_i . Note que ainda não foi discutido a discretização no espaço-tempo, de forma que apenas o espaço de velocidades foi discretizado. Com isso, podemos escrever o conjunto de equações discretas de Boltzmann:

$$\partial_t f_i + c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i = \Omega(f_i), \quad i = 1, \dots, q. \quad (2.27)$$

em que foi utilizada a notação simplificada $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$ e $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$.

Os momentos macroscópicos podem ser recuperados através:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}, \\ \rho \mathbf{u} &= \sum_i f_i \mathbf{c}_i = \sum_i f_i^{eq} \mathbf{c}_i. \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.2.2 Conjuntos de velocidades

Os conjuntos de velocidades são comumente denominados por $DdQq$, em que d indica o número de dimensões do problema e q , o número de pontos no espaço de velocidades utilizados

no método. Por exemplo, os conjuntos descritos obtidos através da quadratura de Gauss-Hermite uni-, bi- e tridimensionais são conhecidos na literatura, respectivamente, por D1Q3, D2Q9 e D3Q27.

No entanto, a quadratura de Gauss-Hermite não é o único método de se obter um conjunto de velocidades. Além de métodos como produto tensorial de *lattices* para obter conjuntos em mais dimensões ou projeções de *lattices* de dimensões maiores para obter conjuntos em menores dimensões (KRÜGER et al., 2017), existe uma série de requisitos que um conjunto de velocidades deve cumprir, relacionados à conservação de massa e quantidade de movimento, e a isotropia rotacional (FRISCH; HASSLACHER; POMEAU, 1986). Para se resolver as equações de Navier-Stokes, esses requisitos se traduzem matematicamente em que os momentos dos pesos w_i até a quinta ordem sejam isotrópicos, o que é obtido através das condições apresentadas na Equação (2.29).

$$\begin{aligned}
 w_i &> 0 \quad \forall i, \\
 \sum_i w_i &= 1, \\
 \sum_i w_i c_{i\alpha} &= 0, \\
 \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta}, \\
 \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} &= 0, \\
 \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\mu} &= c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\mu} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma}), \\
 \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\mu} c_{i\nu} &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

Para problemas de advecção-difusão, por exemplo, as 4 primeiras condições são suficientes para recuperar as equações de conservação necessárias. Para o conjunto de equações Navier-Stokes-Fourier, que incluem a equação de energia, há mais restrições, pois momentos de ordem maiores devem ser resolvidos. Nesse caso, pode-se utilizar *lattices* expandidos, com maior número de velocidades discretas (WOLF-GLADROW, 2004).

Dentre os conjuntos de velocidades ou *lattices* mais utilizados estão o D1Q3, D2Q9 para simulações 1D e 2D. Para problemas 3D, os mais comuns são D3Q15, D3Q19 e D3Q27. Esses conjuntos estão representados na Figura 3. Uma prática comum nas simulações com MLB é adimensionalizar o problema de forma que os incrementos adimensionais $\Delta x = \Delta t = 1$. Dessa forma, o conjunto de velocidades podem ser representados por vetores unitários. O valor dos pesos e os vetores dos conjuntos mais comuns estão resumidos na Tabela 1.

Na literatura, é comum ver diferentes sistemas de numeração para o conjunto de velocidades. Dentre os mais utilizados, são as numerações de 0 a $q - 1$ ou 1 a q . Nesse trabalho,

Tabela 1: Conjuntos de velocidades para simulação de problemas uni-, bi- e tridimensionais, e suas propriedades.

Notation	Velocities c_i	Number	Length $ c_i $	Weight w_i
D1Q3	(0)	1	0	2/3
	(± 1)	2	1	1/6
D2Q9	(0, 0)	1	0	4/9
	($\pm 1, 0$), (0, ± 1)	4	1	1/9
	($\pm 1, \pm 1$)	4	$\sqrt{2}$	1/36
D3Q15	(0, 0, 0)	1	0	2/9
	($\pm 1, 0, 0$), (0, $\pm 1, 0$), (0, 0, ± 1)	6	1	1/9
	($\pm 1, \pm 1, \pm 1$)	8	$\sqrt{3}$	1/72
D3Q19	(0, 0, 0)	1	0	1/3
	($\pm 1, 0, 0$), (0, $\pm 1, 0$), (0, 0, ± 1)	6	1	1/18
	($\pm 1, \pm 1, 0$), ($\pm 1, 0, \pm 1$), (0, $\pm 1, \pm 1$)	12	$\sqrt{2}$	1/36
D3Q27	(0, 0, 0)	1	0	8/27
	($\pm 1, 0, 0$), (0, $\pm 1, 0$), (0, 0, ± 1)	6	1	2/27
	($\pm 1, \pm 1, 0$), ($\pm 1, 0, \pm 1$), (0, $\pm 1, \pm 1$)	12	$\sqrt{2}$	1/54
	($\pm 1, \pm 1, \pm 1$)	8	$\sqrt{3}$	1/216

Fonte: Krüger et al. (2017, p. 88)

Figura 3: Representação esquemática dos principais conjuntos de velocidades utilizados para simulação de problemas hidrodinâmicos.

Fonte: Krüger et al. (2017, p. 78)

optou-se pela nomenclatura exibida na Figura 3.

2.2.3 Discretização no espaço-tempo

O último passo para a discretização em todas as coordenadas, no MLB tradicional, é a discretização no espaço de configuração e no tempo. Aqui, mostraremos a ideia dessas duas discretizações numa mesma etapa, devido à técnica numérica para a sua resolução. No entanto, é importante manter em mente que esse conjunto de equações pode se resolvido por outras técnicas tradicionais, como diferenças finitas (MEI; SHYY, 1998), volumes finitos (XI; PENG; CHOU, 1999), elementos finitos (DIVO; KASSAB, 2007).

Retomando a equação de Boltzmann discretizada na velocidade (Equação (2.27)), podemos reescrever o lado esquerdo como um diferencial total, através de uma parametrização $f_i = f_i(x(\zeta), t(\zeta))$. Essa curva parametrizada é conhecida como a curva característica da equação, que dá o nome à técnica: Método das Características. Assim, reescrevendo a Equação (2.27):

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right) \frac{dt}{d\zeta} + \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} \right) \frac{dx_\alpha}{d\zeta} = \Omega_i, \quad (2.30)$$

sendo que para manter a igualdade com a Equação (2.27), devemos ter:

$$\frac{dt}{d\zeta} = 1, \quad \frac{dx_\alpha}{d\zeta} = c_{i\alpha}, \quad (2.31)$$

Com isso, podemos integrar a equação ao longo das linhas características que passam por um ponto qualquer x, t . Do Teorema Fundamental do Cálculo, sabemos que o lado esquerdo é integrado corretamente. Assim, obtemos:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \int_t^{t+\Delta t} \Omega_i(\mathbf{x}(\zeta), t(\zeta)) d\zeta. \quad (2.32)$$

É interessante salientar que, como discutido anteriormente, as velocidades discretas c_i dependem de uma temperatura de referência conveniente. No método tradicional, essas velocidades são escolhidas de forma que sejam múltiplos inteiros da relação do incremento temporal e espacial ($c_i = \Delta x / \Delta t$). Com isso, garante-se que a cada incremento no tempo, as populações f_i deslocam-se exatamente para os nós adjacentes no espaço.

Para a integral do lado direito, os dois métodos mais comuns utilizados na literatura são a integração numérica via regra dos retângulos (esquema de primeira ordem) e via regra trapezoidal (esquema de segunda ordem). Os detalhes matemáticos podem ser vistos em Krüger et al. (2017).

O interessante no esquema de segunda ordem é que utilizando uma transformação de variáveis $\bar{f}_i = f_i - \frac{\Delta t}{2} \Omega_i$, é possível se livrar do caráter implícito da equação resultante, e obter uma equação explícita:

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) + \Delta t \bar{\Omega}_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.33)$$

sendo $\sum \bar{f}_i = \sum f_i = \rho$, e $\sum \mathbf{c}_i \bar{f}_i = \sum \mathbf{c}_i f_i = \rho \mathbf{u}$. Utilizando o operador de colisão de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) (BHATNAGAR; GROSS; KROOK, 1954), obtemos o método

tradicional de Lattice-Boltzmann, também chamado por método LBGK:

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\bar{\tau}} (\bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (2.34)$$

sendo o tempo de relaxação também redefinido $\bar{\tau} = \tau + \Delta t/2$, em que $\bar{\tau}/\Delta t$ é denominado por muitos autores como o tempo de relaxação adimensional. No trabalho presente, optou-se sempre por utilizar um esquema de segunda ordem, de forma que a variável $\bar{f}$ será escrita por vezes apenas como f por simplicidade.

Embora o operador de colisão BGK seja muito comum, é válido ressaltar que ele não é o único possível. Por apresentar apenas um tempo de relaxação τ , o operador BGK é denominado um operador de colisão com tempo de colisão único (em inglês, *single-relaxation-time (SRT) collision operator*). Na literatura, existem métodos que utilizam dois tempos de relaxação (*two-relaxation-time (TRT) model*) (GINZBURG; VERHAEGHE; D'HUMIERES, 2008) e também múltiplos tempos de relaxação (*multiple-relaxation-time (MRT) model*) (D'HUMIÈRES, 2002). Esses métodos aumentam a complexidade dos cálculos, o que pode deixar os códigos mais difíceis de serem implementados, mas há ganhos significativos em estabilidade e acurácia.

2.2.4 Análise do método LBGK

Nas seções anteriores, mostrou-se algumas ferramentas para obter uma equação discretizada de Boltzmann. No entanto, devemos lembrar que o objetivo é resolver as equações de Navier-Stokes, que regem problemas fluidodinâmicos. Para verificar a conexão da equação discretizada com as variáveis macroscópicas, utiliza-se o mesmo método da teoria cinética, a análise de Champan-Enskog. Resumidamente, além de assumir que a função de distribuição f pode ser escrita como uma expansão em torno da função de equilíbrio, também é uma ideia central que na equação de perturbação resultante, cada escala $O(\epsilon^n)$ representa uma equação própria semi-independente. Os detalhes dessa análise podem ser melhor estudados nos trabalhos de Krüger et al. (2017) e Shan, Yuan e Chen (2006). É possível mostrar que o modelo LBGK recupera as seguintes equações de conservação:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_\gamma (\rho u_\gamma) &= 0, \\ \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) &= -\partial_\alpha p + \partial_\beta [\mu (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)], \end{aligned} \quad (2.35)$$

em que:

$$\begin{aligned} p &= c_s^2 \rho, \\ \nu &= \frac{\mu}{\rho} = c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right), \\ \eta_B &= -\frac{2\mu}{3}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

É importante comentar que para se chegar nesse resultado, os termos relativos $O(\mathbf{u}^3)$ são desprezados. De acordo com Latt (2007), esses erros, denominados erros de compressibilidade, são desprezíveis para simulações com número de Mach muito menor que 1 ($Ma \ll 1$).

2.2.5 Influência de campos externos

Campos de força externos são muito comuns e possuem um papel importante em problemas fluidodinâmicos. Por exemplo, podemos citar um exemplo clássico da densidade de força $\mathbf{F}_g$ que influencia as equações de Navier-Stokes quando há presença de um campo gravitacional $\mathbf{F}_g = \rho \mathbf{g}$. A influência de campos externos, em problemas de escoamentos de fluidos, é comumente encarada como uma densidade de força, ou força volumétrica, uma vez que a equação de conservação leva em conta uma densidade de quantidade de movimento (ou quantidade de movimento volumétrica). Assim, as forças podem ser obtidas por integração de tensões superficiais ou de forças volumétricas. Analisando a equação em termos matemáticos, as densidades de forças podem ser encaradas como termos fontes de quantidade de movimento volumétrico (KRÜGER et al., 2017).

Vários fenômenos hidrodinâmicos podem ser estudados considerando campos de forças externas, como as instabilidades de Rayleigh-Bénard ou de Rayleigh-Taylor (relacionadas ao campo gravitacional), ondas em escoamentos com superfícies livres, fluidos em referenciais rotativos, fluidos com partículas magnéticas ou carregadas que sofrem influência de campos eletromagnéticos externos (KRÜGER et al., 2017). Além disso, há também técnicas de condições de contorno que são implementadas, simulando a presença de um campo de força para representar uma interação fluido-estrutura. Também, pode-se adicionar efeitos interfaciais que existem em escoamentos multifásicos através de uma densidade de força.

Existem diversos esquemas para adicionar a influência de um campo externo. O trabalho de Huang, Krafczyk e Lu (2011) discute a implementação de 5 autores diferentes. A implementação do termo de força pode ser estudada seguindo os mesmos passos discutidos anteriormente: discretização no espaço de velocidades, no espaço-tempo. Shan, Yuan e Chen (2006) realiza esses passos através da projeção dos termos de forças em polinômios de Hermite, e Guo, Zheng e Shi (2002) mostra o mesmo resultado analisando as restrições que devem ser obedecidas para se recuperar a equação de conservação de quantidade de movimento corretamente.

É possível mostrar que a equação discretizada com termos de forças, considerando o operador de colisão BGK é dada por:

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\bar{\tau}} (\bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t \left(1 - \frac{\Delta t}{2\bar{\tau}} \right) F_i, \quad (2.37)$$

em que a troca de variável $\bar{f}_i = f_i - \frac{\Delta t}{2} (\Omega_i + F_i)$ é necessária para eliminar o caráter implícito do esquema de segunda ordem. O termo F_i é relacionado ao campo externo $\mathbf{F} = \rho \mathbf{a}$, através da Equação (2.38):

$$F_i = w_i \rho \left(\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{a}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{a})(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})}{c_s^4} - \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right). \quad (2.38)$$

Os campos de densidade e densidade de quantidade de movimento podem ser avaliados

pela Equação (2.39):

$$\rho = \sum_i \bar{f}_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i \bar{f}_i + \frac{\Delta t}{2} \rho \mathbf{a}. \quad (2.39)$$

2.3 Soluções para a equação de conservação de energia

Embora o MLB tem conseguido resolver numericamente diferentes tipos de problemas fluidodinâmicos, sua aplicação para problemas térmicos ainda apresenta algumas dificuldades. Em problemas envolvendo transferência de calor, a aplicação do método de Lattice-Boltzmann térmico (TMLB) tem apresentado problemas com instabilidade e acurácia, reduzindo a gama do número de Reynolds e Prandtl que podem ser simulados. No entanto, muitas pesquisas tem sido feitas para contornar esses problemas, utilizando diferentes abordagens.

As estratégias para se resolver a equação de conservação de energia pode ser dividida em três grupos (LALLEMAND; LUO, 2003). O primeiro grupo pode ser definido por utilizar uma abordagem bem simples, que é considerar a temperatura como um escalar passivo. Ou seja, a temperatura é advectada por um campo de velocidades, e não afeta o campo de densidade ou velocidades. Assim, para solucionar a conservação de energia, são consideradas a evolução de duas funções de distribuição: uma que simula o comportamento das equações de Navier-Stokes e a outra para a conservação de energia. Embora esse seja o método mais simples, além de sofrer com instabilidades, alguns autores não consideram essa estratégia muito eficiente, pois é possível resolver a evolução no tempo de um campo escalar de maneira eficiente sem ser necessário utilizar conjuntos de velocidades discretizadas de partículas. O segundo grupo engloba os métodos que resolvem as equações compressíveis de Euler ou as equações de Navier-Stokes-Fourier, utilizando interpolação para a advecção, incluindo esquemas de diferenças finitas ou um conjunto de velocidades suficiente para recuperar as equações de conservação de energia. O terceiro grupo do TMLB consiste em resolver a evolução de uma função de distribuição relacionada ao campo de energia diretamente, ao invés de temperaturas. Nesse grupo, podemos citar o trabalho de He, Chen e Doolen (1998), que resolve uma função de distribuição relacionada à energia interna, incluindo a dissipação viscosa e o trabalho devido à pressão por termos fontes. Guo et al. (2007) apresenta um modelo semelhante, mas baseado em energia total ao invés de energia interna. Também Chen, Luo e Zheng (2012) apresenta um método baseado no campo de entalpia total.

No trabalho presente, os estudos se focaram no modelo apresentado por Guo et al. (2007), que recupera as equações de conservação de energia total. Aqui, apresentaremos os principais conceitos para obter o método discretizado. O modelo se inicia no espaço contínuo de velocidades (ξ), tempo (t) e de coordenadas ($\mathbf{x}$), com a introdução de uma função de distribuição relacionada a energia total:

$$h = \frac{\xi^2}{2} f, \quad (2.40)$$

de tal forma que a energia total pode ser calculada por:

$$\rho E = \int h d\xi. \quad (2.41)$$

A evolução da função de distribuição h pode ser obtida reescrevendo a Equação (2.8) em função de h :

$$\partial_t h + \xi_\alpha \cdot \partial_\alpha h + a_\alpha \left(\frac{\partial h}{\partial \xi_\alpha} - \xi_\alpha f \right) = \Omega_h, \quad (2.42)$$

em que $\Omega_h = \xi^2 \Omega_f / 2$ é o operador de colisão que caracteriza a energia durante as colisões entre as partículas, e $\mathbf{a}$ é a aceleração causada por um campo de forças externo.

Especificar o operador de colisão Ω_h corretamente é o ponto chave do modelo baseado na energia total. O operador colisão pode ser dividido em duas partes baseado nas parcelas de contribuição da energia interna e energia mecânica:

$$\Omega_h = \Omega_{int} + \Omega_m, \quad (2.43)$$

em que Ω_{int} é relacionado à contribuição da energia interna e Ω_m da energia mecânica. De acordo com Woods (1993), Ω_m está relacionado com a escala de tempo do operador colisão hidrodinâmico Ω_f . Considerando o operador de colisão BGK, a contribuição mecânica para a energia total pode ser aproximada por:

$$\Omega_m = -\frac{Z}{\tau_f} (f - f^{eq}), \quad (2.44)$$

em que $Z = \xi \cdot \mathbf{u} - \mathbf{u}^2/2$ e τ_f o parâmetro de relaxação relacionado à função de distribuição f . Da mesma forma, a contribuição da energia interna pode ser obtida em um modelo baseado no colisor BGK:

$$\Omega_{int} = -\frac{1}{\tau_h} [(h - h^{eq}) - Z (f - f^{eq})], \quad (2.45)$$

em que τ_h é o tempo de relaxação que caracteriza a mudança da energia interna durante a colisão de partículas, e $h^{eq} = \xi^2 f^{eq} / 2$. Dessa forma, o operador colisão relacionado à energia total Ω_h é dado por:

$$\Omega_h = -\frac{1}{\tau_h} (h - h^{eq}) + \frac{Z}{\tau_{hf}} (f - f^{eq}), \quad (2.46)$$

sendo

$$\frac{1}{\tau_{hf}} = \frac{1}{\tau_h} - \frac{1}{\tau_f}. \quad (2.47)$$

Com isso, obtem-se a equação que rege a evolução no tempo da função de distribuição h :

$$\partial_t h + \xi_\alpha \cdot \partial_\alpha h + a_\alpha \left(\frac{\partial h}{\partial \xi_\alpha} - \xi_\alpha f \right) = -\frac{1}{\tau_h} (h - h^{eq}) + \frac{Z}{\tau_{hf}} (f - f^{eq}), \quad (2.48)$$

sendo a evolução de f dada pela Equação (2.8). É possível mostrar que esses modelos contínuos conseguem recuperar as equações contínuas de conservação de massa, quantidade de movimento

e energia. A partir do modelo contínuo, realiza-se a discretização no espaço de velocidades, no espaço e tempo através de técnicas já comentadas nas seções anteriores. Os detalhes podem ser vistos no trabalho original de [Guo et al. \(2007\)](#). O modelo discretizado dessa equação é dado por:

$$\begin{aligned} \bar{h}_i(\mathbf{x} + c_i \Delta t, t + \Delta t) - \bar{h}_i(\mathbf{x}, t) = & -\omega_h (\bar{h}_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \\ & Z_i(\omega_h - \omega_f) \left(\bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + F_i \frac{\Delta t}{2} \right) \Delta t + \\ & \Delta t \left(1 - \frac{\omega_h}{2} \right) w_i \frac{\rho E \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{a}}{c_s^2} + \\ & \Delta t \left(1 - \frac{\omega_h}{2} \right) \left[\left(1 - \frac{\omega_f}{2} \right) \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\omega_f}{2} f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \left(1 - \frac{\omega_f}{2} \right) F_i \Delta t / 2 \right] \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{a}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

em que $\omega_f = \frac{\Delta t}{\bar{\tau}_f}$ e $\omega_h = \frac{\Delta t}{\bar{\tau}_h}$ são os inversos dos parâmetros de relaxação adimensionais relacionados às funções de distribuição f e h . A função de equilíbrio discretizada h^{eq} é dada por:

$$h_i^{eq} = w_i \rho c_s^2 \left[\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \left(\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right)^2 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i}{c_s^2} - D \right) \right] + E f_i^{eq}, \quad (2.50)$$

sendo D , o número de dimensões considerado no problema e o conjunto de velocidades $\mathbf{c}_i$ e os pesos w_i podem corresponder a um dos conjuntos D1Q3, D2Q9 e D3Q27, descritos na Figura 2. O campo de densidade de energia total pode ser avaliado localmente através da Equação (2.51):

$$\rho E = \sum_i \bar{h}_i + \frac{\Delta t}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{a}. \quad (2.51)$$

Através da análise de Chapman-Enskog, é possível mostrar que esse modelo, juntamente com o modelo hidrodinâmico, reproduz a equação de conservação de energia:

$$\partial_t(\rho E) + \nabla \cdot [(p + \rho E) \mathbf{u}] = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{a}, \quad (2.52)$$

em que o tensor de tensões viscosas $\sigma'_{\alpha\beta} = \mu(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)$ e $p = \rho c_s^2$. Os coeficientes de transporte de energia térmica λ e de viscosidade μ são relacionados com os parâmetros de relaxação por:

$$\begin{aligned} \lambda &= \gamma c_p (\bar{\tau}_h - \Delta t/2) \rho c_s^2, \\ \mu &= \rho c_s^2 (\bar{\tau}_f - \Delta t/2), \end{aligned} \quad (2.53)$$

sendo γ o coeficiente de expansão adiabática e c_p , o calor específico a pressão constante. Dessa forma, para simular um escoamento dadas as suas propriedades físicas, basta ajustar os parâmetros de relaxação de forma a obter os coeficientes de transporte físicos conhecidos.

