

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA**

**Simulação de fluxos em dutos bidimensionais por redes de Boltzmann e  
aplicações na obstrução de sistemas vasculares**

Alan Augusto da Silva Reis  
*Magister Scientiae*

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2025**

**ALAN AUGUSTO DA SILVA REIS**

**Simulação de fluxos em dutos bidimensionais por redes de Boltzmann e aplicações na obstrução de sistemas vasculares**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Alvaro V. N. de Carvalho  
Teixeira

Coorientador: Wesley Francis Costa Cota

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2025**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade  
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

R375s  
2025  
Reis, Alan Augusto da Silva, 1993-  
Simulação de fluxos em dutos bidimensionais por redes de Boltzmann e aplicações na obstrução de sistemas vasculares / Alan Augusto da Silva Reis. – Viçosa, MG, 2025.  
1 dissertação eletrônica (99 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndices.

Orientador: Alvaro Vianna Novaes de Carvalho Teixeira.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Física, 2025.

Referências bibliográficas: f. 88-90.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2025.098>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Hidrodinâmica. 2. Teoria do transporte. 3. Trombose. 4. Isquemia. I. Teixeira, Alvaro Vianna Novaes de Carvalho, 1973-. II. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 22. ed. 532.5

**ALAN AUGUSTO DA SILVA REIS**

**Simulação de fluxos em dutos bidimensionais por redes de Boltzmann e aplicações na obstrução de sistemas vasculares**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 17 de fevereiro de 2025.

Assentimento:

---

Alan Augusto da Silva Reis  
Autor

---

Alvaro Vianna Novaes de Carvalho Teixeira  
Orientador

Essa dissertação foi assinada digitalmente pelo autor em 12/03/2025 às 14:53:33 e pelo orientador em 12/03/2025 às 14:56:43. As assinaturas têm validade legal, conforme o disposto na Medida Provisória 2.200-2/2001 e na Resolução nº 37/2012 do CONARQ. Para conferir a autenticidade, acesse <https://siadoc.ufv.br/validar-documento>. No campo 'Código de registro', informe o código **R4AW.SW7J.EK19** e clique no botão 'Validar documento'.

Dedico a todos que me ajudaram nessa jornada.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço minha mãe Terezinha pela ajuda em todos os anos de graduação e pós.

Agradeço meu orientador, Alvaro Vianna pela sua paciência e por me ajudar sempre quando precisei. Também pelos momentos de descontração, por acreditar no meu potencial e pelas oportunidades que me deu desde a iniciação científica.

Aos membros da banca que aceitaram contribuir para o meu trabalho: Leandro Gutierrez Rizzi, Rodrigo Siqueira Batista, Álvaro Messias Bigonha Tibiriçá, Eduardo Basílio e Oswaldo Monteiro Del Cima.

Agradeço a minha namorada Jaíne e aos meus amigos que sempre tornaram os meus dias mais leves. Também aos meus amigos nerds que jogam D & D.

Aos colegas da tutoria da Universidade Federal de Viçosa, especialmente a Daniela Gonçalves Rodrigues e Timóteo.

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

Agradeço ao departamento de Física da UFV e as agências de fomento. Ao CNPq, FAPEMIG e FUNARBE.

Agradeço todo mundo do laboratório LMFFC da UFV, sendo eles: Denis, Renan, Kairon, Juliano, Saulo, Liliane e Maria Eduarda.

## RESUMO

REIS, Alan Augusto da Silva, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2025. **Simulação de fluxos em dutos bidimensionais por redes de Boltzmann e aplicações na obstrução de sistemas vasculares.** Orientador: Alvaro Vianna Novaes de Carvalho Teixeira. Coorientador: Wesley Francis Costa Cota.

Solucionar analiticamente as equações que regem a dinâmica de fluidos é uma tarefa árdua, e pouquíssimos casos puderam ser solucionados até hoje. Com isso, as simulações computacionais se tornam cada vez mais atrativas e um dos métodos que vem ganhando cada vez mais espaço é o método de rede de Boltzmann. O método baseia-se na teoria cinética dos gases e na equação de Boltzmann para descrever estatisticamente o comportamento de partículas em um fluido, podendo ser aplicado em diversos problemas da áreas de saúde, como por exemplo, as diferentes situações nas quais ocorrem obstruções dos vasos sanguíneos. Estudar o processo de formação de um coágulo e como o mesmo altera o fluxo sanguíneo é de suma importância, porém estudos in vivo exigem técnicas extremamente difíceis de se realizar e muitas das vezes invasivas. Com isso, as abordagens computacionais, como o método de rede de Boltzmann, se tornam opções muito atrativas. O processo de coagulação é essencial para a sobrevivência humana. Quando o endotélio de um vaso sanguíneo é lesionado, um coágulo surge na tentativa de selar a lesão. Tal coágulo pode se tornar patológico e obstruir totalmente algum vaso sanguíneo provocando graves complicações ao paciente. Neste trabalho, o método de rede foi aplicado para simular o escoamento de um fluxo entre duas placas paralelas para o caso em que um círculo é colocado no centro do sistema e meio círculo é colocado na parte inferior. Também foi proposto um modelo de crescimento de um coágulo baseado em uma taxa de cisalhamento crítica e no arrasto das partículas da superfície do coágulo. Para as simulações com um círculo no centro, o efeito da obstrução na vazão foi observado e uma mudança de regime foi encontrada, ou seja, o regime muda do linear para o totalmente obstruído. Diversos números de Reynolds foram avaliados de modo que à medida que o mesmo aumenta, uma quebra do regime linear acontece e que pôde ser constatada pela análise da área dos vórtices formados. Para o meio círculo na parte inferior do sistema, o ponto da quebra do regime linear pôde ser evidenciado pelo máximo de vorticidade total. Por fim, um modelo foi proposto baseado no arrasto de partículas quando uma taxa de cisalhamento crítica é alcançada. Os três regimes de crescimento, conhecidos na literatura e aparentemente comuns em todos coágulos formados, foram alcançados. A geometria do coágulo foi comparada com

os dados in vivo e se mostrou bem satisfatória. No modelo, também foi proposto o controle da vazão por meio de uma diferença de pressão de corte e a importância de tal mecanismo para o desenvolvimento de um coágulo patológico ou não foi evidenciada.

Palavras-chave: hidrodinâmica; CFD; trombose; isquemia

## ABSTRACT

REIS, Alan Augusto da Silva, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2025. **Simulation of flows in two-dimensional ducts by Boltzmann lattice and applications in obstruction of vascular systems**. Adviser: Alvaro Vianna Novaes de Carvalho Teixeira. Co-adviser: Wesley Francis Costa Cota.

Solving analytically the equations governing fluid dynamics is an arduous task, and very few cases have been solved to this day. Consequently, computational simulations have become increasingly attractive, and one method that has been gaining more space is the lattice Boltzmann method. This method is based on the kinetic theory of gases and the Boltzmann equation to statistically describe the behavior of particles in a fluid, and it can be applied to various problems in health sciences, such as the different situations in which blood vessel obstructions occur. Studying the clot formation process and how it alters blood flow is of paramount importance, but in vivo studies require extremely difficult and often invasive techniques. Therefore, computational approaches, such as the lattice Boltzmann method, become very attractive options. The coagulation process is essential for human survival. When the endothelium of a blood vessel is injured, a clot forms in an attempt to seal the lesion. However, this clot can become pathological and completely obstruct a blood vessel, causing severe complications to the patient. In this work, the lattice Boltzmann method was applied to simulate the flow between two parallel plates in the case where a circle is placed at the center of the system and a semicircle is placed at the bottom. A clot growth model based on a critical shear rate and the drag of particles from the clot surface was also proposed. For the simulations with a circle at the center, the obstruction effect on the flow rate was observed, and a regime shift was found — that is, the regime changes from linear to fully obstructed. Several Reynolds numbers were evaluated, showing that as the Reynolds number increases, a breakdown of the linear regime occurs, which could be verified through the analysis of the vortex area. For the semicircle at the bottom of the system, the point of the linear regime breakdown was evidenced by the maximum of the total vorticity. Finally, a model based on particle drag when a critical shear rate is reached was proposed. The three growth regimes, known in the literature and seemingly common to all clots, were achieved. The clot geometry was compared with in vivo data and showed good agreement. The model also proposed flow control through a critical pressure difference, highlighting the importance of this mechanism in the development of pathological or non-pathological clots.

Keywords: hydrodynamics; CFD; thrombosis; ischemia

## Lista de Figuras

- 2.1 Escoamento de um fluido incompressível, Newtoniano e estacionário entre duas placas paralelas de espessura desprezível, distância fixa  $M$  e largura  $N$ . Como é mostrado na figura, as condições de não deslizamento devem ser satisfeitas nas duas placas, ou seja, a velocidade do fluido deve ser zero ali. As setas grandes com coloração verde indicam o sentido do fluxo. O fluido entra pela esquerda do sistema  $x = 0$  e sai na direita em  $x = N$ . . . . . 24
- 4.1 Possível conjunto de vetores velocidade para o caso bidimensional e com nove velocidades possíveis (D2Q9). O vetor  $c_0$  no centro indica o caso em que a partícula esteja parada. . . . . 34
- 4.2 Ilustração do processo de propagação escolhendo como exemplo uma rede bidimensional (D2Q9). Aqui foi tomado somente um pedaço da rede, sendo considerado unicamente a propagação das funções de distribuição do sítio central com o intuito puramente didático. . . . . 35
- 4.3 Ilustração da condição de contorno com velocidade conhecida para o caso bidimensional D2Q9. As funções de distribuição com vetores de coloração preta representam as distribuições conhecidas e com cor verde as desconhecidas. O objeto em azul denotado por "sólido" representa um local da rede onde a condição de contorno está sendo aplicada. Nota-se que  $f_2$  e  $f_4$  estão apontando em direções opostas na borda do sólido. . . . . 38
- 5.1 Ilustração da geometria do sistema simulado, onde  $N$  é a largura,  $M$  a altura ou distância entre as duas placas e  $R$  é o raio do círculo. O círculo, que simboliza a obstrução do canal, está nas coordenadas  $(N/2, M/2)$ . As setas com coloração verde indicam o sentido do fluxo de modo que o fluido entra pela esquerda do canal e sai pela direita. . . . . 49
- 5.2 Ilustração da geometria do sistema, tal que o círculo se encontra na posição  $(N/2, 0)$ . As setas verdes no início do canal indicam o sentido do fluxo. . . . . 52
- 5.3 Perfis de escoamento para o caso em que  $\nu = 0,136$  para cinco raios diferentes diferentes (0, 5, 10, 15 e 20). Como pode ser notado, nos três casos a condição de não deslizamento é satisfeita em cima das placas e no objeto sólido. A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de  $|u|$ . . . . . 54