3 METODOLOGIA

Nesse capítulo, serão apresentadas as principais técnicas de implementação do método de Lattice-Boltzmann, com ênfase para as ferramentas que foram utilizadas para os resultados obtidos no trabalho presente.

3.1 Algoritmo

Para facilitar a implementação computacional do MLB é muito comum a criação de dois passos centrais no algoritmo mais utilizado: a colisão (*collision step*, ou também chamado de relaxação, em inglês, *relaxation step*) e propagação (*streaming step*). Esses passos são oriundos dos modelos discretizados. Matematicamente, o passo de colisão é dado por:

$$\begin{aligned}
 f_i^c(\mathbf{x}, t) &= (1 - \omega_f) f_i(\mathbf{x}, t) + \omega_f f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \Delta t \left(1 - \frac{\omega_f}{2}\right) F_i \\
 h_i^c(\mathbf{x}, t) &= (1 - \omega_h) h_i(\mathbf{x}, t) + \omega_h h_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \\
 &Z_i(\omega_h - \omega_f) \left(f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + F_i \frac{\Delta t}{2} \right) \Delta t + \\
 &\Delta t \left(1 - \frac{\omega_h}{2}\right) w_i \frac{\rho E \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{a}}{c_s^2} + \\
 &\Delta t \left(1 - \frac{\omega_h}{2}\right) \left[\left(1 - \frac{\omega_f}{2}\right) f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\omega_f}{2} f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \left(1 - \frac{\omega_f}{2}\right) F_i \Delta t / 2 \right] \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{a},
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

em que f_i^c e h_i^c são os valores das funções de distribuição após o passo de colisão, observado que a notação $\bar{f}_i$ e $\bar{h}_i$ referente à troca de variável para tornar o método de segunda ordem explícito foi substituído por f_i e h_i por facilidade e conveniência. No passo de propagação, os valores das funções colididas são propagados para os nós adjacentes:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^c(\mathbf{x}, t) \tag{3.2}$$

$$h_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = h_i^c(\mathbf{x}, t),$$

Assim, o algoritmo básico do MLB em conjunto com TMLB pode ser resumido em alguns passos:

1. Inicialização das funções $f(\mathbf{x}, t = t_0) = f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, t = 0)$ e $h(\mathbf{x}, t = t_0) = h^{eq}(E, \mathbf{u}, t = 0)$;
2. Realizar o passo de colisão (calcular f_i^c e h_i^c);
3. Fazer a propagação das populações;
4. Aplicar as condições de contorno;

5. Atualizar os campos das variáveis de interesse (ρ , u e E);
6. Calcular as funções de equilíbrio com base nos novos campos;
7. Retornar ao passo 2.

A inicialização correta das simulações das funções de distribuição é objeto de estudo de algumas pesquisas. Os trabalhos de [Caiazzo \(2005\)](#) e [Huang, Wu e Yong \(2015\)](#) apresentam discussões de diferentes técnicas de inicialização e a implicação de uma inicialização de uma técnica consistente. Porém, esses efeitos apresentam grande importância em escoamentos transientes. No trabalho presente, a inicialização utilizando a função de equilíbrio e as condições iniciais do problema se mostrou suficiente para a resolução numérica dos problemas em regime permanente, e mesmo para o problema transiente unidimensional estudado.

3.2 Abordagens

A implementação das condições de contorno podem ser divididas em dois grupos diferentes: a abordagem *Link-wise* e *Wet-Node* ([KRÜGER et al., 2017](#)). Na interpretação *Link-wise*, há uma pequena diferença entre o domínio físico e domínio computacional, de forma que os nós de fronteira, geralmente, podem ser considerados deslocados $\Delta x/2$ da fronteira física ([GINZBURG; D'HUMIERES, 2003](#)). Esse tipo de abordagem é utilizado pelas condições de contorno conhecidas na literatura como *bounce back*, em que é considerado que as populações são refletidas pelas fronteiras sólidas. Na abordagem *Wet-Node*, o domínio físico coincide com o domínio computacional, de forma que os nós de fronteira são considerados infinitamente próximos às paredes, e são regidos pela mesmas equações dos nós interiores. Essa diferenciação nas abordagens, além de facilitar o entendimento das ideias que estão por trás da implementação, também influencia no cálculo do número de nós que serão utilizados. Na Figura 4, podemos ver que para um mesmo domínio computacional, o número de nós, levando em conta cada uma das interpretações, é distinto.

Figura 4: Duas interpretações possíveis para o mesmo domínio (a) *link-wise* e (b) *wet-node*.

Fonte: [Krüger et al. \(2017\)](#)

3.3 Condições de contorno

Uma das dificuldades que emergem na aplicação das condições de contorno no MLB é que elas devem ser implementadas a nível das funções de distribuição, de forma que não existe uma maneira única para replicar as condições de contorno macroscópicas desejadas. Com isso, há diversos estudos com diferentes técnicas de implementação das condições de contorno. No trabalho presente, serão apresentadas algumas das técnicas mais recorrentes na literatura, com foco na interpretação *wet-node*, utilizada na solução numérica dos problemas abordados em seções posteriores.

3.3.1 Condições periódicas

As condições de contorno periódicas possuem aplicação em diferentes situações. Por exemplo, quando um escoamento apresenta um padrão que se repete com ciclos bem definidos, é possível isolar apenas um ciclo de repetição, e estudá-lo utilizando esse tipo de condição de contorno. A ideia básica é que o fluido que deixa a fronteira de saída é restituído imediatamente na fronteira de entrada. Outra situação em que esse tipo de condição de contorno pode ser útil são escoamentos em tubos em que se deseja assegurar a condição de regime plenamente desenvolvido. Também, condições de contorno periódicas podem ser utilizadas para a implementação de escoamentos bidimensionais a partir de códigos originalmente implementados para escoamentos tridimensionais (KRÜGER et al., 2017).

A aplicação da condição no MLB é dada pela Equação (3.3):

$$f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i^c(\mathbf{x} + \mathbf{L} - \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t), \quad (3.3)$$

em que $L = N\Delta x$. A ideia básica é que as populações colididas que sairiam do domínio no passo de propagação são, na verdade, propagadas entrando na fronteira diametralmente oposta à fronteira por onde deveriam sair.

3.3.2 Esquema de equilíbrio

O esquema de equilíbrio é uma das condições de contorno mais simples de serem implementadas. Matematicamente, sua formulação é dada:

$$f_i(\mathbf{x}_b, t) = f_i^{eq}(\rho_w, \mathbf{u}_w), \quad (3.4)$$

em que $\mathbf{x}_b$ refere-se aos nós de fronteira, e o subscrito w refere-se às quantidades conhecidas na parede. Basicamente, no esquema de equilíbrio, todas as populações nos nós de fronteira são substituídas pelo cálculo da função de equilíbrio com base nas propriedades conhecidas nas fronteiras, que se quer impor na simulação.

Apesar de ser um método simples e de apresentar uma boa estabilidade, o esquema de equilíbrio só é totalmente compatível com os nós do interior do domínio quando $\tau = \Delta t$, o que acaba reduzindo a ordem de acurácia da solução quando valores diferentes do tempo de relaxação são utilizados (GINZBURG, 2012).

3.3.3 Extrapolação de não-equilíbrio

Uma aprimoração do esquema de equilíbrio foi proposto por Zhao-Li, Chu-Guang e Bao-Chang (2002). As funções são substituídas após o passo de propagação de acordo com a seguinte formulação:

$$f_i(\mathbf{x}_b, t) = f_i^{eq}(\rho_w, \mathbf{u}_w) + (f_i(\mathbf{x}_f, t) - f_i^{eq}(\rho_f, \mathbf{u}_f)), \quad (3.5)$$

sendo que a parte de não-equilíbrio é extrapolada do nó adjacente no interior do domínio na posição $\mathbf{x}_f$, na direção do vetor normal à fronteira. A extrapolação da função de não-equilíbrio do nó adjacente garante uma acurácia de segunda ordem ao método (ZHAO-LI; CHU-GUANG; BAO-CHANG, 2002).

Esse tipo de condição também é bastante utilizada em problemas de advecção-difusão utilizando o MLB para fronteiras com temperatura conhecidas, ou mesmo para fronteiras com fluxo de calor conhecido, sendo que nesse caso, é feita uma interpolação para definir a temperatura na parede T_w , que é usada para o cálculo da função de equilíbrio.

3.3.4 Bounce-back de não equilíbrio

O método mais relevante para impor condições de contorno de velocidade e pressão conhecidas em problemas hidrodinâmicos foi originalmente proposto no trabalho de Zou e He (1997). O método de *bounce-back* de não-equilíbrio (NEBB), muitas vezes chamado de condições de *Zou-He*, consegue recuperar soluções macroscópicas locais com terceira ordem de precisão, e isso é um dos motivos do seu destaque.

Diferentemente das condições anteriores, em que todas as populações são substituídas, o *bounce-back* de não-equilíbrio substitui apenas as funções desconhecidas nas fronteiras através da seguinte formulação:

$$f_{\bar{i}}^{neq}(\mathbf{x}_b, t) = f_i^{neq}(\mathbf{x}_b, t), \quad (3.6)$$

em que $\bar{i}$ representa a população na direção do vetor de velocidade $\mathbf{c}_{\bar{i}} = -\mathbf{c}_i$. Nesse trabalho, Zou e He (1997) demonstram a obtenção das equações para o modelo D2Q9 e também para o modelo D3Q15i (incompressível). As discussões nesse trabalho, no caso de velocidades conhecidas nas fronteiras, abordou somente a situação em que há uma entrada de fluido na direção normal à fronteira. No caso em que há também componente transversal à fronteira, deve-se adicionar um termo de correção da quantidade de movimento transversal, proposto por Hecht e Harting (2010), como na Equação (3.7):

$$f_{\bar{i}}^{neq}(\mathbf{x}_b, t) = f_i^{neq}(\mathbf{x}_b, t) - \frac{\mathbf{t} \cdot \mathbf{c}_i}{|\mathbf{c}_i|} N_t, \quad (3.7)$$

em que $\mathbf{t}$ é um vetor unitário tangente à fronteira e N_t um termo de correção na quantidade de movimento transversal.

Como exemplo, será demonstrado como obter as expressões que devem ser aplicadas para uma fronteira superior (Figura 5) para uma velocidade conhecida (condição de *Dirichlet*)

considerando um modelo bidimensional D2Q9. Será considerado que há fluxo transversal e normal à fronteira, de forma que a velocidade conhecida da fronteira tenha componentes $\mathbf{u}_w = (u_{w,x}, u_{w,y})$. O caso tridimensional pode ser verificado no trabalho de [Hecht e Harting \(2010\)](#).

Figura 5: Representação esquemática de uma parede superior coincidente com a direção horizontal das velocidades discretizadas. As populações desconhecidas são representadas por linhas tracejadas, e as conhecidas do passo de propagação, em linhas contínuas.

Fonte: [Krüger et al. \(2017\)](#).

No caso de uma fronteira superior retilínea, as funções desconhecidas são f_4 , f_7 e f_8 . A densidade do nó de fronteira ρ_w pode ser encontrada através do cálculo dos momentos de ordem 0 e da componente y do momento de ordem 1:

$$\begin{cases} \rho_w = \sum_i f_i = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 \\ \rho_w u_{w,y} = \sum_i c_{iy} f_i = (f_2 + f_5 + f_6) - (f_4 + f_7 + f_8), \end{cases} \quad (3.8)$$

em que as componentes das velocidades discretas c_i é unitário. Assim, é possível resolver o sistema dado na Equação (3.8) para encontrar a densidade:

$$\rho_w = \frac{1}{1 + u_{w,y}} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 + f_6)]. \quad (3.9)$$

As funções desconhecidas f_4 , f_7 e f_8 são dadas de acordo com a Equação (3.7):

$$\begin{cases} f_4 = f_2 + (f_4^{eq} - f_2^{eq}) \\ f_7 = f_5 + (f_7^{eq} - f_5^{eq}) - N_x \\ f_8 = f_6 + (f_8^{eq} - f_6^{eq}) + N_x. \end{cases} \quad (3.10)$$

Avaliando as funções de equilíbrio relacionadas às velocidades das fronteiras conhecidas

pela Equação (2.25), é possível reescrever o sistema dado na Equação (3.10) por:

$$\begin{cases} f_4 = f_2 - \frac{2}{3}\rho_w u_{w,y} \\ f_7 = f_5 - \frac{1}{6}\rho_w(u_{w,x} + u_{w,y}) - N_x \\ f_8 = f_6 - \frac{1}{6}\rho_w(-u_{w,x} + u_{w,y}) + N_x. \end{cases} \quad (3.11)$$

Por fim, o termo de correção da quantidade de movimento transversal N_x pode ser encontrado através do cálculo do momento de primeira ordem ao longo da direção tangencial à fronteira, dado pela Equação (3.12):

$$\begin{aligned} \rho_w u_{w,x} &= \sum_i c_{ix} f_i = (f_1 + f_5 + f_8) - (f_3 + f_6 + f_7) \\ &= (f_1 - f_3) - (f_7 - f_5) + (f_8 - f_6) \\ &= (f_1 - f_3) - \frac{1}{3}\rho_w u_{w,x} + 2N_x. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dessa forma, a correção no momento transversal N_x é dada por:

$$N_x = -\frac{1}{2}(f_1 - f_3) + \frac{1}{3}\rho_w u_{w,x}. \quad (3.13)$$

Substituindo esse resultado no sistema exibido na Equação (3.11), chegamos às expressões necessárias às funções desconhecidas para impor a velocidade da fronteira u_w desejada:

$$\begin{aligned} f_4 &= f_2 - \frac{2}{3}\rho_w u_{w,y} \\ f_7 &= f_5 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{2}\rho_w u_{w,x} - \frac{1}{6}\rho_w u_{w,y} \\ f_8 &= f_6 - \frac{1}{2}(f_1 - f_3) + \frac{1}{2}\rho_w u_{w,x} - \frac{1}{6}\rho_w u_{w,y}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

3.4 Unidades de *lattices*

Nas simulações utilizando o MLB, é muito comum utilizar uma mudança de variáveis de forma a simplificar a implementação computacional do método. Quando se faz essa troca de variáveis, os números adimensionais surgem naturalmente, de forma que se consiga resolver uma classe de problemas com o mesmo número de Reynolds, por exemplo. A conversão entre as unidades sempre é feita de forma a obter um incremento espacial e temporal em unidades de *lattices* unitários ($\Delta x^* = \Delta t^* = 1$). A Tabela 2 exibe as variáveis físicas, as variáveis em unidades de *lattices* e os fatores de conversão entre elas, sendo C_l , C_ρ e C_t os fatores de conversão espacial, temporal e de densidade.

Tabela 2: Relação entre as variáveis físicas (1ª linha) e as unidades escritas descritas em unidades de *lattices* (2ª linha)

	[m]	[s]	[m/s]	[kg/m ³]	[m ² /s]	[Pa]
Variável física	x	t	u	ρ	ν	p
Variável <i>lattice</i>	x^*	t^*	u^*	ρ^*	ν^*	p^*
Relação	$\Delta x = \Delta x^* C_l$	$t = t^* C_t$	$u = u^* \frac{C_l}{C_t}$	$\rho = \rho^* C_\rho$	$\nu = \nu^* \frac{C_l}{C_t^2}$	$\Delta p = \Delta p^* \frac{C_t^2 C_\rho}{C_l^2}$

Fonte: Elaborado pelo autor

Da mesma forma, a energia total e a temperatura são adimensionalizadas, levando em conta valores de referência, da seguinte forma:

$$E^* = \frac{E - E_1}{\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)^2}, \quad (3.15)$$

$$\theta = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1},$$

sendo que E_1, T_1, T_2 são valores de referências. Normalmente, em problemas térmicos, as temperaturas de referência estão associadas a fronteiras com velocidade zero (não-deslizamento) e temperaturas distintas (T_{quente} e T_{frio}), de forma que a temperatura adimensional varie entre 0 e 1.

Os fatores de relaxação adimensionais $\tau_f^* = \tau_f / \Delta t$ e $\tau_h^* = \tau_h / \Delta t$ são relacionados com os coeficientes de transporte adimensionais pela Equação (3.16):

$$\nu^* = c_s^{*2} (\tau_f^* - 1/2), \quad (3.16)$$

$$\alpha^* = c_s^{*2} (\tau_h^* - 1/2),$$

em que $\alpha = \alpha^* \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$ é a difusividade térmica, e c_s^{*2} a velocidade do som no *lattice* adimensional, que está relacionada com o passo da discretização no espaço de velocidades. Para os modelos D1Q3, D2Q9 e D3Q27, a velocidade $c_s^{*2} = 1/3$. Dessa forma, escolhido o fator de relaxação adimensional adequado para manter a estabilidade do sistema e o número de pontos no domínio, todas as outras variáveis podem ser encontradas a partir dos parâmetros adimensionais característicos do problema, como o número de Reynolds, Rayleigh, Prandtl e Eckert dados, respectivamente nas Equações (3.17), (3.18), (3.19) e (3.20):

$$Re = \frac{u_c L}{\nu} = \frac{u_c^* L^*}{\nu^*}, \quad (3.17)$$

sendo L o comprimento característico do problema e u_c a velocidade característica do problema,

$$Ra = \frac{g \beta \Delta T L^3}{\alpha \nu} = \frac{g^* \beta^* L^{*3}}{\alpha^* \nu^*}, \quad (3.18)$$

em que $\beta^* = \beta \Delta T$ é o coeficiente de expansão térmica adimensional, e ΔT uma diferença de temperatura característica do problema, podendo ser a diferença entre uma superfície quente e uma fria ($\Delta T = T_h - T_c$), ou entre uma superfície e a temperatura do fluido distante dessa superfície ($\Delta T = T_s - T_\infty$).

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\nu^*}{\alpha^*}, \quad (3.19)$$

$$Ec = \frac{u_c^2}{c_p \Delta T} = \frac{u_c^{*2}}{c_p^*}. \quad (3.20)$$

3.5 Casos numéricos

Discutido a metodologia mais geral de implementação do método de Lattice-Boltzmann, agora será dado um enfoque à metodologia mais específica dos problemas que foram estudados no trabalho presente: problema unidimensional da equação de Burgues viscosa (caso 1), um escoamento de Poiseuille térmico (caso 2), convecção natural em uma cavidade (caso 3), convecção natural, mista e forçada em uma caixa de fluido com uma das fronteiras móvel (caso 4), e convecção forçada em uma cavidade ventilada com uma entrada e saída (caso 5).

3.5.1 Caso 1

As equações de Burgers geralmente aparecem como simplificações de equações governantes de fenômenos físicos, como por exemplo, a equação de conservação de quantidade de movimento de escoamentos. A versão unidimensional, desprezando o gradiente de pressão, pode ser descrita por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (3.21)$$

em que u é a velocidade, x a coordenada espacial, t a coordenada temporal e ν a viscosidade cinemática. A Equação (3.21) é conhecida como Equação Viscosa de Burgers. Para resolvê-la numericamente, foi utilizado um modelo unidimensional D1Q3 com uma modificação proposta para a função de equilíbrio:

$$f_i^{eq} = w_i u \left[1 + \frac{c_i u}{2c_s^2} + \frac{(c_i u)^2}{8c_s^2} - \frac{3}{8} u^2 \right], \quad (3.22)$$

sendo a velocidade do som no *lattice* $c_s^2 = 1/3$, os pesos $w_i = (1/6, 1/6, 2/3)$ e as velocidades $c_i = (1, -1, 0)$. O problema é resolvido numericamente pelo passos de colisão e propagação utilizando o operador BGK, sem a necessidade da inclusão dos termos fontes pois não há campo de forças externas no problema considerado. A viscosidade cinemática é relacionada com o parâmetro de relaxação pela Equação (3.16). Como o problema foi solucionado considerando um problema de advecção-difusão, os valores de velocidade são recuperados pelo momento de ordem 0, $\sum f_i = u$.

As condições de contorno do problema consideradas são dadas na Equação (3.23).

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad t \geq 1, \quad (3.23)$$

e a condição inicial:

$$u(x, 1) = \frac{x}{1 + (1/t_0)^{1/2} \exp\left(\frac{x^2}{4\nu}\right)}, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.24)$$

em que o tempo característico $t_0 = \exp(1/8\nu)$. A solução analítica do problema (GAO; LE; SHI, 2013) é dada por:

$$u(x, t) = \frac{x/t}{1 + (t/t_0)^{1/2} \exp\left(\frac{x^2}{4\nu t}\right)}, \quad t \geq 1, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (3.25)$$

3.5.2 Caso 2

O segundo problema estudado é o escoamento bidimensional em um canal submetido a um campo de força constante $\mathbf{a}$ com direção horizontal, e temperaturas das superfícies inferior e superior do canal sendo mantidas, respectivamente, a temperaturas distintas T_h e T_c , como esquematizado na Figura 6.

Figura 6: Representação esquemática do problema estudado no caso 2 do trabalho presente.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Como o interesse está no escoamento desenvolvido, são utilizadas condições periódicas nas fronteiras verticais do domínio. Para as fronteiras das superfícies superior e inferior, o esquema de extrapolação de não-equilíbrio é utilizada nas funções f e h para garantir a velocidade nula e as temperaturas T_h e T_c . Os resultados numéricos foram obtidos utilizando modelo D2Q9 tanto função de distribuição térmica h quanto para a função hidrodinâmica f . Os valores numéricos podem ser comparados com as soluções analíticas do problema:

$$u(y) = u_0 y^*(1 - y^*), \quad (3.26)$$

$$\theta = y^* + \frac{PrEc}{3} [1 - (1 - 2y^*)^4] . \quad (3.27)$$

em que $y^* = y/H$, sendo H a altura do canal, $u_0 = ah^2/8\nu$ e $\theta = (T - T_c) / (T_h - T_c)$.