5.4	Gráfico da vazão $q$ pelo espaço livre $L$ de modo que cada curva representa uma viscosidade diferente. (a) Sem normalização. (b) Curvas normalizadas pela viscosidade, ou seja, multiplica-se as cada curva pelo $\nu$ correspondente. Como pode ser visto as curvas apresentam o mesmo comportamento para todas as diferentes viscosidades. . . . .	55
5.5	Gráficos da vazão $q$ pelo espaço livre $L$ de modo que cada curva representa uma diferença de pressão distinta. (a) Sem normalização. (b) Curvas normalizadas pela diferença de pressão (dividindo-se pelo $ \Delta p $ específico de cada curva). . .	55
5.6	Gráfico da vazão $q$ pelo espaço livre $L$ que o fluido tem para escoar de forma que uma viscosidade cinemática foi escolhida ( $\nu = 0,136$ ) devido ao fato do comportamento das curvas se coincidirem para os casos simulados quando varia-se a diferença de pressão ou a viscosidade cinemática para baixos números de Reynolds. Os pontos simbolizados por bolas abertas são os dados encontrados nas simulações para cada raio distinto. A curva pontilhada em vermelho, indica a vazão teórica, ou seja, a vazão prevista teoricamente para o canal vazio e a marrom indica o ponto de mudança de comportamento encontrado. A curva em azul é a curva ajustada (Equação (5.2)) que contribuiu para encontrar o ponto de mudança de comportamento. . . . .	56
5.7	Perfil de escoamento para as viscosidades apresentadas na Tabela 5.2.5 em ordem decrescente e para o mesmo raio $R = 10$ . A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de $ u $ . A caixa no lado direito da imagem é uma ampliação dos arredores do objeto juntamente com as linhas de fluxo. As linhas fluxo representam as possíveis trajetórias que uma tal partícula submersa no fluido poderá ter. . . . .	57
5.8	(a) Gráfico da vazão $q$ pelo espaço livre $L$ que o fluido tem para escoar de todas as viscosidades cinemáticas simuladas. A paleta de cores se refere ao mapa calor do número de Reynolds das simulações. (b) Vazão pela porcentagem de espaço livre normalizado pela viscosidade. . . . .	58
5.9	Gráficos da vazão $q$ pelo espaço livre $L$ que o fluido tem para escoar. A curva em azul em todos os gráficos são as curvas ajustadas (Equação (5.2)), o ponto tracejado em marrom é o ponto crítico encontrado para cada uma das curvas e o ponto tracejado vermelho a vazão teórica para o canal vazio calculada pela Equação 2.28. (a) $\nu = 0,136$ . (b) $\nu = 0,0313$ . (c) $\nu = 0,00626$ . (d) $\nu = 0,00407$ . (e) $\nu = 0,00313$ . . . . .	59
5.10	Diferença da área dos vórtices pela área do círculo para todos os raios distintos. Cada curva indica uma viscosidade diferente. Nota-se que para o caso em que $\nu = 0,00313$ existem pontos acima da reta $y = 0$ , indicando assim a presença de um terceiro regime linear. . . . .	60