3.5.3 Caso 3

Esse caso consiste no estudo de escoamento com convecção natural em uma cavidade quadrada, através do modelo D2Q9 para as funções de distribuição térmica h e hidrodinâmica f . As duas paredes laterais são mantidas a temperaturas distintas T_h e T_c (sendo $T_h > T_c$), enquanto as paredes superior e inferior são adiabáticas, conforme mostrado na Figura 7.

Figura 7: Representação esquemática do escoamento com convecção natural em uma cavidade quadrada, estudado no caso 3.

Fonte: Elaborado pelo autor.

No caso de escoamentos em que a convecção natural é relevante, as forças de empuxo devem ser consideradas. Para escoamentos em que a diferença de temperatura ΔT e de densidade $\Delta\rho$ são pequenas em relação aos valores médios $\bar{T}$ e $\bar{\rho}$, a aproximação de Boussinesq pode ser utilizada para estudar o escoamento (GUO et al., 2007). As propriedades do fluido são consideradas independentes da temperatura, exceto pela densidade, que pode ser encontrada através de uma linearização em torno de valores de referência ρ_0 e T_0 :

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta (T - T_0)] , \quad (3.28)$$

em que β é o coeficiente de expansão térmica. Assim, força gravitacional volumétrica pode ser expressa:

$$\rho g = \rho_0 g - \rho_0 g \beta (T - T_0) , \quad (3.29)$$

em que $\mathbf{g}$ é o vetor de aceleração devido ao campo gravitacional. A constante $\rho_0 \mathbf{g}$ pode ser incluída junto com a pressão na equação de conservação de quantidade de movimento, tornando a força externa efetiva expressa como na Equação (3.30):

$$\rho \mathbf{a} = -\rho_0 \mathbf{g} \beta (T - T_0). \quad (3.30)$$

Com essa abordagem, o campo de pressão modelado pelo modelo térmico de Boltzmann é, na verdade, a pressão dinâmica $p' = p_0 - \rho_0 g y$, sendo g a magnitude da força gravitacional e y a coordenada com sentido oposto ao campo gravitacional. Sendo assim, o trabalho realizado pela pressão leva em conta apenas a parte dinâmica. No entanto, para escoamentos em que o trabalho de compressão pode ser desprezado, que é o caso dos escoamentos estudados, esse tratamento apresenta resultados satisfatórios (GUO et al., 2007). Para assegurar essa condição, é utilizada um número de Eckert da ordem de 10^{-30} .

Em relação às condições de contorno, a extrapolação de não-equilíbrio é utilizada tanto na função f quanto na função h para assegurar as velocidades e temperaturas. No caso das fronteiras adiabáticas, um esquema numérico de primeira ordem é utilizado na variável macroscópica da temperatura para encontrar seus valores nas fronteiras T_b , que são utilizados para o cálculo da função de equilíbrio h^{eq} .

Quanto à implementação do código para esse problema, foram utilizadas três estratégias distintas: a primeira abordagem foi a implementação de um código em série simples (S), de acordo com o algoritmo descrito na Seção 3.1; a segunda estratégia (SI) consiste em utilizar como condição inicial interpolações lineares entre as malhas mais grosseiras convergidas e as malhas mais finas, com o intuito de reduzir o tempo computacional. Esse procedimento é utilizado em técnicas multi-grid, e mostrou-se eficaz também no MLB para redução do tempo computacional (SANDOVAL, 2012). A última estratégia de implementação (P), além de utilizar as interpolações, consiste em reimplementar o problema com um código paralelizado, com o processamento sendo realizado pela GPU (do inglês, *Graphics Processing Unit*) da máquina 2, descrita com mais detalhes na Seção 3.6. A implementação de códigos de MLB paralelizada é objeto de estudo de vários trabalhos (XIAN; TAKAYUKI, 2011; RINALDI et al., 2012; TÖLKE; KRAFCZYK, 2008) com bons resultados na redução de tempo computacional. Nesse trabalho, os códigos foram escritos utilizando CUDA C (do inglês, *Computer Unified Device Architecture*), uma extensão da linguagem C desenvolvida pela Nvidia para computação em paralelo com as placas gráficas dessa marca. As três estratégias serão, respectivamente, identificadas na seção de resultados pelas letras S, SI e P, a fim de facilitar a exibição de gráficos e tabelas.

3.5.4 Caso 4

O quarto problema estudado é baseado no trabalho de Aydm (1999), que é um estudo sobre a convecção mista em uma cavidade quadrada, como mostrado na Figura 8. Nesse problema, a parede esquerda da cavidade se move da parte inferior à parte superior com uma velocidade

constante U . O escoamento é resolvido numericamente, considerando um escoamento bidimensional, regime permanente e laminar, e as propriedades do fluido são consideradas constantes, exceto pela densidade, que é modelada pela aproximação de Boussinesq, como ocorre no caso anterior. Os efeitos viscosos são desprezados para a solução.

Figura 8: Representação esquemática do problema estudado no caso 4 .

Fonte: [Aydm \(1999\)](#).

Duas situações distintas são estudadas nesse problema: com gradiente de temperatura favorecendo a convecção no sentido do movimento constante da placa (parede esquerda à uma temperatura T_h maior que a da parede direita T_c), e com gradiente de temperatura causando correntes de convecção contrárias ao movimento da placa (parede esquerda à uma temperatura T_c menor que a da temperatura da fronteira direita T_h). Em ambos casos, as paredes superior e inferior são consideradas adiabáticas. Essas condições são implementadas nas funções f e h através do esquema de não-equilíbrio, assim como no caso 3.

Além do número de Prandtl, definido como na Equação (3.19) e do número de Reynolds (Equação 3.17) baseado na velocidade da fronteira esquerda U , também define-se o número adimensional de Grashof:

$$Gr = \frac{g\beta(T_h - T_c)H^3}{\nu^2}. \quad (3.31)$$

A relevância entre os efeitos de convecção forçada e convecção natural podem ser estudados através do número de Richardson, dado pela razão $Ri = Gr/Re^2$, e dessa forma, diferentes valores dessa razão entre 0.01 e 100 são estudados para verificar diferentes condições de escoamento.

Para o estudo de convergência de malha, foi feita a análise do perfil de velocidade horizontal ao longo do plano médio vertical da cavidade de acordo com o número de pontos.

Com o objetivo de quantificar a variação do perfil, foi realizado o seguinte cálculo:

$$\text{Variação} = \frac{\int_0^H (u_x^{k+1} - u_x^k)^2 dx}{\int_0^H (u_x^{k+1})^2 dx}, \quad (3.32)$$

sendo os sobrescritos k e $k + 1$ referentes, respectivamente, a malhas com menor e maior número de pontos.

3.5.5 Caso 5

O quinto caso é baseado no problema estudado por [Mioralli et al. \(2018\)](#) e consiste em uma cavidade quadrada com uma entrada, em que há um perfil de velocidades uniforme U e temperatura conhecida T_{in} , e uma saída, submetida a uma pressão conhecida. O tamanho da entrada e saída são iguais a $W = 0.25H$, e as paredes estão submetidas a uma temperatura constante conhecida T_w maior do que a temperatura de entrada T_{in} . A representação esquemática do problema pode ser visto na Figura 9.

Figura 9: Representação esquemática do problema estudado no caso 5.

Fonte: [Mioralli et al. \(2018\)](#).

Esse tipo de configuração também é conhecida como cavidade ventilada, e desperta interesse por ser encontrado em diferentes aplicações na engenharia, como em trocadores de calor, lubrificação, refrigeração de componentes eletrônicos, ventilação de cômodos e armazenamento de energia solar.

O escoamento é resolvido numericamente, sendo considerado incompressível, regime permanente, laminar e efeitos viscosos desprezíveis. Diferentes condições de escoamento foram

estudadas, variando o número de Reynolds e Prandtl. Para a implementação numérica das condições de contorno, foi utilizado o esquema de não-equilíbrio para as fronteiras com valores conhecidos, e *bounce-back* de não equilíbrio para a implementação da condição de pressão conhecida na saída.

3.5.5.1 Cálculo do número de Nusselt local e médio

Para o cálculo do número de Nusselt em cada um dos pontos da parede, um novo sistema de coordenada S (Figura 9) é definido, baseado em outros trabalhos da literatura (SAEIDI; KHODADADI, 2006; MIORALLI et al., 2018; CHABANI et al., 2017). A linha pertencente à coordenada S percorre as paredes da caixa de fluido no sentido anti-horário, de forma que $S = 0$ corresponde ao canto superior esquerdo, e os intervalos $0 \leq S \leq 1$, $1 \leq S \leq 2$ e $3 \leq S \leq 4$ correspondem, respectivamente, às paredes da esquerda, inferior, direita e superior.

O número de Nusselt local é definido para cada ponto da coordenada S através do seguinte cálculo:

$$\text{Nu}(S) = \left. \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} \right|_S, \quad (3.33)$$

em que $\mathbf{n}$ é o vetor na direção normal às paredes. Dessa forma, o número de Nusselt local é calculado, através de um método de diferenças finitas de segunda ordem, para cada ponto computacional nas fronteiras do domínio, relacionado aos intervalos $0.25 \leq S \leq 1$, $1 \leq S \leq 2$, $2.25 \leq S \leq 3$, $3 \leq S \leq 4$. O número de Nusselt médio para cada parede pode ser então calculado através de:

$$\overline{Nu}_i = -\frac{1}{S_{i1} - S_{i2}} \int_{S_{i1}}^{S_{i2}} Nu_i dS, \quad (3.34)$$

sendo que S_{i1} e S_{i2} correspondem ao valor da coordenada S nos dois extremos de uma das paredes. A integral é computada numericamente utilizando o método trapezoidal.

O número de Nusselt médio para toda a cavidade pode então ser calculado como uma média ponderada de cada um dos valores médios obtidos para a parede:

$$\overline{Nu} = \sum_i \frac{\overline{Nu}_i (S_{i2} - S_{i1})}{S_{tot}}. \quad (3.35)$$

3.5.5.2 Coeficiente de queda de pressão adimensional

Mensurar a queda de pressão é um parâmetro importante no projeto de diversos equipamentos, como caso de microfiltros e microválvulas, cujas geometrias simplificadas podem remeter ao problema estudado nesse caso (SAEIDI; KHODADADI, 2006). O coeficiente de queda de pressão adimensional está relacionado à diferença das pressões médias na entrada e saída do dispositivo:

$$C_p = \frac{\overline{P}_{entrada} - \overline{P}_{saida}}{1/2 \rho u_{in}^2}, \quad (3.36)$$

em que as pressões médias de entrada e saída, $\bar{p}_{entrada}$ e $\bar{p}_{saida}$ são dadas por:

$$\bar{p}_i = \frac{\int_{S_1}^{S_2} p dS}{\Delta S}, \quad (3.37)$$

sendo que o subscrito i é referente à entrada ou saída, e o intervalo ΔS equivalente à dimensão da entrada ou saída, que no trabalho presente é equivalente à $0.25H$. As integrais são calculadas numericamente através do método trapezoidal.

3.5.6 Critério de parada e erro numérico

Os problemas estudados nos casos 2, 3, 4 e 5 foram simulados até atingir a resposta em regime permanente. Nesses casos, a variável ε_Φ foi calculada baseada na norma L_2 em todo o domínio, dada na Equação (3.38):

$$\varepsilon_\Phi = \sqrt{\frac{\sum_x (\Phi_k(\mathbf{x}, t) - \Phi_{k-n}(\mathbf{x}, t))^2}{\sum_x \Phi_{k-n}^2(\mathbf{x}, t)}} \quad (3.38)$$

em que Φ representa uma quantidade de interesse e os subscritos k e $k - n$ indicam que a comparação é feita a cada n passos temporais. Para a variável térmica, a quantidade de interesse utilizada foi a energia total específica E , e como variável hidrodinâmica, o vetor de velocidades $\mathbf{u}$. Nesse último caso, as operações quadráticas são realizadas por um produto escalar entre as mesmas quantidades (por exemplo, $\mathbf{u}^2 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$). O critério de parada adotado foi $\varepsilon < 10^{-8}$, exceto para o caso 5, em que o critério foi de $\varepsilon < 10^{-6}$. Dessa forma, a cada 100 passos temporais, dois valores de ε eram calculados e avaliados de acordo com o critério adotado.

Nos casos 1 e 2, em que há uma solução analítica, o erro pode ser calculado pela Equação (3.38) substituindo Φ_k pela variável numérica obtida numericamente ao fim da simulação, e Φ_{k-n} pela variável dada pela solução analítica.

3.6 Equipamentos

Duas máquinas distintas foram utilizadas para a simulação dos casos descritos no trabalho e estão exibidas na Figura 10. Os principais componentes de cada uma delas são descritas na Tabela 3.

Tabela 3: Principais componentes das máquinas utilizadas para as simulações numéricas no trabalho presente.

Componente	Máquina 1	Máquina 2
Processador	Intel Xeon CPU E3-1225 v5 3.3GHZ (4 núcleos)	AMD Ryzen 7 1700 3.0GHZ (8 núcleos)
Memória RAM	8GB DDR4 1066 MHz	48GB DDR4 1200MHz
HD	1 unidade de disco rígido (HDD) 1TB	1 unidade de estado sólido (SSD) 250GB e 1 unidade de disco rígido (HDD) 1TB
GPU	NVIDIA Quadro K620 2GB GDDR5 (384 núcleos)	GeForce GTX 1080 Ti 11GB GDDR5X (3584 núcleos)
Placa mãe	Dell Inc. Manufactured 0YD6JR	Gigabyte AB350-Gaming 3-CF
Sistema operacional	Windows 10 Pro v1803	Windows 10 Pro v1803

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 10: Máquinas utilizadas para simulações numéricas (a) Máquina 1, (b) Máquina 2.

Fonte: Elaborado pelo autor.

4 RESULTADOS

Os resultados obtidos para os casos descritos no Capítulo 3 são apresentados e discutidos a seguir.

4.1 Caso 1

Os códigos utilizados para obter os resultados do caso 1 foram escritos no software MATLAB 2015a, e executados na máquina 1. Primeiramente, foram realizados testes numéricos em determinados instantes de tempos, utilizando $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.002$, $\nu = 0.005$ e $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0005$, $\nu = 0.0005$. Os resultados obtidos e as comparações com a solução analítica podem ser vistos nas Figuras 11 e 12. Os resultados numéricos mostram uma boa concordância com a solução analítica.

Figura 11: Resultados obtidos pelo MLB (pontos) e solução analítica (linha contínua) para diferentes instantes de tempo ($\nu = 0.005$).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Para comparar a solução obtida com valores da literatura, foram utilizadas as condições propostas no trabalho de [Gao, Le e Shi \(2013\)](#). Para um valor fixo $\nu = 0.005$, o incremento

especial é variado de $\Delta x = 1/50$ até $1/400$ e o incremento temporal de $\Delta t = 1/250$ até $1/16000$. Cada caso foi rodado até o instante de tempo $t = 2.4$ e o erro da solução numérica foi calculado de acordo com a modificação na Equação (3.38) descrita na seção anterior, e comparado com os resultados obtidos segundo a formulação de [Gao, Le e Shi \(2013\)](#) e [Duan, Liu e Jiang \(2008\)](#). Os dados obtidos são apresentados na Figura 13 e na Tabela 4.

Figura 12: Resultados obtidos pelo MLB (pontos) e solução analítica (linha contínua) para diferentes instantes de tempo ($\nu = 0.0005$).

Fonte: Elaborado pelo autor.

É possível notar que o presente modelo utilizado apresenta erros menores que os obtidos de acordo com [Duan, Liu e Jiang \(2008\)](#) e ligeiramente menores que os resultados de [Gao, Le e Shi \(2013\)](#). A vantagem da metodologia do trabalho presente é a maior simplicidade quando comparados aos outros trabalhos. [Gao, Le e Shi \(2013\)](#) incluem um parâmetro livre na função de equilíbrio, que não foi utilizado no modelo presente, e o trabalho de [Duan, Liu e Jiang \(2008\)](#) também incluem parâmetros na função de equilíbrio, uma vez que foi desenvolvido originalmente para uma situação mais geral, regida pela equação de Burgers modificada, em que a velocidade advectiva u está elevada a um valor m , que pode assumir qualquer valor natural.

Figura 13: Teste de acurácia no instante de tempo $t = 2.4$ e $\nu = 0.005$ comparando a metodologia atual e resultados de Gao, Le e Shi (2013) e Duan, Liu e Jiang (2008).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 4: Erro para $\nu = 0.005$ e $t = 2.4$ obtidos no trabalho presente e de acordo com trabalhos da literatura.

	$\Delta x = 1/50$	$\Delta x = 1/100$	$\Delta x = 1/200$	$\Delta x = 1/400$
	$\Delta t = 1/250$	$\Delta t = 1/1000$	$\Delta t = 1/4000$	$\Delta t = 1/16000$
Trabalho presente	0.0011	2.7754E-04	7.9711E-05	2.9874E-05
Gao, Le e Shi (2013)	0.0011	2.8712E-04	8.1870E-05	3.0387E-05
Duan, Liu e Jiang (2008)	0.0040	9.9261E-04	2.5511E-04	7.2417E-05

Fonte: Elaborado pelo autor

4.2 Caso 2

Os códigos para o caso 2 foram escritos em linguagem C, e executados na máquina 1. O pós-processamento para a elaboração das imagens foi realizado utilizando o software Matlab 2015a.

Os testes numéricos foram realizados considerando um número de Reynolds $Re = 20$ e o parâmetro hidrodinâmico de relaxação adimensional $\tau_f^* = 1.25$, o que garante que as velocidades em unidades de *lattices* sejam menores que a velocidade do som no *lattice* (GUO et al., 2007), minimizando os erros de compressibilidade. Os outros parâmetros podem ser determinados a partir dos números adimensionais de Prandtl (Pr) e Eckert (Ec).

A malha utilizada consiste em uma malha regular de 64×64 pontos, e foram conduzidos testes numéricos, primeiramente, fixando o número de Prandtl $Pr = 0.71$ e variando o número

de Eckert entre 0.1 e 100 (mostrados na Figura 14), e em um segundo momento, o número de Eckert foi fixado em $Ec = 10.0$, e o número de Prandtl variado entre 0.1 e 4.0 (mostrados na Figura 15). A solução hidrodinâmica depende apenas do número de Reynolds, e não apresentou mudanças significativas nos casos estudados. A comparação entre o resultado obtido e a solução analítica é exibida na Figura 16. Os valores dos erros estão resumidos nas Tabelas 5 e 6.

É possível observar que os resultados obtidos estão em ótima concordância com as soluções numéricas, indicando que os efeitos viscosos na equação de conservação de energia são corretamente resolvidos pelo método apresentado. Os testes numéricos foram baseados no trabalho de Guo et al. (2007), e os resultados obtidos também estão em concordância entre si.

Figura 14: Temperatura adimensional com $Re = 20$ e $Pr = 0.71$ para números de Eckert Ec (a) 0.1, (b) 20, (c) 50 e (d) 100, obtidos pela solução numérica (pontos) e analítica (linhas sólidas).

Fonte: Elaborado pelo autor, baseado nos testes numéricos de Guo et al. (2007).

Figura 15: Temperatura adimensional com $Re = 20$ e $Pr = 0.71$ para números de Eckert Ec (a) 0.1, (b) 20, (c) 50 e (d) 100, obtidos pela solução numérica (pontos) e analítica (linhas sólidas).

Fonte: Elaborado pelo autor, baseado nos testes numéricos de [Guo et al. \(2007\)](#).

Tabela 5: Erros para diferentes números de Eckert e respectivos tempos de simulação.

Re	Pr	Ec	Tempo [s]	Erro (velocidade)	Erro (temperatura)
20	0.71	0.1	10.506	6.8436E-04	3.7803E-05
20	0.71	20	11.402	6.8447E-04	1.0131E-03
20	0.71	50	11.794	6.8447E-04	1.0846E-03
20	0.71	100	11.445	6.8447E-04	1.1102E-03

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 6: Erros para diferentes números de Prandtl e respectivos tempos de simulação.

Re	Pr	Ec	Tempo [s]	Erro (velocidade)	Erro (temperatura)
20	0.1	10	11.061	6.8443E-04	1.9793E-02
20	1.0	10	10.708	6.8449E-04	5.3679E-05
20	2.0	10	22.431	6.8450E-04	2.4626E-04
20	4.0	10	44.969	6.8450E-04	1.9365E-03

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 16: Velocidade axial em função da altura do canal obtida pelo MLB (pontos) e dada pela solução analítica (linha sólida).

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.3 Caso 3

A solução numérica da convecção natural em uma cavidade quadrada foi implementada seguindo três estratégias distintas, conforme explicado no Capítulo 3: implementação em código em série (S), código em série com uso de interpolação linear das malhas convergidas como condição inicial na simulação de malhas mais refinadas (SI), e implementação em código paralelizado (P). Para todas essas estratégias, foram realizados na máquina 2 uma primeira etapa: a influência do número de pontos da malha no cálculo do número de Nusselt, para diferentes condições de escoamento: $Ra = 10^3, 10^4, 10^5$ e 10^6 .

O número de Nusselt médio do escoamento foi calculado seguindo o procedimento descrito no trabalho de [Hortmann, Perić e Scheuerer \(1990\)](#), definido por:

$$\overline{Nu} = Q/Q_C, \quad (4.1)$$

em que Q é o fluxo de calor ao longo da cavidade e Q_C o fluxo de calor considerando que houvesse apenas condução pura ao longo do fluido que preenche a caixa de fluido:

$$Q_C = k \frac{T_H - T_C}{L} H. \quad (4.2)$$

O fluxo ao longo da caixa de fluido Q pode ser calculado somando os fluxos devido aos mecanismos de difusão e convecção. Porém, por se tratar de um problema em regime permanente, em tese, o fluxo deve ser o mesmo em toda a caixa de fluido, e pode ser calculado mais facilmente através do fluxo na parede, por um esquema de primeira ordem para estimar o gradiente de temperatura.

4.3.1 Influência do número de pontos nas malhas

O estudo de malhas foi feito utilizando malhas 8×8 (64 pontos) até 2048×2048 (262144 pontos), para cada uma das condições de Ra de 10^3 até 10^6 e número de Prandtl $Pr = 0.71$. Para a abordagem serial (S), devido ao tempo de processamento a malha mais refinada utilizada foi de 512×512 . Para as outras duas abordagens, devido à instabilidade do método com malhas grosseiras para maiores números de Rayleigh, adotou-se malhas mais refinadas como ponto de partida. O fator de relaxação adimensional hidrodinâmico utilizado foi de 0.625, e o número de Eckert $Ec = 10^{-30}$, tornando o trabalho de compressão e efeitos viscosos desprezíveis. Todos os outros parâmetros podem ser determinados a partir desses dados.

Os resultados obtidos estão sumarizados nos gráficos em escala logarítmica no eixo das abscissas das Figuras 17 a 19, com os valores numéricos do Nusselt médio, e tempos de simulação exibidos da Tabela 7 até 10. O objetivo dos testes numéricos realizados nessa seção é assegurar que o escoamento resolvido numericamente apresenta resultados que independem do número de pontos na malha, a fim de compará-los com dados da literatura, principalmente, com o trabalho clássico que solucionou o mesmo problema utilizando volumes finitos e malhas regulares e refinadas na parede, de [Hortmann, Perić e Scheuerer \(1990\)](#).

Analisando os resultados, é possível notar que para todas as estratégias de implementação numérica, foi possível obter uma variação bem baixa do Nusselt médio para as malhas mais refinadas. A maior variação foi obtida na implementação em série (S), para o número de Rayleigh de 10^6 , em que foi observado uma mudança de 0.28% entre a malha de 256×256 e 512×512 . Para $Ra = 10^3, 10^4$ e 10^5 , a variação do número de Nusselt médio entre as malhas mais refinadas, nesse estratégia, foi, respectivamente, de 0.04%, 0.09% e 0.02%. Para as outras duas estratégias, foram utilizados maiores números de nós para a simulação, e a variação final foi abaixo de 0.1% para todas as condições de escoamento.

Em relação aos tempos de simulação, é possível observar que a técnica de realizar interpolação linear de uma malha convergida como condição inicial para um caso com malha mais refinada se mostrou eficiente para redução do tempo até a convergência, principalmente para valores de Ra mais baixos. Para as malhas 512×512 , a razão entre a estratégia serial (S) e a serial com interpolações (SI) é de, respectivamente, 5.96, 4.61, 2.17 e 1.5 para números de $Ra = 10^3, 10^4, 10^5$ e 10^6 . Uma das possíveis razões para esse comportamento é que com o aumento do número de Rayleigh, os efeitos convectivos se tornam cada vez mais relevantes, fazendo com que o campo de temperaturas se distancie de um perfil linear, como esperado para efeitos convectivos baixos. Dessa forma, a interpolação não se mostra tão efetiva para maiores números de Rayleigh, embora ainda tenha apresentado um ganho expressivo.

Comparando os tempos computacionais da estratégia serial com inteporlações (SI) e paralelizada (P), os resultados mostram um ganho ainda maior no tempo computacional. Para malhas de 512×512 , a razão entre os tempos de processamento são de, respectivamente, 22.6, 21.87, 22.60 e 20.17, para $Ra = 10^3, 10^4, 10^5$ e 10^6 . Com as malhas de 1024×1024 pontos, as razões se mantiveram na mesma ordem de grandeza, 18.91, 24.27, 22.09 e 25.46, respectivamente, para as condições de escoamento estudadas. Em comparação aos resultados obtidos no trabalho de Oliveira (2015), em que o código paralelizado atingiu velocidades 71.3 vezes maiores que em relação a um código em série, mostra que há margens para melhorias. No entanto, esse tipo de otimização requer um estudo mais detalhado na área computacional, fazendo uma repetição dos tempos de processamento, analisando o *layout* de memória utilizado, a taxa de ocupação dos multiprocessadores da GPU, entre outros. Dado que o foco do trabalho manteve-se na solução de problemas termofluidodinâmicos, pode-se dizer que os resultados obtidos nesta seção foram satisfatórios.

Figura 17: Variação do número de Nusselt médio com número de pontos $N \times N$ da malha com a estratégia serial (S).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 7: Tempos de processamento até a convergência segundo as estratégias, para $Ra = 10^3$.

$Ra = 10^3$			
Malha	S	SI	P
8x8	0.016 sec	-	-
16x16	0.203 sec	-	-
32x32	18 sec	-	8 sec
64x64	39 sec	44 sec	16 sec
128x128	9 min 8 sec	3 min 27 sec	47 sec
256x256	2 hrs 13 min 40 sec	27 min 33 sec	2 min 15 sec
512x512	30 hrs 53 min 18 sec	5 hrs 10 min 40 sec	13 min 43 sec
1024x1024	-	25 hrs 43 min 43 sec	1 hrs 21 min 37 sec
2048x2048	-	-	3 hrs 49 min 56 sec

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 18: Variação do número de Nusselt médio com número de pontos $N \times N$ da malha com a estratégia serial com interpolação (SI).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 8: Tempos de processamento até a convergência segundo as estratégias, para $Ra = 10^4$.

$Ra = 10^4$			
Malha	S	SI	P
8x8	0.015 sec	-	-
16x16	0.172 sec	-	-
32x32	2 sec	-	6 sec
64x64	28 sec	36 sec	17 sec
128x128	6 min 35 sec	4 min 28 sec	1 min 5 sec
256x256	1 hrs 36 min 55 sec	44 min 59 sec	3 min 35 sec
512x512	22 hrs 48 min 24 sec	4 hrs 56 min 36 sec	13 min 34 sec
1024x1024	-	35 hrs 47 min 39 sec	1 hrs 28 min 28 sec
2048x2048	-	-	4 hrs 37 min 57 sec

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 19: Variação do número de Nusselt médio com número de pontos $N \times N$ da malha com código paralelizado (P).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 9: Tempos de processamento até a convergência segundo as estratégias, para $Ra = 10^5$.

$Ra = 10^5$			
Malha	S	SI	P
8x8	Instável	-	-
16x16	0.078 sec	-	-
32x32	2 sec	-	-
64x64	20 sec	23 sec	17 sec
128x128	4 min 26 sec	3 min 48 sec	54 sec
256x256	1 hrs 5 min 7 sec	44 min 54 sec	3 min 45 sec
512x512	15 hrs 27 min 56 sec	7 hrs 7 min 5 sec	18 min 54 sec
1024x1024	-	42 hrs 28 min 33 sec	1 hrs 55 min 48 sec
2048x2048	-	-	15 hrs 29 min 46 sec

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 10: Tempos de processamento até a convergência segundo as estratégias, para $Ra = 10^6$.

$Ra = 10^6$			
Malha	S	SI	P
8x8	Instável	-	-
16x16	Instável	-	-
32x32	Instável	-	-
64x64	13 sec	16 sec	13 sec
128x128	2 min 55 sec	3 min 15 sec	54 sec
256x256	41 min 28 sec	37 min 10 sec	3 min 24 sec
512x512	9 hrs 45 min 57 sec	6 hrs 30 min 31 sec	19 min 21 sec
1024x1024	-	59 hrs 52 min 47 sec	2 hrs 21 min 6 sec
2048x2048	-	-	19 hrs 57 min 26 sec

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.3.2 Convecção Natural

Os resultados exibidos nessa seção foram gerados a partir das malhas mais refinadas. As linhas de corrente para os diferentes condições de escoamento podem ser vistos da Figura 20 até 23, e as linhas isotérmicas, da Figura 24 até 27.

Em relação às linhas de corrente, é possível notar, para $Ra = 10^3$, a formação de um vórtice central característico em escoamentos de convecção natural. À medida que o número de Rayleigh aumenta, as correntes de convecção se tornam mais intensas e o vórtice central se torna mais elíptico. No caso em que $Ra = 10^5$, o vórtice central se rompe, com a tendência de correntes de convecção maiores próximas às paredes. Para efeitos convectivos ainda maiores, como quando $Ra = 10^6$, é possível notar a tendência da formação de um terceiro vórtice central, além dos dois vórtices parietais. Esse comportamento é coerente com o observado na literatura (GUO et al., 2007; HORTMANN; PERIĆ; SCHEUERER, 1990; MOHAMAD; KUZMIN, 2010).

Através das linhas isotérmicas, é possível notar a relevância dos mecanismos de transferência de calor de acordo com o número de Rayleigh. Com $Ra = 10^3$, o escoamento em que há menores velocidades envolvidas, o principal mecanismo de transferência de calor é a condução, com pouca influência da convecção. À medida que o número de Rayleigh aumenta, os efeitos convectivos passam a ser cada vez mais relevantes, fazendo com que as linhas se tornem cada vez mais horizontais na região central da cavidade quadrada, e verticais apenas nas regiões próximas às paredes (GUO et al., 2007; HORTMANN; PERIĆ; SCHEUERER, 1990).

Para comparar os resultados quantitativamente com outros trabalhos da literatura, são apresentados os valores máximos das velocidades vertical e horizontal U_{max} e V_{max} e suas respectivas posições ao longo das linhas vertical e horizontal que cruzam os planos médios da caixa, e os valores do Nusselt médio. É importante comentar que os valores de velocidades são normalizados com a velocidade característica do escoamento $u_0 = \alpha/H$. Os dados obtidos pela três estratégias de implementação (código serial - S, código serial com interpolações como condição inicial de malhas mais refinadas- SI, e código paralelizado P) estão resumidos na Tabela 11. É possível verificar que os resultados obtidos estão bem coerentes com a referência clássica do trabalho de Hortmann, Perić e Scheuerer (1990) e outros trabalhos que utilizam o método de Botlitzmann (GUO; SHI; ZHENG, 2002; GUO et al., 2007; MOHAMAD; KUZMIN, 2010).

Figura 20: Linhas de corrente obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^3$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 21: Linhas de corrente obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^4$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 22: Linhas de corrente obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 23: Linhas de corrente obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^6$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 24: Linhas isotérmicas obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^3$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 25: Linhas isotérmicas obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^4$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 26: Linhas isotérmicas obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 27: Linhas isotérmicas obtidas para o problema de convecção natural com $Ra = 10^6$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 11: Comparação entre os resultados obtidos com as três estratégias do trabalho presente (S,SI,P) e comparação com trabalhos da literatura: I - [Guo, Shi e Zheng \(2002\)](#), II - [Guo et al. \(2007\)](#), III - [Hortmann, Perić e Scheuerer \(1990\)](#), IV - [Mohamad e Kuzmin \(2010\)](#) .

Ra		$\overline{Nu}$	U_{max}	y	V_{max}	x	Malha
10^3	(S)	1.1183	3.6478	0.8141	3.6971	0.1781	512×512
	(SI)	1.1181	3.6487	0.8135	3.6967	0.1787	1025×1025
	(P)	1.1180	3.6487	0.8134	3.6962	0.1783	2048×2048
	I	1.1168	3.6554	0.8125	3.6985	0.1797	128×128
	II	1.1195	3.6430	0.8047	3.6919	0.1719	128×128
10^4	(S)	2.2477	16.1736	0.8239	19.6187	0.1194	512×512
	(SI)	2.2463	16.1776	0.8232	19.6213	0.1191	1025×1025
	(P)	2.2458	16.1785	0.8232	19.6291	0.1187	2048×2048
	II	2.2545	16.1254	0.8203	19.5577	0.1172	128×128
	III	2.2442	16.1802	0.8265	19.6295	0.1193	160×160
10^5	(S)	4.5277	34.7743	0.8552	68.5527	0.0665	512×512
	(SI)	4.5253	34.7320	0.8545	68.6014	0.0654	1025×1025
	(P)	4.5236	34.7471	0.8544	68.6211	0.0660	2048×2048
	II	4.5278	34.6033	0.8516	68.0820	0.0703	128×128
	III	4.5216	34.7399	0.8558	68.6396	0.0657	320×320
	IV	4.5707	34.6755	0.8516	68.0494	0.0697	150×150
10^6	(S)	8.8304	64.9657	0.8493	219.8826	0.0372	512×512
	(SI)	8.8318	64.8550	0.8496	220.3499	0.0381	1025×1025
	(P)	8.8295	64.8422	0.8500	220.5028	0.0376	2048×2048
	II	8.7746	64.9059	0.8516	218.9000	0.03910	128×128
	III	8.8251	64.8367	0.8505	220.4610	0.03900	640×640
	IV	8.8765	64.7348	0.8552	218.9930	0.03996	150×150

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.4 Caso 4

O problema de convecção mista analisada neste caso, assim como no caso 3, foi realizado na máquina 2 em duas etapas: o teste de dependência do número de pontos na malha e a análise da solução sob diferentes condições de escoamento. A implementação computacional do código fonte deste caso foi realizado utilizando a programação em paralelo em CUDA C, permitindo ganho de tempo e utilização de malhas mais refinadas, como visto na seção anterior.

4.4.1 Influência do número de pontos nas malhas

O estudo de malhas foi feito utilizando malhas 8×8 (64 pontos) até 2048×2048 (262144 pontos), para a condição de número de Richardson $Ri = 1$ e gradiente de temperatura adverso em relação às correntes de convecção. Essa condição foi escolhida por representar uma situação em que as velocidades no domínio devido aos efeitos convectivos e difundidas em razão do movimento da placa possuem mesma ordem de grandeza, o que representa uma situação mais complexa em relação quando um desses efeitos é desprezível. Para todos os resultados apresentados do caso 4, o fator de relaxação adimensional hidrodinâmico utilizado foi de 0.625, o número de Eckert $Ec = 10^{-30}$, e foram adotados valores fixos de $Re = 100$ e $Pr = 0.71$. Todos os outros parâmetros podem ser determinados a partir desses dados.

Os resultados do perfil de velocidades horizontal (u_x) no plano médio vertical de acordo com o número de pontos pode ser visto na Figura 28, e a variação de acordo com o descrito no Capítulo 3 pode ser visto na Tabela 12. Visualmente, é possível notar uma diferença muito pequena entre os perfis no plano médio obtidos com diferentes malhas em comparação com o resultado da malha mais refinada (2048×2048), principalmente para número de pontos maiores que 160×160 . Para os resultados apresentados nas seções posteriores, adotou-se a malha de 1024×1024 por apresentar baixos valores de variação no perfil e tempos computacionais interessantes. O trabalho de Aydm (1999), que será utilizado para comparação, realizou o estudo de dependência de malhas entre 21×21 pontos e 61×61 , adotando ao final, malhas de 31×31 para a solução numérica em diferentes condições de escoamento.

Figura 28: Variação do perfil de velocidade horizontal no plano médio vertical de acordo com o número de pontos.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 12: Variação do perfil de velocidades no plano médio vertical entre duas malhas com número de pontos distintos.

k	$k + 1$	Variação	k	$k + 1$	Variação	k	$k + 1$	Variação
32	64	1.2E-3	320	352	7.4E-7	896	1024	2.2E-7
64	96	1.7E-4	352	384	5.2E-7	1024	1152	1.2E-7
96	128	4.9E-5	384	416	3.9E-7	1152	1280	7.7E-8
128	160	1.9E-5	416	448	2.8E-7	1280	1408	5.4E-8
160	192	9.0E-6	448	480	2.2E-7	1408	1536	3.5E-8
192	224	4.9E-6	480	512	1.7E-7	1536	1664	2.6E-8
224	256	2.8E-6	512	640	1.5E-6	1664	1792	2.2E-8
256	288	1.6E-6	640	768	8.2E-7	1792	1920	1.5E-8
288	320	1.0E-6	768	896	4.1E-7	1920	2048	1.0E-8

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.4.2 Regimes de escoamento

Os resultados para esse tipo de problema podem ser divididos em três regimes de transferência de calor diferentes: convecção natural pura ($Ri \gg 1$), convecção forçada pura ($Ri \ll 1$) e convecção mista ($Ri \approx 1$). O regime de convecção natural já foi apresentado na seção anterior para diferentes condições de escoamento, apresentando uma boa coerência entre os métodos estudados no trabalho presente e outros trabalhos da literatura.

No regime de convecção forçada, há uma difusão de quantidade de movimento devido à velocidade da placa na esquerda, de forma que a tensão de cisalhamento possui grande importância (*shear driven flow*) na formação do vórtice horário no interior da caixa de fluido. Também é possível observar, nessa condição de escoamento $Re = 100$, dois vórtices menores no sentido anti-horário próximos aos cantos superior e inferior direito. Na Figura 29, os resultados da linha de corrente e campo de temperatura são apresentados, e mostram boa coerência com o que é apresentado na literatura para esse regime.

Para o estudo de regime de convecção mista, como comentado anteriormente, foram estudados dois casos diferentes: o primeiro deles é aplicando um gradiente de temperaturas que criam correntes de convecção natural favoráveis ao vórtice horário criado pelo movimento da fronteira esquerda, como mostrado na Figura 29 no regime de convecção forçada pura. O segundo caso consiste em aplicar um gradiente de temperatura que criam correntes de convecção contrárias à esse vórtice, ou seja, aplicando uma condição de contorno de forma que a temperatura da fronteira direita seja maior que à da esquerda. Para esses dois conjuntos de condições de contorno, foram estudados sete condições de escoamento desde $Ri = 0.01$ até $Ri = 100$, com número de Reynolds fixo $Re = 100$, de forma a replicar o estudo feito por Aydm (1999), mas utilizando o Método de Reticulado de Boltzmann para a solução, ao invés do método de diferenças finitas utilizado pelo autor. As linhas de corrente e os campos de temperatura obtidos são exibidos na Figura 31.

No caso em que há um gradiente de temperatura favorável (Figura 31a), é possível observar que para $Ri = 0.01$, o escoamento é praticamente idêntico ao que é obtido para convecção forçada pura. Isso também ocorre para o caso em que as correntes de convecção são adversas ao escoamento devido ao movimento da placa esquerda, com um pequeno acréscimo na intensidade dos vórtices nos cantos superior e inferior direito. Esse fato indica que para essa condição, os efeitos convectivos são desprezíveis, e o efeito dominante ocorre devido a difusão de quantidade de movimento da fronteira esquerda para dentro do domínio estudado. Com o aumento para $Ri = 0.1$, o escoamento não apresenta mudanças muito significativas, sendo a principal diferença visual, a diminuição dos vórtices nos dois cantos direitos. Entre $Ri = 0.5$ e $Ri = 2.0$, é possível observar que tanto as linhas de corrente quanto os campos de temperatura são distintos dos dois casos extremos, o que nos permite concluir que para esses casos, tanto os efeitos de convecção natural quando de convecção forçada possuem relevância. À medida que Ri aumenta, nota-se um aumento gradual dos efeitos da convecção natural, de forma que

para $Ri = 10$ e $Ri = 100$, as linhas de corrente e campo de temperatura já apresentam grande semelhança com os resultados que são obtidos para convecção natural pura.

Na situação em que o gradiente de temperatura adverso ao efeito do movimento da placa (Figura 31b), para $Ri = 0.1$ é possível notar um aumento da intensidade dos vórtices presentes nos cantos superior e inferior direitos, mas quase nenhuma mudança significativa no campo de temperatura em relação ao caso $Ri = 0.01$. Em $Ri = 0.5$, já é possível notar a influência dos efeitos da convecção natural, com a formação de um grande vórtice no sentido contrário ao vórtice causado pelo movimento da fronteira esquerda. Nessa situação, os vórtices possuem a mesma ordem de grandeza. À medida que o parâmetro Ri aumenta, é possível notar o aumento do vórtice causado pela convecção natural. Para $Ri = 10$, o vórtice causado pelo movimento da placa esquerda está confinado a uma pequena região do domínio computacional estudado. Em $Ri = 100$, o vórtice devido ao movimento da placa é ainda menor, sendo visível apenas uma pequena região no canto inferior esquerdo. Com efeitos tão pequenos, pode-se concluir que a convecção forçada é desprezível nesse caso, e o escoamento é praticamente dominado pelos efeitos de convecção natural, se assemelhando bastante aos escoamentos vistos na seção anterior. Baseado nas observações das duas configurações estudadas, pode-se classificar os diferentes regimes de escoamento para esse problema: convecção forçada para $Ri < 0.1$, convecção mista para $0.1 \leq Ri \leq 10$, e convecção natural para $Ri > 10$. As observações e análises das duas configurações são condizentes com os resultados de Aydm (1999).

Em relação aos perfis de velocidade adimensionais ao longo da linha vertical no plano média da caixa, exibidos na Figura 30, é possível confirmar os resultados obtidos anteriormente. Pode-se notar que a diferença entre os perfis para $Ri = 0.01$ e 0.1 são bem pequenas. A partir de $Ri = 0.5$, os efeitos convectivos passam a ter bastante influência, e isso pode ser notado nos dois casos, com o grande aumento na magnitude nas velocidades para as correntes de convecção favoráveis ao movimento e, na grande redução, no caso das correntes de convecção contrárias. Para esse último caso, é bem nítida a formação do vórtice na direção contrária ao que se tem quando os efeitos convectivos são baixos, principalmente para números de Ri a partir de 1.0. Esses resultados obtidos são condizentes com o que foi observado nas linhas de corrente e campos de temperatura, e também com outros trabalhos da literatura.

Figura 29: Regime de convecção forçada: (a) trabalho presente, (b) Aydm (1999).

Fonte: Modificado de Aydm (1999).

Figura 30: Perfil de velocidades adimensional no plano médio vertical para correntes de convecção (a) favoráveis e (b) contrárias ao movimento da fronteira esquerda.

Fonte: Elaborado pelo autor, baseado em Aydm (1999).

Figura 31: Campos de temperatura e linhas de corrente em sete valores diferentes de Ri com gradiente de temperatura (a) favorável e (b) adverso ao movimento da fronteira esquerda.

Fonte: Elaborado pelo autor, baseado em [Aydm \(1999\)](#).

4.5 Caso 5

As soluções numéricas do problema de convecção forçada em uma cavidade ventilada, estudado no caso 5, foram implementadas na máquina 2, também em duas etapas: o teste da dependência das malhas e análise do escoamento em diferentes condições. A implementação computacional do código fonte desse caso foi realizado utilizando a programação serial, com uso das interpolações de malhas convergidas como condição inicial para os casos de malha mais refinada (SI).