5.11	Perfil de escoamento para as viscosidades apresentadas na Tabela 5.2.7 em ordem decrescente e para o mesmo raio $R = 10$ . A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de $ \mathbf{u} $ . A caixa no lado direito da imagem é uma ampliação dos arredores do objeto juntamente com as linhas de fluxo. . . .	61
5.12	Diferença de pressão $ \Delta p $ pela porcentagem de espaço livre que o fluido tem para escoar $L$ . (a) Curvas para as diferentes viscosidades cinemáticas. (b) Curvas em escala logarítmica em ambos os eixos. . . . .	62
5.13	Perfil de escoamento para as viscosidades apresentadas na Tabela 5.2.5 em ordem decrescente e para o raio $R = 30$ . A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de $ \mathbf{u} $ . A caixa nomeada como zoom e linhas de campo, representa uma ampliação dos arredores do círculo possibilitando uma melhor visão dos vórtices formados. . . . .	63
5.14	Vazão $q$ pela porcentagem de espaço livre $L$ . (a) Sem normalizar e com mapa de calor do número de Reynolds. (b) Normalizado pela viscosidade cinemática.	64
5.15	(a) Diferença da área do vórtice pela área do círculo de modo que cada curva simboliza uma viscosidade diferente. (b) Módulo da vorticidade total do sistema. Nota-se que os máximos se encontram em $L$ próximo de 62. . . . .	64
5.16	Gráficos da vazão $q$ pelo espaço livre $L$ que o fluido tem para escoar. A curva em azul e verde são as curvas ajustadas (Equação (5.2) e (5.3)). As retas diagonais tracejadas são os pontos críticos encontrados usando-se os ajustes e a reta horizontal tracejada em coloração vermelha indica a vazão teórica calculada utilizando-se a solução da equação de Navier-Stokes para o caso do canal vazio. (a) $\nu = 0,136$ . (b) $\nu = 0,0313$ . (c) $\nu = 0,00626$ . (d) $\nu = 0,00407$ . (e) $\nu = 0,00313$ . . . . .	65
5.17	Perfil de escoamento para as viscosidades apresentadas na Tabela 5.2.5 em ordem decrescente e para o raio $R = 30$ . A caixa nomeada como zoom e linhas de campo, representa uma ampliação dos arredores do círculo possibilitando uma melhor visão dos vórtices formados. A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de $ \mathbf{u} $ . . . . .	66
5.18	Diferença de pressão $ \Delta p $ pela porcentagem de espaço livre que o fluido tem para escoar $L$ . (a) Cada curva indica uma viscosidade cinemática distinta. (b) Curvas em escala logarítmica nos dois eixos. . . . .	67
6.1	Esquema ilustrativo da via extrínseca extraído da referência [15]. . . . .	69
6.2	Esquema ilustrativo da via intrínseca extraído da referência [15]. . . . .	70
6.3	Fatores de coagulação e seus sinônimos de modo que os mesmos são representados por questões históricas usando-se números romanos. Tal tabela foi extraída da referência [15]. . . . .	71

6.4	(a) Ilustração da estrutura geométrica do coágulo. Em azul encontra-se o local denominado núcleo e em amarelo a casca. (b) Imagem in vivo extraída da referência [11] mostrando os diferentes graus de ativação das plaquetas. Em azul o núcleo do coágulo foi marcado com P-selectina e em vermelho a casca com o marcador anti-CD41. A barra de escala representa 10 $\mu$ m. . . . .	72
6.5	Imagem extraída da referência [11], onde em vermelho mostra-se as plaquetas (marcador de plaquetas Anti-CD41), em azul o núcleo (marcador de plaquetas ativadas anti-P-selectina) e em verde a lesão (Albumina Fluorescente). A primeira imagem da esquerda é referente ao primeiro estágio de formação. A do meio ao dobramento e o terceiro ao de estabilização. . . . .	72
6.6	Perfil para a função $\dot{\gamma}_{corte}$ escolhido. Tal perfil contabiliza o fato das partículas mais próximas ao centro (núcleo) do coágulo estarem mais fortemente ligadas. .	75
6.7	Ilustração da geometria do sistema, tal que a elipse se encontra na posição $(N/2, 0)$ . No início do canal pode ser visualizado algumas setas em coloração verde. Elas indicam o sentido do fluxo. As condições de não deslizamento são satisfeitas em cima das duas placas, ou seja, a velocidade do fluido é zero nas mesmas e nos pontos sólidos. . . . .	76
6.8	Ilustração do processo de arrasto das partículas sólidas no contorno do objeto sólido que obstrui o canal. Os quadrados em preto, indicam os pontos identificados como sólidos, ou seja, satisfazendo as condições de não deslizamento ( $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ ). Os pontos em azul, indicam os locais identificados como um fluido. Se $\dot{\gamma}$ for maior que $\dot{\gamma}_{corte}$ (Equações (6.1)) a partícula será arrastada para o próximo vizinho na interface fluido-sólido. O ponto na coordenada $(x, y)$ que anteriormente era identificado como sólido passa a ser considerado agora como fluido. . . . .	76
6.9	Perfil de escoamento de modo que a coloração indica a magnitude do campo de velocidades. Cada perfil é referente aos seguintes tempos de simulação: 0, 500, 1000, 1500, 2000 e 2500 respectivamente. Como pode ser visto, inicialmente a obstrução cresce verticalmente, logo depois é arrastada até ter a forma de uma calda de cometa. As condições de não deslizamento na obstrução são satisfeitas, como pode ser visto através da coloração azulada. A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de $ \mathbf{u} $ . . . . .	78