4.5.1 Influência do número de pontos nas malhas

O estudo de malhas foi feito utilizando malhas bidimensionais de 65×65 até 1025×1025 , para $Re = 50$, e, de 129×129 até 1025×1025 , para $Re = 100$, com número de $Pr = 0.7$, 3.0 e 5.0 , sendo analisado quatro variáveis: o perfil de temperatura nos plano médio vertical e horizontal da placa de fluido, a velocidade vertical (u_y) no plano médio horizontal e a velocidade horizontal (u_x) no plano médio vertical. Para todos os resultados apresentados do caso 5, o fator de relaxação adimensional hidrodinâmico utilizado foi de 1.0 , o número de Eckert $Ec = 10^{-30}$, com todos os outros parâmetros podendo ser definidos a partir das condições de escoamento Re , Pr e número de pontos da malha. Também, nesse problema, o critério de convergência utilizado foi de 10^6 .

Os perfis de velocidades adimensionais horizontais e verticais nos planos médios vertical e horizontal estão resumidos na Figura 32, para as duas condições hidrodinâmicas $Re = 50$ e $Re = 100$. Como esperado para um escoamento incompressível, não houve diferenças significativas entre os perfis de velocidade obtidos para diferentes números de Pr . Visualmente, pode-se notar pouca diferença entre os perfis obtidos entre as duas malhas mais refinadas 513×513 e 1025×1025 . De acordo com o cálculo da Equação 3.32, a divergência entre as duas malhas mais refinadas no perfil de velocidades horizontal no plano médio vertical foi de $6.4E-06$ e $7.1E-06$, respectivamente, para $Re = 50$ e 100 . Para o perfil de velocidades vertical no plano médio horizontal, a divergência obtida foi de $5.7E-06$ e $6.2E-06$ entre as malhas 513×513 e 1025×1025 .

Os perfis de temperaturas adimensionais no plano médio vertical obtidos para diferentes condições e números de pontos estão exibidos na Figura 33. É possível notar o perfil é mais sensível ao número de pontos para menores números de Prandtl. No entanto, uma boa convergência foi atingida, com pouca diferença entre as malhas mais refinadas 513×513 e 1025×1025 . Utilizando o cálculo da Equação 3.32, a variação obtida para, respectivamente, $Pr = 0.7$, 3.0 e 5.0 foram de, $1.9E-06$, $5.4E-07$ e $5.9E-07$ com $Re = 50$, e $2.2E-06$, $2.2E-07$ e $4.8E-07$ para $Re = 100$. Na Figura 34, os perfis de temperaturas adimensionais no plano médio horizontal apresentam uma tendência similar. Nesse caso, a variação do perfil entre as malhas 513×513 e 1025×1025 para $Pr = 0.7$, 3.0 e 5.0 foram de, respectivamente, $2.2E-06$, $4.9E-07$ e $5.1E-07$ para $Re = 50$, e $2.4E-06$, $4.6E-07$ e $2.2E-06$, para $Re = 100$.

É interessante registrar a observação de que, inicialmente, também pretendia-se fazer simulações para $Re = 500$. No entanto, o método como proposto por [Guo et al. \(2007\)](#) apresentou instabilidades e não foi possível obter convergência, mesmo para malhas de 1025×1025 .

Figura 32: Perfil de velocidades adimensional horizontal no plano médio vertical (linha superior), e velocidades verticais no plano médio horizontal no plano médio horizontal (linha inferior), para $Re = 50$ (à esquerda) e $Re = 100$ (à direita).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados apresentados nas seções posteriores para o problema de cavidade ventilada foram simulados com malhas 1025×1025 para diferentes condições de escoamento, com base em três estudos da literatura: [Mioralli et al. \(2018\)](#), que resolveram o problema de convecção forçada utilizando o pacote de código aberto OpenFOAM, baseado na metodologia de volumes finitos; [Saeidi e Khodadadi \(2006\)](#), que também utilizaram volumes finitos para a solução do problema, com auxílio do pacote comercial FLUENT; e [Chabani et al. \(2017\)](#), os quais utilizou solução numérica baseada em diferenças finitas. Os resultados, análises e comparações são apresentadas a seguir.

Figura 33: Perfil de temperaturas adimensional no plano médio vertical para diferentes números de pontos na malha, para $Re = 50$ (à esquerda) e $Re = 100$ (à direita).

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 34: Perfil de temperaturas adimensional no plano médio horizontal para diferentes números de pontos na malha, para $Re = 50$ (à esquerda) e $Re = 100$ (à direita).

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.5.2 Linhas de corrente

Os campos de velocidades foram obtidos para 5 números diferentes de Reynolds: 20, 50, 80, 100, 200, e as linhas de corrente geradas através desses campos estão exibidos na Figura 35. Para $Re = 20$, é possível observar a formação de um vórtice primário no sentido horário, no canto inferior esquerdo, e um vórtice no sentido anti-horário no canto superior direito. Com o aumento no número de Reynolds, a tendência observada é o estabelecimento de vórtices cada vez mais intensos e em maiores escalas. Em valores numéricos, o vórtice primário ocupa em torno de 5.1%, 26.5%, 34.8%, 36.4% e 42.1% da cavidade para, respectivamente, $Re = 20, 50, 80, 100, 200$. Da mesma forma, o vórtice secundário representa uma taxa de ocupação em área da cavidade de 1.0%, 1.2%, 2.3%, 3.0% e 5.6%.

Na Figura 36, as comparações entre as linhas de corrente para $Re = 50$ e 100 são exibidas. É possível notar uma grande diferença para o caso em que $Re = 50$, onde o vórtice primário no trabalho de Mioralli et al. (2018) apresenta uma intensidade bem pequena comparada ao trabalho presente. A solução, na verdade, se assemelha a uma condição com baixo número de Reynolds ($Re = 20$ do trabalho presente). A grande diferença de intensidade entre os vórtices primários nessas duas condições levam a crer em algum tipo de equívoco na exibição desse resultado por parte dos autores. Para $Re = 100$, por outro lado, há uma boa concordância entre os resultados, com vórtices primários e secundários de mesma ordem de grandeza. Uma boa concordância também foi obtida com os resultados apresentados por Chabani et al. (2017), tanto para $Re = 100$ (Figura 37), quanto para $Re = 200$ (Figura 38).

Figura 35: Linhas de corrente para número de Reynolds 20, 40, 50, 80, 100 e 200.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 36: Comparação das linhas de corrente obtidas no trabalho presente (a) e por [Mioralli et al. \(2018\)](#).

Fonte: Elaborado pelo autor, modificado de [Mioralli et al. \(2018\)](#).

Figura 37: Comparação das linhas de corrente e campo de temperaturas obtidos para $Re = 100$ no trabalho presente (a) e por Chabani et al. (2017).

Fonte: Elaborado pelo autor, modificado de Chabani et al. (2017).

Figura 38: Comparação das linhas de corrente e campo de temperaturas obtidos para $Re = 200$ no trabalho presente (a) e por Chabani et al. (2017).

Fonte: Elaborado pelo autor, modificado de Chabani et al. (2017).

4.5.3 Campos de temperatura

Na Figura 39, as linhas isotérmicas de temperatura são exibidas para $Re = 20, 50, 80, 100$ e 200 e um número de Prandtl fixo de 0.5 . Nestes resultados, é possível observar uma maior concentração de linhas próximas às entradas e saídas, indicando uma troca de calor mais acentuada nessas regiões. Além disso, com o aumento do número de Reynolds, nota-se a influência do crescimento do vórtice primário no canto inferior esquerdo da cavidade. O aumento

da concentração de linhas isotérmicas entre o escoamento principal (da entrada para a saída) e o vórtice primário indicam um aumento na intensidade do fluxo de calor entre essas regiões. Também, o aumento da intensidade dos vórtices causam um efeito de mistura maior na cavidade, no sentido que há maiores correntes de circulação na caixa. Dessa forma, é possível notar fluidos com menores temperaturas mais próximos às paredes, aumentando o fluxo de calor nas fronteiras da cavidade.

Na Figura 40, as linhas isotérmicas para diferentes números de Re e Pr são apresentados. Através do campo de temperaturas, é possível observar a diferença dos campos relacionado ao número de Péclet ($Pe_H = Re_H * Pr$), que representa a razão entre os efeitos advectivos e difusivos na transferência de calor. Assim, para baixos números de Re e Pr , e portanto, baixo número de Pe , como no caso de $Re = 50$ e $Pr = 0.7$, os efeitos difusivos são dominantes na transferência de calor. Mantendo-se Pr fixo e aumentando Re , é possível notar o aumento da influência dos efeitos advectivos pelas linhas isotérmicas, principalmente pela diminuição no gradiente seguindo as linhas de corrente que vão da entrada para a saída da cavidade. A diminuição do gradiente de temperatura do escoamento principal também é verificada com Re fixo e aumento do número de Pr . Com $Re = 200$ e $Pr = 5.0$, os efeitos advectivos são predominantes, por isso, a influência do vórtice primário é mais acentuada e visível. Nesse caso, os efeitos difusivos ficam confinados às regiões de baixas velocidade (baixo número de Pe local), que são às regiões próximas às paredes.

Na Figura 41 e Figura 42, as linhas isotérmicas para $Re = 50$ e 100 , respectivamente, são comparadas qualitativamente com os resultados obtidos por Mioralli et al. (2018). Para $Re = 50$ (Figura 41) e $Pr = 0.7$, não é possível notar grande diferença entre os resultados, devido à predominância dos efeitos difusivos. À medida que o número de Pr aumenta, a diferença entre os resultados devido ao campo de velocidades se torna mais evidente. Por apresentar um vórtice primário consideravelmente menor, as linhas de temperatura apresentam uma região maior relacionadas ao escoamento principal (onde há maiores velocidades) do que o obtido no trabalho presente. Para $Re = 100$, os resultados obtidos apresentam boa concordância entre si. Os campos de temperatura para $Re = 100$ e $Re = 200$ com $Pr = 0.7$ foram plotados também utilizando o mesmo mapa de cores de Chabani et al. (2017) a fim de comparações. Os dois casos são apresentados na Figura 37 e Figura 38, em que é possível notar uma boa concordância entre os resultados.

Figura 39: Linhas isotérmicas para número de Prandtl fixo em 5.0, e diferentes números de Reynolds.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 40: Linhas isotérmicas para diferentes números de Prandtl e Reynolds.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 41: Linhas isotérmicas para número de Reynolds igual a 50, e diferentes números de Prandtl obtidos (a) no trabalho presente, e (b) [Mioralli et al. \(2018\)](#).

Fonte: Elaborado pelo autor, modificado de [Mioralli et al. \(2018\)](#).

Figura 42: Linhas isotérmicas para número de Reynolds igual a 100, e diferentes números de Prandtl obtidos (a) no trabalho presente, e (b) [Mioralli et al. \(2018\)](#).

Fonte: Elaborado pelo autor, modificado de [Mioralli et al. \(2018\)](#).

4.5.4 Número de Nusselt local e médio

O número de Nusselt local foi calculado segundo a Equação 3.33, e plotado de acordo com a variável S , que percorre as fronteiras do domínio computacional no sentido anti-horário a partir do canto superior esquerdo. Os intervalos $0 \leq S \leq 0.25$, e $2 \leq S \leq 2.25$ correspondem à entrada e saída da cavidade. Os resultados para $Re = 50$ e $Re = 100$ podem ser vistos na Figura 43 e para $Re = 200$, na Figura 44. É possível notar o valor elevado do Nusselt local próximo à entrada ($S = 0.25$ e 4), e à saída ($S = 2$ e 2.25), ao passo que os cantos inferior direito ($S = 1$) e superior direito ($S = 3$) apresentam um coeficiente de transferência de calor muito baixo, por estarem situados próximos aos vórtices, regiões de baixas velocidades.

Além disso, nota-se que o Nusselt local aumenta tanto para fluidos com maiores números de Prandtl, quanto com o aumento do número de Reynolds. Esses resultados estão de acordo com o que foi observado através dos campos de temperatura (Figura 40), e com o observado do trabalho de Mioralli et al. (2018), na comparação apresentada na Figura 43. Vale notar que, apesar de apresentarem um comportamento parecido, os valores do Nusselt local nos cantos, principalmente os próximos à entrada, apresentam valores consideravelmente mais elevados no trabalho presente. A principal razão desse fato é o número de pontos da malha, de 1025×1025 por este trabalho, e 160×160 por Mioralli et al. (2018), de forma que há nós na parede (T_w) cada vez mais próximos da entrada ($T_{in} < T_w$), apresentando um coeficiente cada vez mais elevado com o refinamento da malha. Embora o valor de ΔS diminua com o refinamento do domínio computacional, o cálculo do Nusselt médio ao longo de S se mostrou bastante sensível ao número de pontos, e um valor assintótico não foi muito bem definido para os valores estudados. Por exemplo, para $Re = 100$ e $Pr = 0.7$, o número de Nusselt médio foi de, respectivamente, 3.78, 3.81, 3.90, 4.07, 4.24 para malhas com 129, 161, 257, 513 e 1025 pontos. Na Figura 45 e Figura 46, o número de Nusselt local é comparado com o trabalho de Chabani et al. (2017) para $Re = 100$ e 200 e $Pr = 0.7$, para as paredes da esquerda e inferior da cavidade. Da mesma forma, apesar do comportamento geral muito próximo, a intensidade da transferência de calor próximo à entrada é bem mais acentuada no trabalho presente em relação ao apresentado por Chabani et al. (2017), também utilizando malhas de 160×160 pontos.

Na Tabela 13, os resultados de Nusselt médio da cavidade são exibidos, juntamente com os resultados de Mioralli et al. (2018) para algumas condições e a diferença relativa entre os valores. Quantitativamente, pode-se observar o aumento do número de Nusselt da cavidade para maiores números de Prandtl e Reynolds, corroborando as análises anteriores. Também, é possível notar um aumento na ordem de 30% no coeficiente médio para cada vez que o número Reynolds tem seu valor duplicado. Entre $Pr = 0.7$ e $Pr = 3.0$, uma razão de 4.28, foi observado um crescimento em torno de 60% para os três casos. Por fim, com um aumento de 66.6% no número de Prandtl (entre 3.0 e 5.0), notou-se um acréscimo de 16% para as três condições de Reynolds.

Em comparação aos resultados de Mioralli et al. (2018), pode-se notar que os valores

estão bem próximos para $Pr = 0.7$. No entanto, o aumento do número de Prandtl tem um impacto maior para o trabalho da literatura, de forma que os coeficientes encontrados são menores em até 15.77%. Na Tabela 14, foram comparadas outras condições de escoamento com os resultados de Saeidi e Khodadadi (2006). Nesse caso, podemos ver também uma divergência entre os resultados de até 6.43%. Um estudo mais aprofundado dos erros envolvidos no método de Guo et al. (2007) e sua relação com o parâmetro de relaxação térmico seria interessante para verificar essa diferença observada para maiores números de Prandtl. Além disso, a descontinuidade de temperatura entre a entrada e saída parecem ter grande influência no resultado, de forma que provavelmente seja necessário um melhor tratamento dos cantos.

Chabani et al. (2017) também apresentam alguns resultados de Nusselt médio considerando apenas a parede esquerda e inferior da cavidade. Na Tabela 15, é possível observar que tanto os valores do trabalho presente quanto de Mioralli et al. (2018) superestimam o coeficiente de transferência de calor em, respectivamente, 14.57% e 11.39% em relação aos valores encontrados por Chabani et al. (2017), para o caso de $Re = 100$ e $Pr = 0.7$. No caso em que $Re = 200$, o valor encontrado no trabalho presente superestima o número de Nusselt médio das paredes esquerda e inferior em 15.39% em relação ao apresentado por Chabani et al. (2017).

Tabela 13: Valores de Nusselt médio da cavidade para diferentes condições de escoamento.

Re		$Pr = 0.7$	$Pr = 3.0$	$Pr = 5.0$	Malha (NxN)
50	Trabalho presente	3.21	5.25	6.10	1025
	Mioralli et al. (2018)	3.16	5.53	6.65	160
Diferença (%)		1.44%	-5.30%	-9.04%	
100	Trabalho presente	4.24	6.79	7.94	1025
	Mioralli et al. (2018)	4.23	7.42	9.19	160
Diferença (%)		0.25%	-9.22%	-15.77%	
200	Trabalho presente	5.61	8.87	10.41	1025

Fonte: Elaborado pelo autor, também com dados de Mioralli et al. (2018).

Figura 43: Comparação entre os números de Nusselt locais para $Re = 50$ e 100 e $Pr = 0.7$, 3.0 e 5.0 entre (a) trabalho presente e (b) Mioralli et al. (2018).

Fonte: Modificado de Mioralli et al. (2018).

Figura 44: Número de Nusselt local para $Re = 200$ e números de Prandtl 0.7, 3.0 e 5.0.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 45: Comparação entre os resultados para $Re = 100$ e $Pr = 0.7$ do número de Nusselt local obtido (a) no trabalho presente, e em (b) Chabani et al. (2017).

Fonte: Elaborado pelo autor, modificado de Chabani et al. (2017).

Figura 46: Comparação entre os resultados para $Re = 100$ e $Pr = 0.7$ do número de Nusselt local obtido (a) no trabalho presente, e em (b) Chabani et al. (2017).

Fonte: Elaborado pelo autor, modificado de Chabani et al. (2017).

Tabela 14: Valores de Nusselt médio da cavidade para diferentes números de Reynolds e Prandtl fixo em 5.0.

Re		$\overline{Nu}$	Malha (NxN)
20	Trabalho presente	4.5521	1025
	Saeidi e Khodadadi (2006)	4.2839	160
	Diferença (%)	5.89%	
80	Trabalho presente	7.2746	1025
	Saeidi e Khodadadi (2006)	6.8777	160
	Diferença (%)	5.46%	
200	Trabalho presente	10.4140	1025
	Saeidi e Khodadadi (2006)	9.7445	160
	Diferença (%)	6.43%	

Fonte: Elaborado pelo autor, também com dados de Saeidi e Khodadadi (2006).

Tabela 15: Valores de Nusselt médio considerando a parede esquerda e inferior da cavidade, para $Re = 100$ e 200 e $Pr = 0.7$.

		$\overline{Nu}_{esq+inf}$	Malha (NxN)
$Re = 100$	Trabalho presente	3.2809	1025
	Chabani et al. (2017)	2.8637	160
	Mioralli et al. (2018)	3.1898	160
	Diferença (%)	14.57%	
		2.86%	
$Re = 200$	Trabalho presente	4.4117	1025
	Chabani et al. (2017)	3.8234	160
	Diferença (%)	15.39%	

Fonte: Elaborado pelo autor, também com dados de Chabani et al. (2017) e Mioralli et al. (2018).

4.5.5 Coeficiente de queda de pressão adimensional

Os resultados de coeficiente de queda de pressão adimensional independem do número de Prandtl e são mostrados na Tabela 16, com comparações com os valores encontrados por [Saeidi e Khodadadi \(2006\)](#) quando possível. De acordo com os valores apresentados, nota-se uma redução do coeficiente com o aumento do número de Reynolds, caracterizando uma relação inversa. Em comparação aos números apresentados por [Saeidi e Khodadadi \(2006\)](#), verifica-se diferenças de até 30% nos resultados. Uma das possíveis razões por essa divergência pode ser a natureza pseudo-compressível do MLB apresentado, que faz com que o campo de pressões seja também sensível ao número de pontos. Para exemplificar, os casos com MLB utilizando malha 161x161 ao invés de 1025x1025, apresentam coeficientes de 3.5262 e 9.1558 para $Re = 20$ e $Re = 80$, ao passo que para $Re = 200$, o método é instável com esse número de pontos. De acordo com [Krüger et al. \(2017\)](#), o MLB apresenta boa precisão nos resultados quando a velocidade máxima adimensional U_{max}^* é menor que 0.1, sendo que para malhas 161x161, essa condição só é atendida para $Re = 20$. Para conclusões mais profundas, seria interessante analisar melhor os termos de erros envolvidos no método, e tentar utilizar variações do MLB tradicional, com modificações para a função de equilíbrio incompressível ([ZOU et al., 1995](#)), e verificar se há mudanças significativas nos resultados.

Tabela 16: Coeficientes de queda de pressão adimensional para diferentes condições de escoamento.

Re		C_p	malha (NxN)
20	Trabalho presente	11.0500	1025
	Saeidi e Khodadadi (2006)	8.4298	160
	Diferença (%)	23.71%	
80	Trabalho presente	3.8103	1025
	Saeidi e Khodadadi (2006)	2.9781	160
	Diferença (%)	21.84%	
200	Trabalho presente	2.5726	1025
	Saeidi e Khodadadi (2006)	1.8425	160
	Diferença (%)	28.38%	

Fonte: Elaborado pelo autor, utilizando também dados de [Saeidi e Khodadadi \(2006\)](#).

4.6 Considerações finais aos resultados

A partir das simulações realizadas e dos resultados numéricos obtidos, pode-se notar a grande flexibilidade do método de Lattice Boltzmann para solução de problemas bidimensionais

em regime permanente envolvendo diferentes fenômenos hidrodinâmicos e térmicos, através dos cinco problemas estudados nesse trabalho: modelo unidimensional para a solução da equação de Burgers viscosa, escoamento bidimensional em um canal com paredes a diferentes temperaturas, convecção natural em uma cavidade quadrada preenchida com um fluido conhecido, diferentes regimes de escoamento em um caixa de fluido com uma das fronteiras móveis, e convecção forçada em uma cavidade ventilada com uma entrada e saída. Os dados numéricos obtidos foram comparados qualitativa e quantitativamente com resultados disponíveis para diferentes condições de escoamento.

Dentro dos estudos de convecção natural, também foi constatado que a implementação em GPU utilizando CUDA C mostrou um grande benefício na redução do tempo de simulação do problema estudado, confirmando resultados consolidados na literatura.

5 CONCLUSÃO

No trabalho presente, foram estudados uma das formas de aplicar o método de Lattice Boltzmann para solução da Equação de Navier-Stokes acoplada à resolução numérica da equação de conservação de energia para escoamentos incompressíveis bidimensionais e laminares, com operador de colisão BGK. Em seguida, essa metodologia foi aplicada em uma gama de problemas distintos, envolvendo fenômenos como influência dos efeitos viscosos na solução do campo de velocidades e de energia, e diferentes regimes de escoamento relacionados à convecção forçada e natural, utilizando a aproximação de Boussinesq.