- 6.10 (a) Gráfico da área normalizada pela área onde o pico acontece e do AR ambos pelo tempo de simulação normalizado pelo tempo onde acontece o pico de área para o caso onde a vazão não é ajustada. As curvas contínuas são os resultados das simulações e os pontos são os dados experimentais extraídos de [11]. As retas verticais tracejadas separam os três regimes. (b) O mesmo tipo de gráfico anterior, porém a vazão é ajustada. Nota-se que o terceiro regime de crescimento é encontrado quando tal condição é considerada. (c) Gráfico da diferença de pressão pelo tempo de simulação. As curvas tracejadas denotam os locais onde a diferença de pressão de corte é alcançada e a velocidade começa a ser incrementada. (d) Gráfico da velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) pelo tempo de simulação. As curvas tracejadas denotam os locais onde a diferença de pressão de corte é alcançada e a velocidade começa a ser incrementada. . . . . 79
- 6.11 (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $\dot{\gamma}_0$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $\dot{\gamma}_0$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $\dot{\gamma}_0$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $\dot{\gamma}_0$ . . . . . 80
- 6.12 (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $\Delta u_0$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $\Delta u_0$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $\Delta u_0$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $\Delta u_0$ . . . . . 81
- 6.13 (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $\Delta t_{depositar}$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $\Delta t_{depositar}$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $\Delta t_{depositar}$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $\Delta t_{depositar}$ . . . . . 82

- 6.14 (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $|\Delta p|_{corte}$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $|\Delta p|_{corte}$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $|\Delta p|_{corte}$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $|\Delta p|_{corte}$ . . . . . 83
- 6.15 (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $x_f$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $x_f$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $x_f$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $x_f$ . . . . . 84

# Sumário

1	Introdução . . . . .	18
2	Hidrodinâmica . . . . .	20
2.1	Equação da Continuidade e de Navier-Stokes . . . . .	20
2.2	Tensor de Estresse Cisalhante e Tensor Taxa de Cisalhamento . . . . .	21
2.3	Equações de Estado . . . . .	22
2.4	Números Adimensionais: Número de Reynolds, Mach e Knudsen . . . . .	23
2.5	Caso Especial: Escoamento Entre duas Placas Paralelas . . . . .	24
3	Teoria Cinética . . . . .	27
3.1	A Função de Distribuição, a Equação de Boltzmann e o Operador de Colisão . . . . .	27
3.2	A Função de Distribuição do Equilíbrio . . . . .	28
3.3	Momentos da Função de Distribuição . . . . .	28
3.4	Recuperando a Equação de Conservação da Massa . . . . .	29
3.5	Recuperando a Equação de Conservação do Momento . . . . .	29
4	Método de Rede de Boltzmann . . . . .	31
4.1	Método Tradicional . . . . .	31
4.1.1	Do Contínuo para o Discreto . . . . .	31
4.1.2	Velocidades Discretizadas . . . . .	32
4.1.3	Expansão Chapman-Enskog . . . . .	35
4.1.4	Colisão e Propagação . . . . .	35
4.1.5	Condições de Contorno (Bounce-Back Modificado) . . . . .	36
4.1.6	Condições de Contorno com Velocidade Conhecida . . . . .	37
4.1.7	Algoritmo Básico . . . . .	39
4.2	Momentos Centrais . . . . .	40
4.2.1	Reescrevendo a Equação de Boltzmann com o Novo Formalismo . . . . .	40
4.2.2	Introduzindo os Momentos Centrais . . . . .	41
4.2.3	Passos para o Algoritmo de Colisão . . . . .	43
5	Parte I - Análise Hidrodinâmica de Sistemas Bidimensionais Obstruídos . . . . .	47
5.1	Objetivos . . . . .	47
5.2	Metodologia . . . . .	47
5.2.1	Círculo no Centro, $ \Delta p $ Constante e Baixos Números de Reynolds . . . . .	48

5.2.2	Círculo no Centro, $ \Delta p $ Constante e Números de Reynolds Variados . . . . .	50
5.2.3	Círculo no Centro, Vazão Constante e Números de Reynolds Variados . . . . .	51
5.2.4	Semicírculo na Parte Inferior, $ \Delta p $ Constante e Números de Reynolds Variados . . . . .	52
5.2.5	Semicírculo na Parte Inferior, Vazão Constante e Números de Reynolds Variados . . . . .	52
5.3	Resultados e discussões . . . . .	53
5.3.1	Círculo no Centro, $ \Delta p $ Constante e Baixos Números de Reynolds . . . . .	53
5.3.2	Círculo no Centro, $ \Delta p $ Constante e Números de Reynolds Variados . . . . .	56
5.3.3	Círculo no Centro, Vazão Constante e Números de Reynolds Variados . . . . .	60
5.3.4	Semicírculo na Parte Inferior, $ \Delta p $ Constante e Números de Reynolds Variados . . . . .	62
5.3.5	Semicírculo na Parte Inferior, Vazão Constante e Números de Reynolds Variados . . . . .	66
5.4	Conclusões da Parte I . . . . .	67
6	Parte II - Modelo de Formação de Coágulos . . . . .	68
6.1	Objetivos . . . . .	68
6.2	Biologia do Crescimento de Coágulos . . . . .	68
6.2.1	Coagulação Sanguínea . . . . .	68
6.2.2	Geometria do Coágulo . . . . .	69
6.2.3	Estágios de Formação . . . . .	71
6.2.4	A Circulação . . . . .	73
6.2.5	Distensibilidade Vascular . . . . .	73
6.3	Metodologia . . . . .	74
6.3.1	Parâmetros e Condições de Contorno . . . . .	74
6.3.2	O Modelo Proposto . . . . .	74
6.4	Resultados e Discussões . . . . .	77
6.4.1	Parâmetros Fixos . . . . .	77
6.4.2	Variando os Parâmetros . . . . .	80
6.5	Conclusões da Parte II . . . . .	85
7	Conclusões Gerais e Perspectivas . . . . .	86
	Referências . . . . .	88
A	Apêndice - Deduções . . . . .	91
A.1	Expansão Chapman-Enskog - Método Tradicional . . . . .	91
B	Apêndice - Códigos . . . . .	95

B.1	Obtenção dos Termos para os Momentos Centrais . . . . .	95
B.2	Obtenção das Matrizes para os Momentos Centrais . . . . .	97

# 1 Introdução

A equação de Navier-Stokes (NSE) é extremamente difícil de resolver analiticamente, sendo que em pouquíssimos casos, uma solução pôde ser encontrada [1]. A NSE descreve o comportamento de fluidos, sendo estes líquidos ou gases e a mesma nada mais é que a segunda lei de Newton. Os fluidos desempenham um papel importantíssimo em diversas áreas do conhecimento humano, como no escoamento de sangue em vasos sanguíneos, o fluxo de ar no sistema respiratório, aerodinâmica de veículos e sistemas hidráulicos [2]. Com tudo isso em mente, torna-se evidente que os métodos computacionais para simular hidrodinâmica são muito importantes nos estudos onde os fluidos desempenham um papel crucial. Um dos métodos que vem ganhando cada vez mais adeptos, é o método de rede de Boltzmann (LBM) [3, 4, 5].

O LBM é um método estatístico baseado em uma rede, de modo que cada sítio da rede é descrito por uma função de distribuição que dita a probabilidade de encontrar uma partícula com uma determinada velocidade em uma posição e em um dado instante de tempo. O método vem se destacando nos últimos anos pois é de fácil paralelização e prático ao tratar de geometrias complexas. Inúmeras áreas de pesquisa estão cada vez mais contemplando o método, dentre elas se destacam: simulação de fluidos em meios porosos uma fase ou com uma mistura de água e óleo [6, 7], derramamento de óleo em mares [8], espalhamento de doenças através de aerossóis suspensos no ar [9] e microfluídica [10].

Uma outra possível aplicação do LBM é o estudo da geometria de coágulos, os processos de crescimento dos mesmos e como tais entes obstruem e interferem no fluxo sanguíneo [11]. O fluxo de sangue inadequado para um determinado tecido, também conhecido como isquemia, gera condições de grande importância médica e as mesmas estão listadas entre as maiores causas de morte no mundo [11]. Quando existe uma lesão no endotélio de um vaso sanguíneo, coágulos são formados na tentativa de interromper o sangramento. Quando se torna patológico, o coágulo passa a ser nomeado como trombo e quando parte da massa do mesmo se solta e viaja para um outro local pela corrente sanguínea, é chamada de êmbolo.

O processo de coagulação é extremamente complicado [12, 13, 14], envolvendo a interação de inúmeros fatores de coagulação e uma série de processos físicos e químicos, porém tal processo é crucial para a sobrevivência humana e entendê-lo melhor e suas possíveis falhas é muito importante. O modelo clássico de coagulação consiste em duas vias: a intrínseca e extrínseca, que convergem para uma via comum. Já o modelo de coagulação é baseado em superfícies celulares e o mesmo propõe a ativação do processo de coagulação em algumas fases: iniciação, amplificação e propagação. Com isso foi possível entender como a coagulação funciona in vivo e elucidar alguns distúrbios como as hemorragias e trombozes que o modelo clássico não era capaz [14].

Mesmo sendo de suma importância para a saúde humana, o processo de formação de um coágulo pode se tornar patológico e o mesmo pode se desprender, por exemplo, e obstruir diversas outras partes do corpo [15], assim como defeitos nos mecanismos de coagulação podem resultar em diversos problemas para a saúde humana. Dependendo de onde o bloqueio do fluxo sanguíneo ocorre, ele é nomeado de uma forma. Quando a obstrução acontece no cérebro, é

chamado de acidente vascular cerebral (AVC). Quando ocorre no coração, pode ocorrer infarto agudo do miocárdio.