O estudo foi separado em cinco problemas diferentes: solução numérica da equação unidimensional de Burgers viscosa; escoamento bidimensional em um canal com paredes a diferentes temperaturas; convecção natural em uma cavidade quadrada preenchida com um fluido conhecido; convecção natural, mista e forçada caixa de fluido com uma das fronteiras móveis, e convecção forçada em uma cavidade ventilada com uma entrada e saída. Dos resultados obtidos, as principais conclusões são listadas abaixo:

- A modificação proposta para a solução da Equação viscosa de Burgers pelo método de Lattice Boltzmann mostrou-se eficiente, à medida que apresenta erros menores com as mesmas condições de avanços temporais e discretização do domínio computacional que os trabalhos da literatura. Ainda, há a vantagem da metodologia proposta ser mais simples que as apresentadas pelos outros autores estudados (GAO; LE; SHI, 2013; DUAN; LIU; JIANG, 2008);
- O escoamento em um canal bidimensional cujas paredes superior e inferior possuem temperaturas distintas foi solucionado numericamente para diferentes condições de escoamento, variando o número de Prandtl e Eckert. Os resultados numéricos foram comparados com a solução analítica, apresentando boa concordância entre os resultados. Dessa forma, pôde-se notar a capacidade do método de mensurar corretamente os efeitos dos trabalhos viscosos na solução da equação de conservação de energia.
- Os efeitos de convecção natural em uma caixa de fluido com paredes direita e esquerda submetidas a diferentes temperaturas foram solucionados numericamente, utilizando a aproximação de Boussinesq, incluída no método de Lattice Boltzmann através de um termo de forças volumétricas. O problema foi resolvido para diferentes condições de escoamento, mostrando uma ótima concordância nos valores de coeficiente de transferência de calor na caixa com outros trabalhos da literatura, incluindo outros resultados com método de Lattice Boltzmann e volumes finitos;

- Três implementações de códigos foram utilizadas na solução do escoamento de convecção natural. A primeira delas, a implementação de código em C básica, sempre iniciando as malhas do zero. Em seguida, foram adicionadas interpolações dos resultados convergidos de malhas mais grossas como condição inicial dos casos com malhas mais refinadas. Por último, além do uso de interpolações, o código de convecção natural foi implementado de forma paralelizada, utilizando a linguagem CUDA C, sendo o processamento feito pelos núcleos das unidades gráficas. Os ganhos em tempo computacional entre a primeira e segunda estratégia ficaram entre 1.5 e 6 vezes, ao passo que a implementação paralela se mostrou entre 20 e 25 vezes mais rápida que a segunda abordagem, dependendo das condições de contorno. Com isso, a implementação em paralelo se mostra como uma ferramenta importante para viabilização de solução de problemas que, por exemplo, precisam de uma resolução maior nas malhas;
- Diferentes regimes de escoamentos foram estudados no problema da caixa de fluido com uma fronteira móvel, através da variação do número de Richardson (Ri). Pelos resultados apresentados, pôde-se notar que o método de Lattice Boltzmann foi capaz de reproduzir os regimes de convecção natural, mista e forçada, para ambos casos em que as correntes de convecção favoreciam ou eram contrárias à influência da fronteira móvel. Os resultados mostraram boa concordância com o reportado na literatura;
- O método de Lattice Boltzmann também foi aplicado para a solução numérica de uma cavidade ventilada com uma entrada e uma saída, para diferentes condições de escoamento. Foi possível verificar o aumento do coeficiente de transferência de calor com o aumento do número de Reynolds e Prandtl, além de uma redução no coeficiente de queda de pressão adimensional com o aumento do número de Reynolds. Essa tendência é confirmada por outros trabalhos na literatura. No entanto, nas comparações quantitativas, foram observadas diferenças de até 15.7% para o número de Nusselt médio da caixa e até 28.38% para o coeficiente de queda de pressão. A sensibilidade dessas variáveis com o número de pontos da malha e o aumento da divergência entre os resultados para maiores números de Prandtl levam a crer que um estudo mais detalhado a respeito de como os erros são relacionados com as variáveis macroscópicas e o fator de relaxação térmico podem trazer conclusões mais profundas dessas diferenças.

5.1 Sugestões para trabalhos futuros

Algumas sugestões para trabalhos futuros relacionados a solução numérica para problemas termofluidodinâmico com o método de Lattice Boltzmann são apresentadas a seguir:

- Uma investigação mais profunda a respeito dos erros envolvidos pelos métodos apresentados no trabalho presente, utilizando análise de Chapman-Enskog ([CHAPMAN; COWLING, 1952](#)), ou outra abordagem equivalente. Com essa informação, pode-se descobrir

por exemplo a influência dos erros de compressibilidade, a importância do valor do parâmetro de relaxação térmica e outras variáveis macroscópicas. Dessa forma, consegue-se tirar conclusões mais precisas a respeito da divergências apresentadas entre os resultados encontrados e valores encontrados a partir de diferenças ou volumes finitos;

- Para problemas de regime permanente, como foram todos os casos estudados, existem modificações na função de equilíbrio fluidodinâmica que reproduzem modelos incompressíveis, como o proposto por [Zou et al. \(1995\)](#). Utilizar esse tipo de modelo seria um estudo interessante para complementar os resultados apresentados no trabalho presente. Além disso, seria interessante verificar quais implicações o uso desse modelo teriam ao utilizá-lo juntamente com o modelo de [Guo et al. \(2007\)](#);
- Outros operadores de colisão podem ser utilizados para trazer mais estabilidade ao método. Dentre alguns exemplos que poderiam ser utilizados são o método de regularização de Latt ([LATT, 2007](#)) e o operador com múltiplos tempos de relaxação, também conhecido como operador MRT ([D'HUMIÈRES, 2002](#)). A solução com esses operadores podem proporcionar soluções mais estáveis mantendo uma precisão confiável, mesmo para um número menor de pontos. Isso possibilitaria, por exemplo, simular os casos com número de Reynolds igual a 200 com malhas de 160x160, para uma melhor comparação com os outros trabalhos da literatura. Além disso, maiores números de Reynolds também poderiam ser simulados com um número viável de nós na malha computacional. Por exemplo, [Chabani et al. \(2017\)](#) apresenta resultados a partir de $Re = 100$ até valores de $Re = 600$ com malhas 160x160, ao passo que no trabalho presente, o maior número de Reynolds testado com simulação estável para essa resolução de malha foi $Re = 100$;
- Outro estudo que poderia complementar os resultados apresentados seria uma revisão mais elaborada das técnicas para tratamento dos cantos, tanto para fronteiras hidrodinâmicas quanto térmicas. Como o método de Lattice Boltzmann trabalha com as funções de distribuição, podem haver diferentes formas para lidar com a descontinuidade de duas fronteiras com valores conhecidos;
- A capacidade do método de incluir o trabalho devido às forças viscosas na equação de conservação de energia pode ser melhor explorado, através de classe de problemas em que o número de Eckert sejam elevados. Um estudo aprofundado desse tipo também pode ser atrelado à primeira sugestão, de forma que possa ficar mais elucidado como os erros do campo de energia variam de acordo com a influência do número de Reynolds, Prandtl e Eckert.

REFERÊNCIAS

- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. **Handbook of mathematical functions: with formulas, graphs, and mathematical tables**. Washington: Courier Corporation, 1964. v. 55.
- AYDM, O. Aiding and opposing mechanisms of mixed convection in a shear-and buoyancy-driven cavity. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 26, n. 7, p. 1019–1028, 1999.
- BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. **Physical Review**, v. 94, n. 3, p. 511–525, 1954.
- BRÈS, G.; PÉROT, F.; FREED, D. Properties of the lattice Boltzmann method for acoustics. In: 15TH AIAA/CEAS AEROACOUSTICS CONFERENCE (30TH AIAA AEROACOUSTICS CONFERENCE), 15., 2009, Miami. **Meeting papers**. Miami: American Institute of Aeronautics and Astronautics. p. 3395.
- CAIAZZO, A. Analysis of lattice Boltzmann initialization routines. **Journal of Statistical Physics**, v. 121, n. 1-2, p. 37–48, 2005.
- CHABANI, O.; ABIDE, S.; LAMROUS, N.; ZEGHMATI, B. Numerical study of non-Boussinesq convection in a ventilated cavity. **Computational Thermal Sciences: An International Journal**, v. 9, n. 2, p. 135–149, 2017.
- CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. **The Mathematical Theory of Non-uniform Gases**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1952.
- CHEN, S.; LUO, K.; ZHENG, C. A simple enthalpy-based lattice Boltzmann scheme for complicated thermal systems. **Journal of Computational Physics**, v. 231, n. 24, p. 8278–8294, 2012.
- D'HUMIÈRES, D. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 360, n. 1792, p. 437–451, 2002.
- DIVO, E.; KASSAB, A. J. An efficient localized radial basis function meshless method for fluid flow and conjugate heat transfer. **Journal of Heat Transfer**, v. 129, n. 2, p. 124–136, 2007.
- DUAN, Y.; LIU, R.; JIANG, Y. Lattice Boltzmann model for the modified Burgers' equation. **Applied Mathematics and Computation**, v. 202, n. 2, p. 489–497, 2008.
- FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. **Physical Review Letters**, v. 56, n. 14, p. 1505–1508, 1986.
- GAO, Y.; LE, L.-H.; SHI, B.-C. Numerical solution of Burgers' equation by lattice Boltzmann method. **Applied Mathematics and Computation**, v. 219, n. 14, p. 7685–7692, 2013.
- GINZBURG, I. Truncation errors, exact and heuristic stability analysis of two-relaxation-times lattice Boltzmann schemes for anisotropic advection-diffusion equation. **Communications in Computational Physics**, v. 11, n. 5, p. 1439–1502, 2012.

GINZBURG, I.; D'HUMIERES, D. Multireflection boundary conditions for lattice Boltzmann models. **Physical Review E**, v. 68, n. 6, p. 066614, 2003.

GINZBURG, I.; VERHAEGHE, F.; D'HUMIERES, D. Two-relaxation-time lattice Boltzmann scheme: About parametrization, velocity, pressure and mixed boundary conditions. **Communications in computational physics**, v. 3, n. 2, p. 427–478, 2008.

GOMBOSI, T. I. **Gaskinetic theory**. Cambridge: Cambridge University Press, 1994.

GUO, Z.; SHI, B.; ZHENG, C. A coupled lattice BGK model for the Boussinesq equations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 39, n. 4, p. 325–342, 2002.

GUO, Z.; ZHAO, T. Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media. **Physical Review E**, v. 66, n. 3, p. 036304, 2002.

GUO, Z.; ZHENG, C.; SHI, B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. **Physical Review E**, v. 65, n. 4, p. 046308, 2002.

GUO, Z.; ZHENG, C.; SHI, B.; ZHAO, T. Thermal lattice Boltzmann equation for low Mach number flows: decoupling model. **Physical Review E**, v. 75, n. 3, p. 036704, 2007.

HE, X.; CHEN, S.; DOOLEN, G. D. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit. **Journal of Computational Physics**, v. 146, n. 1, p. 282–300, 1998.

HE, X.; CHEN, S.; ZHANG, R. A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh–Taylor instability. **Journal of Computational Physics**, v. 152, n. 2, p. 642–663, 1999.

HE, X.; LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. **Physical Review E**, v. 56, n. 6, p. 6811, 1997.

HECHT, M.; HARTING, J. Implementation of on-site velocity boundary conditions for D3Q19 lattice Boltzmann simulations. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, 2010.

HORTMANN, M.; PERIĆ, M.; SCHEUERER, G. Finite volume multigrid prediction of laminar natural convection: Bench-mark solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 11, n. 2, p. 189–207, 1990.

HUANG, H.; KRAFCZYK, M.; LU, X. Forcing term in single-phase and Shan-Chen-type multiphase lattice Boltzmann models. **Physical Review E**, v. 84, n. 4, p. 046710, 2011.

HUANG, J.; WU, H.; YONG, W.-A. On initial conditions for the lattice Boltzmann method. **Communications in Computational Physics**, v. 18, n. 2, p. 450–468, 2015.

KREMER, G. M. **Uma Introdução à Equação de Boltzmann**. São Paulo: Edusp, 2005.

KRÜGER, T. et al. **The Lattice Boltzmann Method**. [S.l.]: Springer, 2017.

LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: Acoustic and thermal properties in two and three dimensions. **Physical Review E**, v. 68, n. 3, p. 036706, 2003.

LATT, J. **Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations**. 2007. Tese (Doutorado) — University of Geneva, 2007.

MARTINEZ, D. O.; MATTHAEUS, W. H.; CHEN, S.; MONTGOMERY, D. Comparison of spectral method and lattice Boltzmann simulations of two-dimensional hydrodynamics. **Physics of Fluids**, v. 6, n. 3, p. 1285–1298, 1994.

MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. **Physical Review Letters**, v. 61, p. 2332–2335, 1988.

MEI, R.; SHYY, W. On the finite difference-based lattice Boltzmann method in curvilinear coordinates. **Journal of Computational Physics**, v. 143, n. 2, p. 426–448, 1998.

MIORALLI, P.; SCALON, V.; AVALLONE, E.; JR, S. V. Analysis of laminar forced convection inside a square ventilated cavity using the OpenFoam. **RETERM-Thermal Engineering**, v. 16, n. 1, p. 66–74, 2018.

MOHAMAD, A.; KUZMIN, A. A critical evaluation of force term in lattice Boltzmann method, natural convection problem. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 53, n. 5-6, p. 990–996, 2010.

OLIVEIRA, F. M. C. **GPU implementation of a fluid dynamics interactive simulator based on the Lattice Boltzmann method**. 2015. Dissertação (Mestrado) — Universidade de Campinas, Campinas, 2015.

RINALDI, P. R.; DARI, E.; VÉNERE, M. J.; CLAUSSE, A. A lattice-Boltzmann solver for 3D fluid simulation on GPU. **Simulation Modelling Practice and Theory**, v. 25, p. 163–171, 2012.

SAEIDI, S.; KHODADADI, J. Forced convection in a square cavity with inlet and outlet ports. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 49, n. 11, p. 1896 – 1906, 2006.

SANDOVAL, D. W. L. **Revisiting grid refinement algorithms for the lattice Boltzmann method**. 2012. Tese (Doutorado) — University of Geneva, 2012.

SHAN, X.; YUAN, X.-F.; CHEN, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier-Stokes equation. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 550, p. 413–441, 2006.

TÖLKE, J.; KRAFCZYK, M. TeraFLOP computing on a desktop PC with GPUs for 3D CFD. **International Journal of Computational Fluid Dynamics**, v. 22, n. 7, p. 443–456, 2008.

VIGGEN, E. **The lattice Boltzmann method: Fundamentals and acoustics**. 2014. Tese (Doutorado), Trondheim, 2014.

WOLF-GLADROW, D. A. **Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models: an introduction**. Berlin: Springer, 2004.

WOODS, L. C. **An introduction to the kinetic theory of gases and magnetoplasmas**. [S.l.]: Oxford University Press, 1993.

XI, H.; PENG, G.; CHOU, S.-H. Finite-volume lattice Boltzmann method. **Physical Review E**, v. 59, n. 5, p. 6202, 1999.

XIAN, W.; TAKAYUKI, A. Multi-GPU performance of incompressible flow computation by lattice Boltzmann method on GPU cluster. **Parallel Computing**, v. 37, n. 9, p. 521–535, 2011.

ZHAO-LI, G.; CHU-GUANG, Z.; BAO-CHANG, S. Non-equilibrium extrapolation method for velocity and pressure boundary conditions in the lattice Boltzmann method. **Chinese Physics**, v. 11, n. 4, p. 366, 2002.

ZOU, Q.; HE, X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. **Physics of Fluids**, v. 9, n. 6, p. 1591–1598, 1997.

ZOU, Q.; HOU, S.; CHEN, S.; DOOLEN, G. D. A improved incompressible lattice Boltzmann model for time-independent flows. **Journal of Statistical Physics**, v. 81, n. 1-2, p. 35–48, 1995.

Anexos

ANEXO A – TRABALHOS EM CONGRESSOS

Os trabalhos realizados pelo grupo, submetidos e aceitos em congresso estão anexados a seguir.

INFLUÊNCIA DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO NA CONVERGÊNCIA DA SOLUÇÃO DE ESCOAMENTO INCOMPRESSÍVEL EM UM CANAL BIDIMENSIONAL PELO MÉTODO DE LATTICE-BOLTZMANN

Luiz Eduardo Czelusniak, Térmica e Fluidos, luiz.czelusniak@usp.br
Vinicius Pessoa Mapelli, Térmica e Fluidos, vinicius.mapelli@usp.br
Matheus dos Santos Guzella, Térmica e Fluidos, matheusguzella@gmail.com
Gustavo dos Santos Ribeiro, Térmica e Fluidos, gustavo.srbr@gmail.com
Luben Cabezas-Gómez, Térmica e Fluidos, lubencg@sc.usp.br

Resumo. Uma análise comparativa entre diferentes estratégias de condição de contorno (*link-wise & wet-node*) para o Método de Lattice Boltzmann é apresentada. As estratégias foram aplicadas ao problema bidimensional de escoamento entre placas planas paralelas. Como ferramenta de análise, desenvolveu-se um mapa de convergência para cada estratégia, em função do parâmetro de relaxação e da velocidade de entrada. Também comparou-se os resultados de alguns casos com a solução analítica, de forma a avaliar a capacidade de cada estratégia em reproduzir a solução desejada. Os resultados foram compatíveis com o obtido na literatura, mostrando uma tendência de maior convergência para valores maiores do parâmetro de relaxação, tanto para a estratégia *link-wise* quanto para a *wet-node*. Também observou-se o comportamento oscilatório de algumas soluções, devido ao esquema numérico empregado.

Palavras chave: Simulação Numérica, Método de Lattice Boltzmann, Convergência Numérica.

1. INTRODUÇÃO

O Método Lattice Boltzmann (MLB) é uma técnica de simulação de problemas termofluidodinâmicos que tem ganhado destaque nas últimas décadas no ambiente acadêmico e industrial pela facilidade de paralelização, pela redução do custo computacional devido à habilidade inerente ao método de relacionar pressão e velocidade, evitando a resolução da equação de Laplace e pela facilidade de captura de interface. Dentre os trabalhos realizados no âmbito de problemas termofluidodinâmicos, pode-se citar Krüger *et al.* (2017), Wolf-Gladrow (2000), He e Luo (1997), Hou *et al.* (1995).

O MLB é baseado em uma abordagem em escala mesoscópica, utilizando conceitos da Teoria Cinética para analisar a dinâmica de partículas. Através da análise de Chapman-Enskog (Chapman e Cowling, 1970), um método multi-escala para solução de problemas de perturbação, é possível mostrar que a equação discretizada do Método Lattice Boltzmann reproduz o comportamento das equações de Navier-Stokes, mostrando sua capacidade de resolução de problemas fluidodinâmicos.

Uma das dificuldades que surgem ao se utilizar o MLB na resolução de um problema é o tratamento das condições de contorno. Isso porque o método trabalha com variáveis mesoscópicas e as condições de contorno físicas estão relacionadas às variáveis macroscópicas do problema, como velocidade ou pressão. Dessa forma, diferentes configurações mesoscópicas podem reproduzir as mesmas condições macroscópicas, e surgem um grande número de abordagens distintas. Com essa variedade de métodos de implementação de uma mesma condição de contorno, cresce o interesse de estudo da influência dessas condições na convergência e estabilidade do problema.

Nesse contexto, o presente estudo visa utilizar o Método Lattice Boltzmann na solução de um problema em regime permanente de desenvolvimento de escoamento bidimensional entre placas planas, utilizando condições de contorno bastante conhecidas na literatura como a condições de Zou & He (1997) e *halfway bounce-back*, e analisando para quais parâmetros de relaxação e entrada essas abordagens conseguem reproduzir resultados convergentes.

2. MODELO MATEMÁTICO

2.1. Definição do problema

O modelo físico escolhido para o estudo de convergência foi o escoamento bidimensional de um fluido incompressível entre placas planas paralelas, como o apresentado na Fig. (1).

Figura 1. Problema de desenvolvimento de escoamento bidimensional de um fluido incompressível entre placas planas paralelas.

O escoamento parte de um perfil de entrada com velocidade linear uniforme, sendo imposto uma condição de não-deslizamento nas paredes e uma densidade conhecida na seção de saída. O escoamento desenvolve-se completamente até apresentar o perfil parabólico, como é conhecido para a solução do escoamento de Poiseuille (Krüger *et al.*, 2017).

Nas simulações realizadas, comparou-se o perfil obtido em regime permanente com a solução analítica. Para encontrar um determinado comprimento em que o escoamento estivesse próximo do completamente desenvolvido, utilizou-se as informações contidas no trabalho de Lautrup (2013). A relação entre o comprimento de desenvolvimento L e a distância entre as placas H relaciona-se com o número de Reynolds Re , segundo a seguinte relação:

$$L/H = k * Re \quad (1)$$

Com $k = 0.063$ para $Re \gg 1$.

2.2. Método de Lattice Boltzmann com modelo BGK

O método de Lattice Boltzmann baseia-se na discretização da equação de Boltzmann, a qual descreve a evolução da função distribuição das partículas, que está relacionada a probabilidade de se encontrar uma partícula, com velocidade e , em uma posição x em um determinado instante t . A equação de Boltzmann pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} + e \cdot \nabla f(x,t) = \Omega(x,t) \quad (2)$$

O termo do lado direito da equação de Boltzmann é conhecido como termo de colisão, que corresponde ao efeito que as colisões entre as partículas possuem na evolução da função distribuição. Um modelo simplificado do termo de colisão que permite simular um fluido com comportamento macroscópico similar ao da equação de Navier-Stokes, é o modelo de BGK. A equação de Boltzmann com termo de colisão de BGK é dado por (Guo e Shu, 2013):

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} + e \cdot \nabla f(x,t) = - \frac{f(x,t) - f^{eq}(x,t)}{\tau} \quad (3)$$

Discretizando a equação de Boltzmann, nas coordenadas relacionadas a velocidade, posição e tempo (Krüger *et al.*, 2017), obtém-se a equação de Lattice Boltzmann:

$$f_i(x + e_i \cdot \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] \quad (4)$$

A equação de Boltzmann foi discretizada espacialmente em determinados nós, dentro de uma malha uniforme. Para cada nó, num certo instante de tempo, a função de distribuição é determinada para certas velocidades específicas, que são dadas pela forma do *lattice* adotado. O *lattice* adotado para esse problema é o D2Q9 (Fig. (2)), que permite uma discretização que mantém o comportamento macroscópico da equação de Navier-Stokes.

Figura 2. *Lattices* no modelo D2Q9 (Bettaibi *et al.*, 2016)

Na configuração adotada a função de distribuição é dividida em 9 componentes sendo que cada índice i representa uma função de distribuição respectiva a uma velocidade discreta dada pelo *lattice* D2Q9. As velocidades discretas para este caso são dadas por:

$$\mathbf{e}_i = \begin{cases} (0,0), i = 0 \\ c \left(\cos \left[(i-1) \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[(i-1) \frac{\pi}{4} \right] \right), i = 1,2,3,4 \\ \sqrt{2} c \left(\cos \left[(i-1) \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[(i-1) \frac{\pi}{4} \right] \right), i = 5,6,7,8 \end{cases} \quad (5)$$

Sendo c dado pela razão entre o espaçamento entre os lattices e o intervalo de tempo entre iterações ($c = \delta/\Delta t$). A função de distribuição de equilíbrio utilizada permite a simulação de problemas de escoamentos incompressíveis em regime permanente (Krüger *et al.*, 2017):

$$f_i^{eq} = w_i \left[\rho + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{u^2}{2c_s^2} \right] \quad (6)$$

Em que w_i corresponde aos fatores de ponderação do *lattice*, $\mathbf{u}$ corresponde ao vetor velocidade e ρ corresponde a densidade. Os fatores de ponderação de uma célula D2Q9 são dados pelo vetor:

$$\mathbf{w}_i = [4/9 \ 1/9 \ 1/9 \ 1/9 \ 1/9 \ 1/36 \ 1/36 \ 1/36 \ 1/36]^T \quad (7)$$

O fator de relaxação τ do termo de BGK é calculado a partir da viscosidade cinemática pela relação:

$$\nu = c_s^2(\tau - 1/2)\delta \quad (8)$$

Em que c_s corresponde a velocidade do som. Para a estrutura D2Q9, a velocidade do som c_s é expressa por:

$$c_s = \frac{c}{\sqrt{3}} \quad (9)$$

O problema do desenvolvimento de escoamento de um fluido incompressível em placas paralelas foi resolvido utilizando duas abordagens distintas: *wet-node* (*lattices* nos centros das células computacionais) e *link-wise* (*lattices* nos vértices das células computacionais). Na primeira estratégia, foi utilizado a condição de contorno de Zou e He (1997) para a entrada (perfil de velocidade uniforme), saída (pressão conhecida) e paredes (não-deslizamento). Na segunda abordagem, utilizou-se a condição de contorno conhecida como *halfway bounce-back* para as paredes e entrada (com adição de termos para levar em conta a velocidade de entrada). Para a saída com pressão conhecida, utilizou-se o esquema chamado de *anti-bounce back*, método utilizado nos trabalhos de Ginzburg *et al.* (2008) e Izquierdo e Fuego (2008). Dessa forma, manteve-se a coerência entre a geometria física do problema, a implementação das condições de contorno e as abordagens *link-wise* e *wet-node*, segundo a visão apresentada no trabalho de Krüger *et al.* (2017).

Como critério para avaliar a convergência do solução, utilizou-se a seguinte relação:

$$\epsilon = \sqrt{\frac{\sum (u_{k+1}(x,t) - u_k(x,t))^2}{\sum (u_k(x,t))^2}} \quad (10)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Na abordagem *wet-node*, foi utilizada uma malha de 3001 *lattices* na direção axial do escoamento (direção x) e 51 *lattices* na direção y , enquanto que para a abordagem *link-wise*, para manter a coerência entre os resultados, utilizou-se 3000 *lattices* na direção x e 50 na direção y . A convergência do método foi estudada variando o fator de relaxação entre 0,6 e 1,0 e a velocidade de entrada entre 0,001 e 0,5 em unidades de *lattices*, correspondendo a uma variação no Reynolds entre 0,3 e 750. Ao todo, foram investigados 264 pontos, para cada tipo de abordagem. Inicialmente, 64 pontos foram simulados para avaliar a posição da região de convergência. Posteriormente, 160 pontos foram utilizados para o refinamento da região de transição (de casos convergentes para não-convergentes). Cada um dos casos estudados foram simulados até que o critério de parada, descrito na Eq. (10), atingisse um valor igual ou menor a tolerância de 10^{-6} .

3.1 Comparação com a solução analítica

Antes de apresentar as análises referentes aos mapas de convergência, serão apresentados os comparativos dos resultados obtidos pelo método de Lattice Boltzmann, com a solução analítica do perfil de velocidades da região com escoamento desenvolvido.

Para a comparação dos resultados, optou-se pelo caso com fator de relaxação igual a 0,76 e velocidade de entrada de aproximadamente 0,22 (em unidades de *lattices*), resultando em um número de Reynolds de 125, por ser um caso de baixo erro, e, portanto, adequado para exibir a capacidade do método. Os resultados obtidos pela abordagem *link-wise* podem ser observados nas Figs. (3) e (4).

Figura 3 - Perfis de velocidade do escoamento ao longo da direção axial comparados com a solução analítica, obtidos pela abordagem *link-wise*.

Em relação ao desenvolvimento do escoamento, observamos na Fig. (3) que o resultado do comprimento de desenvolvimento obtido pela simulação é compatível com o proposto pela literatura. Nesse caso específico, o comprimento de desenvolvimento é calculado para a posição axial igual a 473 (em unidades de *lattices*), e conseguimos observar que o perfil de velocidade obtido nessa posição é muito coerente com o resultado esperado pela solução analítica. Uma observação interessante inerente à abordagem *link-wise* pode ser feita em relação aos nós mais próximos das paredes. Nessa abordagem, a posição física do nó está deslocada de, aproximadamente, $\frac{\Delta x}{2}$ da parede, e por isso, as velocidades nesses nós (posição $y=0$ e 50) são diferentes de zero.

Na Fig. (4), conseguimos notar a evolução da velocidade da linha central ao longo da direção axial do escoamento. Com esse resultado, observamos que a linha central tende a 1,5 vezes a velocidade de entrada, como esperado pela resolução analítica para esse problema. Além disso, é possível observar uma pequena perturbação dessa velocidade próxima à região da saída. Essas perturbações numéricas podem se intensificar dependendo dos fatores de relaxação e velocidade de entrada escolhidos. Na seção posterior, algumas observações a respeito dessas perturbações serão apresentadas com um pouco mais de detalhes.

Figura 4 - Velocidade da linha central ao longo da direção axial do escoamento, obtidos pela abordagem *link-wise*.

O mesmo caso foi simulado usando a estratégia *wet-node*, os resultados podem ser observados nas Figs. (5) e (6). É interessante notar que a velocidade média do fluido nos nós de fronteira representando a parede é igual a zero, como o desejado para a condição de não-deslizamento. Esse resultado obtido é coerente com a estratégia *wet-node*, em que os *lattices* da fronteira são interpretados como estando posicionados infinitesimalmente próximos da fronteira física. Porém, a velocidade na linha central ao longo do comprimento das placas não se aproximou tanto da solução analítica para a região desenvolvida (1.5 vezes a velocidade da seção de entrada) quanto ocorreu para a técnica *link-wise*. Esse fato provavelmente está relacionado com o problema da conservação de massa que essa técnica apresenta, como descrito por Krüger *et al.* (2017).

Figura 5 - Perfis de velocidade do escoamento ao longo da direção axial comparados com a solução analítica, obtidos pela abordagem *wet-node*.

Figura 6 - Perfis de velocidade do escoamento ao longo da direção axial comparados com a solução analítica, obtidos pela abordagem *wet-node*.

3.2 Mapas de convergência

Os mapas de convergência são apresentados nas Figs. (7) e (8), com o eixo das abscissas representando o fator de relaxação e o eixo das ordenadas a velocidade de entrada, em unidades de *lattices*.

Figura 7 - Mapa de convergência do problema de desenvolvimento de escoamento em um canal, utilizando a abordagem *link-wise*.

Observado os mapas de convergência gerados através das abordagens *link-wise* e *wet-node*, nota-se que ambos seguem uma certa tendência de aumento da gama de velocidades em que há convergência à medida que o fator de relaxação aumenta. Essa tendência é condizente com resultados apresentados na literatura, como de Krüger *et al.* (2017) e Niu *et al.* (2004).

Qualitativamente, é possível observar que a região de casos estáveis é ligeiramente maior utilizando a abordagem *wet-node* em relação ao uso da abordagem *link-wise*. Tal fato pode levar a uma conclusão precipitada de que a abordagem *wet-node* seria a mais adequada para o problema proposto. No entanto, é interessante notar que a convergência do caso para determinados parâmetros não garante, necessariamente, que o caso tenha convergido para uma solução correspondente com o esperado, devido ao aparecimento de perturbações nas velocidades, como visto na Fig. (10).

A respeito das oscilações numéricas, foi possível verificar que as suas amplitudes são mais relevantes à baixíssimas velocidades (0,001 em unidades de *lattices*) e também a velocidades mais altas, em torno de 0,25, sendo provavelmente um dos fatores relevantes para a instabilidade dos pontos nessa região. Por exemplo, a Fig. (9) apresenta o resultado da velocidade da linha central para fator de relaxação de 0,97 e velocidade de entrada de 0,23 (em unidades de *lattices*). Pode-se observar a grande amplitude de oscilação que foi atingida próxima à região de saída do escoamento, o que

provavelmente tornou o caso instável. Mesmo assim, consegue-se notar que a solução fora dessa região de alta amplitude de oscilação ainda é bem próximo do que seria do resultado esperado.

Figura 8 - Mapa de convergência do problema de desenvolvimento de escoamento em um canal, utilizando a abordagem *wet-node*.

Figura 9 - Velocidade da linha central utilizando abordagem *link-wise* com fator de relaxação de 0,97 e velocidade de entrada 0,23 (em unidades de *lattices*).

Durante a simulação das condições do caso apresentado na Fig. 9, porém utilizando a abordagem *wet-node*, não conseguiu-se obter um erro inferior a tolerância de 10^{-6} . Após um longo tempo de processamento, a simulação foi interrompida e observou-se que o erro estava oscilando dentro de uma faixa de 10^{-4} e 10^{-5} . Os resultados desta simulação estão presentes nas Figs. (10.a) e (10.b). Embora o resultado obtido esteja bem próximo da solução analítica, na região de saída é possível observar pequenas oscilações na curva de velocidade para a linha central do canal. Sendo possível que essas oscilações sejam a causa da simulação não ter alcançado a tolerância exigida. No mapa de convergência, Fig. (8), representou-se este ponto como estável.

Figura 10 - a) Velocidade da linha central utilizando abordagem *wet-node* com fator de relaxação de 0,97 e velocidade de entrada 0,23 unidades de lattice. b) Destaque para a região de saída da curva a).

4. CONCLUSÕES

A partir das simulações realizadas e resultados obtidos, é possível notar a capacidade do método de Lattice Boltzmann, com o modelo BGK, em resolver o problema bidimensional de desenvolvimento de escoamento de um fluido incompressível em um canal, em regime permanente. Tanto a abordagem *link-wise* quanto a abordagem *wet-node* foram comparadas com a solução analítica do perfil desenvolvido e com o comprimento de desenvolvimento esperado, apresentando boa concordância.

Em relação aos mapas de convergência, foi possível observar uma região de convergência maior na abordagem *wet-node* em relação à abordagem *link-wise*. No entanto, ainda é necessária uma análise mais aprofundada envolvendo os erros em relação à solução analítica e ferramentas matemáticas de análises de estabilidade e convergência, para, assim, obter conclusões mais rigorosas a respeito de qual dos métodos é mais adequado para o problema proposto.

5. REFERÊNCIAS

- BETTAIBI, S.; KUZNIK F.; SEDIKI, E. Hybrid LBM-MRT model coupled with finite difference method for double-diffusive mixed convection in rectangular enclosure with insulated moving lid. **Physical A**, Vol. 444, p. 311–326, 2016.
- CHAPMAN, Sydney; COWLING, Thomas George. **The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases**. Cambridge university press, 1970.
- GINZBURG, Irina; VERHAEGHE, Frederik; D'HUMIERES, Dominique. Two-relaxation-time lattice Boltzmann scheme: About parametrization, velocity, pressure and mixed boundary conditions. **Communications in computational physics**, v. 3, n. 2, p. 427-478, 2008.

HE, X.; LUO, L.S. Theory of the lattice Boltzmann method: from the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation”. **Physical Review E**, Vol 56, p. 6811-6817, 1997.

HOU, S.; ZOU, Q.; CHEN, S.; DOOLEN, G.; COGLEY, A.C. Simulation of cavity flow by the lattice Boltzmann method. **Journal of Computational Physics**, Vol. 118, pp. 329-347, 1995.

IZQUIERDO, Salvador; FUEYO, Norberto. Characteristic nonreflecting boundary conditions for open boundaries in lattice Boltzmann methods. **Physical Review E**, v. 78, n. 4, p. 046707, 2008.

KRÜGER, T.; KUSUMAATMAJA, H.; KUZMIN, A.; SHARDT, O.; SILVA, G.; VIGGEN, E. M. Boundary and Initial Conditions. **The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice**. The Lattice Boltzmann Method. Graduate Texts in Physics. Springer International Publishing, 2017, cap. 5, p. 153-228.

LAUTRUP, B. Channel Entrance Flow. **Physics of Continuous Matter**, exotic and everyday phenomena in the macroscopic world. Bristol, Institute of Physics, 2013. Disponível em: <<http://www.nbi.dk/~lautrup/continuousmatter2/addenda/channelentryflow.pdf>>

NIU, X. D. et al. Investigation of stability and hydrodynamics of different lattice Boltzmann models. **Journal of statistical physics**, v. 117, n. 3-4, p. 665-680, 2004.

WOLF-GLADROW, D.A. **Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction**. Springer-Verlag, Berlin, 2000.

ZOU, Q.; HE, X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. **Phys. Fluids**, Vol. 9, pp. 1591-1598, No. 6, 1997.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer ao CNPq, CAPES e FAPESP pelo apoio.

7. RESPONSABILIDADE PELAS INFORMAÇÕES

O(s) autor(es) é (são) os únicos responsáveis pelas informações incluídas neste trabalho.

Solução Numérica da Equação de Burgers Viscosa pelo Método de Lattice-Boltzmann

Vinícius Pessoa Mapelli¹

Luiz Eduardo Czelusniak²

Luben Cabezas-Gómez³

Escola de Engenharia de São Carlos, USP

Nas últimas décadas, o método de Lattice-Boltzmann (MLB), ou Boltzmann em rede, tem ganhado um certo destaque como um método numérico alternativo e promissor para a solução de problemas físicos e matemáticos. Diferentemente das técnicas tradicionais, o MLB tem origem na Teoria Cinética dos Gases [1].

As equações de Burgers geralmente aparecem como simplificações de equações governantes de fenômenos físicos, como por exemplo, a equação de conservação de quantidade de movimento de escoamentos. A versão unidimensional, desprezando o gradiente de pressão, pode ser descrita por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0. \quad (1)$$

Em que u é a velocidade, x a coordenada espacial, t a coordenada temporal e ν a viscosidade cinemática. A equação (1) é conhecida como Equação Viscosa de Burgers. No presente trabalho, procurou-se resolvê-la considerando um domínio $0 \leq x \leq 1$ e condição inicial $u(0, t) = u(1, t) = 0$ para $t \geq 1$ e $u(x, 1) = x[1 + (t/t_0)^{(1/2)} \exp(x^2/4\nu)]^{(-1)}$ para $0 \leq x \leq 1$, sendo $t_0 = \exp(1/8\nu)$. Esse problema foi estudado no trabalho [2], através de uma equação de equilíbrio modificada com a inclusão de um parâmetro livre.

Nesse trabalho, também foi realizada uma pequena modificação no método tradicional para solução de problemas de advecção-difusão [3]. No entanto, diferentemente do trabalho de [2], adiciona-se uma constante pré-definida na equação de equilíbrio, que é dada abaixo:

$$f_i^{eq} = w_i u \left[1 + \frac{0,5c_i u}{c_s^2} + \frac{(0,5c_i u)^2}{c_s^2} - \frac{3}{8} u^2 \right] \quad (2)$$

Sendo a velocidade do som no lattice $c_s^2 = 1/3$, os pesos $w_i = (1/6, 1/6, 2/3)$ e as velocidades $c_i = (1, -1, 0)$. Assim, pode-se resolver a equação de Lattice-Boltzmann:

$$f(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau} \right) f(x, t) + \frac{\Delta t}{\tau} f_i^{eq} \quad (3)$$

¹vinicius.mapelli@usp.br

²luiz.cze@usp.br

³lubencg@sc.usp.br

Em que o fator de relaxação τ possui a seguinte relação com a viscosidade cinemática: $\nu = c_s^2(\tau - 0,5\Delta t)$.

Os resultados foram comparados com a solução analítica do problema, para dois conjuntos de parâmetros: $\Delta x = 0,01$, $\Delta t = 0,002$ e $\nu = 0,005$; e para $\Delta x = 0,005$, $\Delta t = 0,0005$ e $\nu = 0,0005$. Os resultados obtidos são mostrados na figura (1). Também, o erro foi calculado para o resultado com $\Delta x = 0,01$, $\Delta t = 0,002$ e $\nu = 0,005$ pelo critério de erro global relativo proposto no trabalho de [2]. O valor encontrado foi de $2,6065 \cdot 10^{-4}$, sendo menor que o menor dos erros encontrados por [2] em função de seu parâmetro livre e tempo de relaxação, $2,6738 \cdot 10^{-4}$.

Figura 1: Comparação entre resultados numéricos(pontos) e analíticos (linha contínua).

Agradecimentos: Este trabalho recebeu suporte financeiro e recursos computacionais fornecidos pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), processo 2016/095090-1.

Referências

- [1] Y. Duan, R. Liu and Y. Jiang, Lattice Boltzmann model for the modified Burgers' equation, *Applied Mathematics and Computation*, 2002.DOI: 10.1016/j.amc.2008.01.020.
- [2] Y. Gao, L. Le and B. Shi, Numerical solution of Burgers' equation by lattice Boltzmann method, *Applied Mathematics and Computation*, 2013. DOI: 10.1016/j.amc.2013.01.056.
- [3] T. Kruger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva and E. M. Vigen. Lattice Boltzmann for Advection-Difussion Problems. In: _____. **The Lattice Boltzmann Method**, 2017, cap. 8, p. 297-329.

ENCIT-2018-0523

CONVECTION STUDY IN A SQUARE CAVITY USING LATTICE BOLTZMANN METHOD

Luiz Eduardo Czelusniak

Vinícius Pessoa Mapelli

Luben Cabezas-Gómez

Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, Avenida Trabalhador são-carlense, 400 - Parque Arnold Schmidt, São Carlos - SP, 13566-590, Brazil

luiz.czelusniak@usp.br, vinicius.mapelli@usp.br, lubencg@sc.usp.br

Matheus dos Santos Guzella

Instituto de Ciência e Tecnologia, Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Rodovia MGT 367, km 583, nº 5000 Alto da Jacuba, Diamantina - MG, 39100-000, Brazil

matheus.guzella@ict.ufvjm.edu.br

Abstract. Fluid flows and heat transfer processes inside cavities has been an active study field due to its geometry simplicity and capability of reaching complex regimes, presenting vortices and recirculation. Since this problem has usual occurrence in engineering applications, many researchers have assessed square cavities using different numerical simulation approaches. In this context, Lattice-Boltzmann method (LBM) is one of the tools that has gained space in academy over the past two decades. In the present work, Lattice Boltzmann methods are used to solve mass, momentum and energy conservation equations by solving the evolution in time of two distribution functions. A square cavity with a length of size $H = L$ and one inlet and outlet port, sized to $W = 0.25H$, is assessed in different hydrodynamic and thermal conditions. Two distinct LBM methodologies were assessed for this problem: first one solves energy conservation equation as an advection-diffusion of temperature and second one has its formulation based upon total energy field. Numerical results of streamlines, temperature fields, average and local Nusselt number, and dimensionless drop are presented for different flow conditions. Both methodologies were able to capture interesting characteristics of the flow, such as vortices and general trend of local Nusselt number. Further studies are needed to draw deeper conclusions.

Keywords: Forced convection, Lattice Boltzmann Method, Numerical Simulation.

1. INTRODUCTION

Fluid flows and heat transfer processes inside cavities has been an active study field because of the characteristics this sort of problem presents. The main one is its occurrence in several engineering applications, such as heat exchangers, lubrication technology, drying technology, electronics cooling, ventilation of rooms and solar storage (Mioralli *et al.*, 2017). The second reason is its geometry simplicity, which allows researchers use different approaches to this type of problem such as analytical (Bejan, 1980) and numerical solutions (Peng *et al.*, 2003; Guo *et al.*, 2007). Although its geometry simplicity, flows inside cavities can reach complex regimes, presenting vortices and recirculation. And that turns flows inside cavities a very interesting benchmark to check numerical stability and conservation of variables such as mass, momentum and energy.