Na medicina em geral, estudar alguns sistemas *in vivo* pode ser complicado, pois podem ser processos invasivos e extremamente difíceis de se reproduzir em laboratório. No estudo do crescimento de coágulos, lesões no endotélio de ratos produzidas por laser são muito utilizadas para formar artificialmente um coágulo na região lesionada [11, 16]. Grande parte dos estudos são feitos na arteríola cremaster do rato, pelas facilidades que o músculo oferece e pela sua reprodutibilidade, sendo o mesmo translúcido, possibilitando a visualização direta do fluxo, da interação da parede dos vasos e a da formação do coágulo [17]. Muitos experimentos *in vitro* também são realizados, porém as escalas de tempo se alteram demasiadamente em relação aos casos *in vivo*. Os estudos *in vivo* são extremamente complicados de se realizar, pois acontecem em escalas de tempo pequenas. A escala de ativação das plaquetas, por exemplo, *in vitro* acontece na ordem de minutos, já *in vivo* o processo é muitas ordens de grandeza menor [11].

Tendo tudo isso em mente, este trabalho propõe-se a investigar alguns sistemas computacionalmente na tentativa de analisar como as obstruções podem alterar o fluxo em um sistema bidimensional com um círculo no centro e meio círculo na parte inferior. Tais sistemas tem o intuito de simular como as obstruções em um vaso sanguíneo alteram os parâmetros hidrodinâmicos, como a vazão e a diferença de pressão. E por fim foi desenvolvido um modelo de crescimento de um coágulo baseado em uma taxa de cisalhamento crítica e do arraste de partículas da superfície do mesmo.

Esta dissertação foi organizada da seguinte forma: primeiramente é feita uma revisão sobre hidrodinâmica, teoria cinética e uma apresentação do método de rede de Boltzmann. Logo em seguida as análises dos sistemas estudados foram feitas e divididas em duas partes. A primeira parte trata do estudo do fluxo de um fluido newtoniano em ductos bidimensionais, e como sua vazão é alterada pela presença da obstrução circular localizada no centro do ducto, e também na lateral do mesmo. Nesse ponto foi objetivado responder questões como: qual o nível de obstrução é necessária para se considerar o fluxo como interrompido, e qual o papel de parâmetros como a diferença de pressão e viscosidade na vazão. Já na segunda parte será dedicada ao desenvolvimento de um modelo misto de formação de coágulos baseado na taxa de cisalhamento para arrastar partículas e no controle da vazão através de uma pressão de corte. O intuito dessa parte será comparar os dados da geometria do coágulo obtidos computacionalmente pelo modelo com os dados *in vivo* e verificar se os três regimes de crescimento são satisfeitos.

## 2 Hidrodinâmica

Neste capítulo será feita uma recapitulação aos conceitos hidrodinâmicos que serão utilizados em todos os demais capítulos. Em toda a dissertação será adotada a convenção de soma de Einstein para índices com letras gregas repetidas, e também da representação reduzida de derivadas parciais de forma que, por exemplo:  $\partial_\beta(\rho u_\beta) = \sum_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta}(\rho u_\beta)$ . Índices com letras latinas indicarão componentes que não estão sendo somadas pela convenção de soma, mesmo se aparecerem mais de uma vez na mesma expressão.

### 2.1 Equação da Continuidade e de Navier-Stokes

A hidrodinâmica é o estudo do movimento de fluidos e forças aplicadas em corpos imersos neles quando há velocidade relativa entre ambos, com os fluidos podendo ser líquidos ou gases. A hidrodinâmica é um fenômeno macroscópico e, ao se referir a elementos de fluidos, estes são pequenos em comparação com o tamanho do sistema, mas contém um número suficientemente grande de moléculas. A base hidrodinâmica é fundamentada em leis físicas, como a conservação da massa, que resulta na equação da continuidade, a conservação do momento, que resulta na famosa equação de Navier-Stokes (NSE) e a conservação da energia, que não será abordada aqui. A equação de NSE é a equação da segunda lei de Newton escrita para fluidos, descrevendo como a velocidade do fluido evolui em resposta às forças internas e externas aplicadas a ele.