In numerical methods context, Lattice-Boltzmann method (LBM) is one of the approaches that has gained space in academy over the past two decades. It has shown great potential to solve a range variety of hydrodynamic flows, such as porous media (Guo and Zhao, 2002), acoustics (Brès *et al.*, 2009), multiphase (He *et al.*, 1999), incompressible and even flows with shock waves (Guangwu *et al.*, 1999) and turbulence (Yu *et al.*, 2005; Chen *et al.*, 2004). Although it has shown great performance in isothermal flows, its application to thermal flows is not straightforward. When applied to solving heat transfer flow problems, thermal LBM (TLBM) methods has shown severe instability, limiting TLBM to flows of relatively small Reynolds number. However, many researchers have been working on different strategies to overcome this drawback. The existing TLBM models can be classified into three categories. The first one is to approach temperature as passive scalar, which is advected by velocity field but does not affect flow fields (density or velocity fields) (Lallemand and Luo, 2003). The second category of TLBM consider solving fully compressible Euler or Navier-Stokes equations, by using interpolation advection, by including finite-difference scheme for solving discrete velocity models or by using a larger set of discrete velocities in order to recover continuous energy conservation

equation. The third category of TLBM solves the evolution of traditional velocity distribution function (governed by Boltzmann equation) along with the evolution of a distribution function related to thermal field. For example, He *et al.* (1998) developed a TLBM capable of solving thermal flows including viscous dissipation and pressure work effects. Later, Guo *et al.* (2007) showed a TLBM based on total energy instead of internal energy, what increased locality and numerical stability of results. Also, Chen *et al.* (2012) developed a TLBM based on total enthalpy, which is a common variable in combustion research field.

In the present work, it is proposed to apply TLBM methods to square cavity problems involving forced convection for different hydrodynamic and thermal conditions, using distinct methodologies. Results are compared with traditional CFD results available in literature.

2. METHODS

2.1 Problem description

The proposed problem is based on the work of Mioralli *et al.* (2017). It consists of an incompressible flow inside a two-dimensional square cavity. The cavity has a length of size $H = L$, one inlet port and one outlet port, both of size $W = 0.25 H$. The walls of the cavity are subject to a constant temperature of T_w . The fluid flows into the cavity with assuming uniform velocity and temperature profiles of u_{in} and T_{in} . A schematic drawing of the cavity is shown in Fig. 1.

Figure 1. Schematic drawing of the square cavity (Mioralli *et al.*, 2017).

2.2 Governing Equations

To reproduce the mass, momentum and energy conservation equations with the LBM, it was used two distribution functions: one distribution function f to reproduce the mass and momentum conservation equations and a second distribution function g to reproduce the energy conservation equation, discretized in 9 velocities (D2Q9), following two different approaches.

2.2.1 Methodology 1

In both approaches, evolution of distribution function f in time is governed by discretized Boltzmann equation, also known as Lattice-Boltzmann equation:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t}{\tau_f} [f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x}, t)] \quad (1)$$

Where τ_f is the relaxation parameter. In this approach, incompressible equilibrium distribution function f^{eq} is computed as described in Eq. (2):

$$f_i^{eq} = w_i \rho + w_i \rho_0 \left(\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right) \quad (2)$$

Where ρ is the variable related to pressure variation, ρ_0 is the fluid density and $\mathbf{u}$ is the velocity field. Discretized velocity vector $\mathbf{c}_i$ is defined according to the following D2Q9 lattice:

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} [0, 0] & i = 0 \\ c \left[\cos \left((i-1) \frac{\pi}{2} \right), \sin \left((i-1) \frac{\pi}{2} \right) \right] & i = 1, 2, 3, 4 \\ c \left[\cos \left((i-5) \frac{\pi}{2} \right), \sin \left((i-5) \frac{\pi}{2} \right) \right] & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (3)$$

Where $c = \Delta x / \Delta t$ and $c_s^2 = c$ is the lattice sound speed. The weight coefficients corresponding to discretized velocities are $w_0 = 4/9$, $w_{1 \text{ to } 4} = 1/9$, and $w_{5 \text{ to } 9} = 1/36$. For the advection-diffusion Lattice Boltzmann equation, equilibrium distribution g^{eq} is given by:

$$g_i^{eq} = w_i T \left(1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right) \quad (4)$$

And its evolution in time is solved the same way distribution function f , as described in Eq. (1).

The correspondence between the LB equations and the related conservation equations can be done through a Chapman-Enskog analysis (Krüger *et al.*, 2017), from where it is possible to determine relation between the relaxation parameter and transport coefficients, given by:

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\frac{\tau_f}{\Delta t} - \frac{1}{2} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t}, \quad \alpha = \frac{1}{3} \left(\frac{\tau_g}{\Delta t} - \frac{1}{2} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (5)$$

Where ν is the kinematic viscosity, and α is thermal diffusivity. Velocity and temperature fields can be retrieved computing moments of distribution functions, as described in Eq. (6).

$$\rho_0 = \sum_i f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{c}_i, \quad T = \sum_i g_i \quad (6)$$

Also, Chapman-Enskog analysis allows to recover macroscopic governing equations when solving both distribution functions. The resultant steady state governing equations from this methodology for density, momentum and temperature are shown from Eq. (7) to Eq. (9).

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (7)$$

$$\rho_0 \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla \cdot (\mathbf{S}) \quad (8)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} T) = \nabla (\alpha \nabla T) \quad (9)$$

where $\mathbf{S} = [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]$. The Reynolds number for this flow is defined as $Re = \rho_0 u_{in} H / \mu$.

2.2.2 Methodology 2

As a second approach, a model developed by Guo *et al.* (2007) was used to solve forced convection by relating distribution function g to total energy density field, E .

In this methodology, temporal evolution of distribution function f is solved as in Eq. (1), using compressible equilibrium distribution f^{eq} :

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right) \quad (10)$$

Although this equilibrium distribution function recovers compressible macroscopic equations, compressibility effects can be minimized depending on simulation parameters. In summary, it is desirable that velocities are much lower than lattice speed sound c_s^2 (Guo *et al.*, 2007; Krüger *et al.*, 2017).

Temporal evolution of distribution g is described in Eq. (11).

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = g_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t}{\tau_f} [g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) - g_i(\mathbf{x}, t)] + \Delta t \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau_g}\right) \frac{Z_i}{\tau_{gf}} (f_i - f_i^{eq}) \quad (11)$$

where

$$\frac{1}{\tau_{gf}} = \frac{1}{\tau_g} - \frac{1}{\tau_f} \quad (12)$$

and

$$Z_i = \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2} \quad (13)$$

Equilibrium distribution function g^{eq} is computed as described in Eq. (14) (Guo *et al.*, 2007):

$$g_i^{eq} = w_i \rho c_s^2 \left[\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \left(\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right)^2 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i}{c_s^2} - D \right) \right] + E f_i^{eq} \quad (14)$$

where D is number of dimensions considered in solution, which is considered bidimensional in the present work. Through Chapman-Enskog analysis, it is possible to show this methodology leads to macroscopic equations as described from Eq. (15) to Eq. (17) (Guo *et al.*, 2007).

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (15)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \mathbf{S}) \quad (16)$$

$$\partial_t (\rho E) + \nabla \cdot [(p + \rho E) \mathbf{u}] = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) + \nabla \cdot (\mu \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}) \quad (17)$$

Transport coefficients μ and α follows same relations as in Eq. (5). To maintain consistency between both methodologies, an Eckert number $Ec = 10^{-30}$ (Guo *et al.*, 2007) was assumed in order to maintain viscous effects in energy equation negligible. Compression work effects can be neglected when velocities simulated are considerable lower than lattice speed sound. In this methodology, it was possible to keep $|\mathbf{u}|/c_s^2$ lower than 0.04, except when $Re = 500$, in which incompressible equilibrium function was used. Also transport coefficients were assumed constant, and numerical simulations were performed until steady state were reached.

2.3 Boundary conditions

2.3.1 Methodology I

To assure inlet velocities and no-slip condition at walls, bounce-back rules (Ladd and Verberg, 2001) were applied as it is described in Eq. (18).

$$f_i^*(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}_b, t) - 2w_i \rho_w \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_w}{c_s^2} \quad (18)$$

where subscript b indicates properties evaluated at boundary nodes, and subscript w properties evaluated at the wall location. Also, subscript $\bar{i}$ are related to discretized velocity $\mathbf{c}_{\bar{i}} = -\mathbf{c}_i$, and superscript * represents post collision populations.

A known pressure at outlet port is assured by using anti-bounce-back formulation (Ginzburg *et al.*, 2008) to the unknown populations at the boundary:

$$f_i^*(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) = -f_i^*(\mathbf{x}_b, t) + 2w_i \rho_w \left[1 + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_w)^2}{c_s^4} - \frac{\mathbf{u}_w^2}{2c_s^2} \right] \quad (19)$$

For distribution function g , an anti-bounce back developed by Ginzburg (2005) is applied to unknown populations at the boundary in order to assure Dirichlet conditions at inlet and at the cavity walls:

$$g_i(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) = -g_i^*(\mathbf{x}_b, t) + 2g_i^{eq}(\mathbf{x}_w, t + \Delta t) \quad (20)$$

At the outlet, a zero-gradient temperature in x direction is set by replacing all populations at the boundary nodes by its equilibrium value added to the non-equilibrium contribution extrapolated from adjacent node (Tang, 2005).

$$g_i = g_i^{eq}(\mathbf{x}_b, \mathbf{u}_w, T_w) + [g_i(\mathbf{x}_f) - g_i^{eq}(\mathbf{x}_f)] \quad (21)$$

In this case, macroscopic temperature at the outlet port used to compute equilibrium contribution is calculated by using a second order extrapolation.

2.3.2 Methodology 2

In the second approach, both distributions functions f e g at the boundaries were replaced following the non-equilibrium extrapolation (NEE) formulation described in Eq. (21). At the inlet and walls, where Dirichlet boundary conditions are imposed, application of NEE boundary condition is straightforward. At the outlet port, velocity $\mathbf{u}_w$ can be calculated by imposing known pressure and computing first and second moments using know populations values. Temperature T_w is calculated using a second order extrapolation from adjacent nodes.

2.4 Local and Average Nusselt Number

In order to represent the location of each point of the wall, it was defined an S coordinate system (Fig. 1) based on previous works in the literature (Saedi and Khodadadi, 2006; Mioralli *et al.*, 2017). The interval $S = 0-1$, represents the left side of the cavity, as well as the intervals (1-2), (3-4) and (4-1) represents, respectively, the bottom, right and top sides of the cavity.

A local Nusselt number is defined for each point of the walls, involving the intervals (0.25-1), (1-2), (2.25-3) and (3-4). Then the average Nusselt number for each wall is defined as follows:

$$\overline{Nu}_i = -\frac{1}{(S_{i1}-S_{i2})} \int_{S_{i1}}^{S_{i2}} Nu_i dS \quad (22)$$

where S_{i1} and S_{i2} are S-coordinates of the two ends of the i th wall.

The average Nusselt number for the whole cavity is computed as the weighted average of Nusselt numbers of each wall in relation with the walls sides.

$$\overline{Nu} = \sum_i \frac{\overline{Nu}_i (S_{i2}-S_{i1})}{S_{tot}} \quad (23)$$

2.5 Iterative error and tolerance

As a stopping criteria, the following quantity was calculated for every case:

$$\epsilon_\Phi = \sqrt{\frac{\sum_x (\Phi_k(\mathbf{x}, t) - \Phi_{k-n}(\mathbf{x}, t))^2}{\sum_x \Phi_{k-n}^2(\mathbf{x}, t)}} \quad (24)$$

where Φ subscript indicates which field ϵ variable is related to (velocity or temperature), k indicates actual time step number, and n indicate number of previous time steps. In the present work, it was adopted $n = 100$, and $\epsilon < 10^{-6}$ for both velocity and temperature (energy) fields.

3. RESULTS

The velocity and temperature fields were obtained for a range of Prandtl and Reynolds numbers. After a convergence analysis, the local and average Nusselt numbers were studied for the cavity walls. Also, results for the coefficient of pressure drop, streamlines and temperature fields of the flow are shown in the present work.

3.1 Numerical Convergence

The first step of the work consisted in the analysis of the mesh size effects in the results obtained from simulations. For the methodology 1 with the prescribed boundary conditions, simulations were performed with an initial mesh size of 160 nodes in each size of the cavity and a grid refinement was conducted until convergence of the average Nusselt number was obtained. An example of the procedure adopted can be seen in Fig 2.

Figure 2. Convergence Analysis as a Function of the Grid Size.

As observed, the number of nodes in the grid in each side of the cavity was changed from 160 to 960. A convergence pattern is seen starting from the mesh with 480 nodes per side. After doing the same analysis for different Reynolds and Prandtl number cases, it was determined that the grid size of 640 is representative for all simulations. As a consequence, the results presented in next sections for this were performed using this mesh size.

A similar procedure was executed for the study with the methodology 2, and 1025 nodes per side of the cavity were assumed to generate numerical results presented in next sections.

3.2 Local and Average Nusselt Numbers

The results for the local Nusselt number in the walls of the square cavity for the two adopted methodologies are shown on Fig 3. Following the procedure done by Mioralli *et al.* (2017), the results are plotted against the S coordinate system along the walls. The intervals $S = (0, 0.25)$ and $(2, 2.25)$ corresponds to the inlet and outlet ports, respectively, where local Nusselt number is not defined. Due to the boundary conditions imposed, the temperature gradient from wall to fluid goes to infinity close to the inlet port, forcing the local Nusselt to diverge. As a consequence, the second methodology achieved higher Nusselt numbers close to the inlet port, since a finer mesh was used in this methodology, meaning that nodes closer to the port were obtained in comparison with the first methodology. It is also observed that the local Nusselt goes to zero near the left bottom and right top corners.

Figure 3. Comparison of local Nusselt between methodology 1 (top line) and methodology 2 (bottom line).

Comparing results from the two methodologies, one can observe that the general behavior of the curves are similar. Also, comparing these approaches with Mioralli *et al.* (2017), it is observed great accordance in the curves trends. Another result studied in this work is the average Nusselt number for mesh sizes of 640 and 1025 nodes per cavity side, for the two thermal approaches and for each Reynolds and Prandtl number, as shown in Tab. 1.

Table 1. Average Nusselt number calculated using methodology 1 and 2, presented in this work .

Re/Pr	Pr = 0.7		Pr = 3.0		Pr = 5.0	
	Methodology 1	Methodology 2	Methodology 1	Methodology 2	Methodology 1	Methodology 2
Re = 50	3.0817	3.2084	5.4226	5.2592	6.3307	6.1074
Re = 100	4.3045	4.2452	7.2958	6.8022	8.5421	7.9474
Re = 500	9.6021	7.9795	14.676	12.785	18.551	15.144

The relative difference between the two methodologies for the local Nusselt number can be seen in Tab. 2. It is observed that results obtained in the two cases have smaller differences at lower Reynolds number flows and increasing discrepancies for higher Reynolds numbers. The energy model presented by Guo *et al.* (2007) was tested for low Reynolds number flows and the validity of the model for higher values of this dimensionless parameter is not established. This fact can be an influence of the differences observed between the two methodologies. The values obtained using the first methodology presented are closer to the ones obtained by Mioralli *et al.* (2017) for the same values of Reynolds and Prandtl numbers. Both methodologies predicted an increase of the average Nusselt as Reynolds and Prandtl numbers increases.

Table 2. Relative difference between average Nusselt numbers from methodology 1 and 2.

Re/Pr	Pr = 0.7	Pr = 3.0	Pr = 5.0
Re = 50	4%	3%	4%
Re = 100	1%	7%	7%
Re = 500	17%	13%	18%

3.3 Streamlines, Temperature Field and Coefficient of Pressure Drop

The velocity and temperature fields were obtained for the Prandtl numbers of 0.7, 3 and 5, and Reynolds numbers of 50, 100 and 500. Figure 4 presents the streamlines and the temperature field obtained from the performed numerical simulations. Two rotating vortices are present at the upper right and bottom left regions of the domain. As expected,

these rotating vortices grows as the Reynolds number increases, which means inertial effects becomes more relevant to the flow. Also, establishment of a secondary vortex is observed in the bottom-left corner for higher Reynolds numbers.

Figure 4. Streamlines and temperature field for Reynolds number equal to 50, 100 and 500 and constant Prandtl number equal to 0.7, 3 and 5.

It is noticed that the vortices increases the fluid mixing inside the cavity. In this way, for stronger vortices, it is observed lower fluid temperatures near the walls, which increases the temperature gradients in these regions. This fact is corroborated by the average Nusselt number analysis. Since the intensity of the vortices depends on the Reynolds number, it is expected that this parameter have a great influence on the average Nusselt number, as observed earlier.

The effect of the increasing of Prandtl number is associated with the increase of Péclet number, which is related the ratio between the advection and diffusion effects. For higher Péclet numbers, advection effects are more relevant in comparison with diffusion effects. In this sense, it is expected that the fluid that follows the streamlines linking the inlet port to the outlet port exhibit a lower temperature rise, as the Prandtl number increases. Both methodologies were able to reproduce this behaviour.

In Tab. 3, results of the dimensionless pressure drop are shown. It can be observed that it is an inverse function of the Reynolds number and independent of the Prandtl number, as the present study is dealing with incompressible flows, in which case the hydrodynamics are decoupled from the thermal effects.

Table 3. Dimensionless pressure drop computed using methodology 1 and 2.

Re/Pr	Pr = 0.7		Pr = 3.0		Pr = 5.0	
	Methodology 1	Methodology 2	Methodology 1	Methodology 2	Methodology 1	Methodology 2
Re = 50	4.6865	5.1549	4.6865	5.1549	4.6865	5.1549
Re = 100	3.0749	3.3874	3.0749	3.3873	3.0749	3.387
Re = 500	1.9604	2.0758	1.9604	2.0759	1.9604	2.0759

4. CONCLUSIONS

In this work, two methodologies of the Thermal Lattice Boltzmann Method (TLBM) were applied to solve the thermo-hydraulic phenomena inside a square cavity under different flow conditions. The methodologies were developed considering the Chapman-Enskog Expansion, in order to ensure that the Navier-Stokes and Energy Equations were correctly solved. These distinct approaches were confronted first considering the local Nusselt number and later for the average Nusselt number. Excellent agreement were observed for low Reynolds number and higher errors were noticed when the Reynolds number was increased. Results of streamlines and temperature field were presented and were in accordance with results available in the literature. Finally, the dimensionless pressure drop was computed and results showed coherence with what is expected from fluid mechanics theory. Based on the presented results, it is shown that Lattice Boltzmann Method can correctly solve the thermal flow inside a square cavity under different conditions. In addition, this methodology can be easily applied to similar problems.

5. ACKNOWLEDGMENTS

This work is supported by Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP, grant: 2016/095090-1).

6. REFERENCES

- Bejan, A., 1980. "A synthesis of analytical results for natural convection heat transfer across rectangular enclosures". *International Journal of Heat Mass Transfer*, Vol. 23, pp. 723–726.
- Brès, G., Pérot, F. and Freed, D., 2009. "Properties of the lattice boltzmann method for acoustics". In *15th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference (30th AIAA Aeroacoustics Conference)*. p. 3395.
- Chen, H., Orszag, S.A., Staroselsky, I. and Succi, S., 2004. "Expanded analogy between boltzmann kinetic theory of fluids and turbulence". *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 519, pp. 301–314.
- Chen, S., Luo, K. and Zheng, C., 2012. "A simple enthalpy-based lattice boltzmann scheme for complicated thermal systems". *Journal of Computational Physics*, Vol. 231, No. 24, pp. 8278–8294.
- Ginzburg, I., 2005. "Equilibrium-type and link-type lattice Boltzmann models for generic advection and anisotropic-dispersion equation". *Advances in water resources*, 28(11), 1171-1195.
- Ginzburg, I., Verhaeghe, F. and d'Humieres, D., 2008. "Two-relaxation-time lattice Boltzmann scheme: About parametrization, velocity, pressure and mixed boundary conditions". *Communications in computational physics*, 3(2), 427-478.
- Guangwu, Y., Yaosong, C. and Shouxin, H., 1999. "Simple lattice boltzmann model for simulating flows with shock wave". *Physical review E*, Vol. 59, No. 1, p. 454.
- Guo, Z. and Zhao, T., 2002. "Lattice boltzmann model for incompressible flows through porous media". *Physical Review E*, Vol. 66, No. 3, p. 036304.
- Guo, Z., Zheng, C., Shi, B. and Zhao, T., 2007. "Thermal lattice boltzmann equation for low mach number flows: decoupling model". *Physical Review E*, Vol. 75, No. 3, p. 036704.
- He, X., Chen, S. and Doolen, G.D., 1998. "A novel thermal model for the lattice boltzmann method in incompressible limit". *Journal of Computational Physics*, Vol. 146, No. 1, pp. 282–300. doi:10.1006/jcph.1998.6057.
- He, X., Chen, S. and Zhang, R., 1999. "A lattice boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of rayleigh–taylor instability". *Journal of Computational Physics*, Vol. 152, No. 2, pp. 642–663.
- Krüger, T., Kusumaatmaja, H., Kuzmin, A., Shardt, O., Silva, G. and Viggen, E.M., 2017. *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*. Springer International Publishing.

- Ladd, A. J. C. and Verberg, R., 2001. "Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions". *Journal of statistical physics*, v. 104, n. 5-6, p. 1191-1251.
- Lallemand, P. and Luo, L.S., 2003. "Theory of the lattice boltzmann method: Acoustic and thermal properties in two and three dimensions". *Physical review E*, Vol. 68, No. 3, p. 036706.
- Mioralli, P., Scalon, V., Avallone, E. and Verdério Júnior, S., 2017. "Analysis of laminar forced convection inside a square ventilated cavity using the openfoam". *Engenharia Térmica (Thermal Engineering)*, Vol. 16, No. 1, pp. 66-74.
- Peng, Y., Shu, C. and Chew, Y., 2003. "Simplified thermal lattice boltzmann model for incompressible thermal flows". *Physical Review E*, Vol. 68, p. 026701.
- Tang, G. H., Tao, W. Q., and He, Y. L., 2005. "Thermal boundary condition for the thermal lattice Boltzmann equation". *Physical Review E*, 72(1), 016703.
- Yu, H., Girimaji, S.S. and Luo, L.S., 2005. "DNS and LES of decaying isotropic turbulence with and without frame rotation using lattice boltzmann method". *Journal of Computational Physics*, Vol. 209, No. 2, pp. 599-616.

7. RESPONSIBILITY NOTICE

The author(s) is (are) the only responsible for the printed material included in this paper.