A equação da continuidade é dada por [2]:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.1)$$

onde  $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$  é a densidade de massa,  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  é a velocidade do fluido e  $\rho \mathbf{u} = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  é a densidade de momento em um elemento de volume cuja posição é dada por  $\mathbf{x}$  no tempo  $t$ . A NSE é:

$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ \eta(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top) + \left( \eta_B - \frac{2\eta}{3} \right) (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] + \mathbf{F}, \quad (2.2)$$

de modo que  $\eta$  e  $\eta_B$  representam, respectivamente, as viscosidades cisalhante (que também é conhecida como viscosidade dinâmica) e volumétrica,  $p = p(\mathbf{x}, t)$  é a pressão,  $\mathbf{I}$  é o tensor identidade,  $\mathbf{u} \mathbf{u}$  é o produto tensorial cujas componentes são dadas por  $u_\alpha u_\beta$  e  $\mathbf{F}$  é o termo relacionado com as densidades de forças externas. No lado esquerdo da Equação (2.2), estão os termos relacionados à densidade de massa multiplicada pela aceleração local e convectiva. Já no lado direito, estão os termos correspondentes à densidade de força. Para o caso em que o fluido é incompressível, a Equação (2.1) se simplifica para

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.3)$$

pois  $\rho$  será uma constante. Com isso, a Equação (2.2) se modifica para

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \eta \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top) + \mathbf{F} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}, \quad (2.4)$$

uma vez que a viscosidade dinâmica foi considerada constante, podendo sair da derivada, que é válido somente para um fluido Newtoniano. Para o caso fracamente compressível, as equações da continuidade e de Navier-Stokes são, respectivamente:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.5a)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nu \nabla \cdot [\rho (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top)] + \mathbf{F}, \quad (2.5b)$$

onde destaca-se a relação entre viscosidade dinâmica e cinemática, dada por  $\eta = \rho \nu$ .

A NSE é uma representação de fluidos reais, onde se inclui um termo de viscosidade que causa transferência de momento entre elementos de fluidos de forma dissipativa ou irreversível. No caso em que a transferência de momento é reversível que se dá através das forças de pressão (que são conservativas) e do fluxo de massa, o fluido é dito ideal e é descrito pela equação de Euler

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mathbf{F}, \quad (2.6)$$

de modo que a mesma pode ser obtida fazendo-se  $\eta$  igual a zero na Equação (2.4).

## 2.2 Tensor de Estresse Cisalhante e Tensor Taxa de Cisalhamento

As componentes do tensor de estresse cisalhante  $\sigma'$  são definidas da seguinte forma:

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \eta (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) + \left( \eta_B - \frac{2\eta}{3} \right) \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta}, \quad (2.7)$$

de modo que,  $\delta_{\alpha\beta}$  é o delta de Kronecker. As componentes do tensor de estresse total  $\sigma$  e de  $\sigma'$  podem ser relacionadas por

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma'_{\alpha\beta} - p \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.8)$$

Consegue-se definir também o tensor densidade do fluxo de momento total, e suas componentes são:

$$M_{\alpha\beta} = \rho u_\alpha u_\beta + p \delta_{\alpha\beta} - \sigma'_{\alpha\beta} = \rho u_\alpha u_\beta - \sigma_{\alpha\beta}, \quad (2.9)$$

onde  $\delta_{\alpha\beta}$  é o delta de Kronecker. Então a Equação (2.2) com o tensor  $M$  e escrita na forma de componentes será

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta M_{\alpha\beta} = F_\alpha, \quad (2.10)$$

evidenciando que a NSE pode ser reescrita na forma de uma equação de conservação.

Para um fluido Newtoniano, incompressível ou fracamente compressível, o tensor taxa de cisalhamento  $\mathbf{S}$  é relacionado com o estresse cisalhante  $\boldsymbol{\sigma}'$ , tal que a constante de proporcionalidade é a viscosidade dinâmica  $\eta$ . As componentes do tensor  $\mathbf{S}$  são definidas como:

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha), \quad (2.11)$$

onde  $\sigma'_{\alpha\beta} = 2\eta S_{\alpha\beta} = 2\nu\rho S_{\alpha\beta}$ . Pode-se definir também a partir da contração do tensor  $\mathbf{S}$  o valor escalar

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2\mathbf{S} : \mathbf{S}} = \sqrt{2S_{\alpha\beta}S_{\alpha\beta}}, \quad (2.12)$$

tal que, para o caso bidimensional, o tensor  $\mathbf{S}$  poderá ser escrito como

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix}, \quad (2.13)$$

pois  $\mathbf{S}$  é um tensor simétrico, ou seja,  $S_{\alpha\beta} = S_{\beta\alpha}$ . Então o escalar  $\dot{\gamma}$  para este caso será:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2(S_{xx}^2 + 2S_{xy}^2 + S_{yy}^2)}, \quad (2.14)$$

consequentemente, para  $S_{xx} = 0$  e  $S_{yy} = 0$ ,  $\dot{\gamma} = 2|S_{xy}|$ .

### 2.3 Equações de Estado

Analisando as quatro equações acopladas descritas por (2.1) e (2.4), nota-se que o sistema a ser solucionado não é fechado, pois existem cinco variáveis desconhecidas e somente quatro equações. Desta forma, é necessário a introdução de uma nova equação [3]. Partindo-se do fenômeno de ondas sonoras, de que as mesmas são fracas o suficiente tal que as equações podem ser linearizadas, tem-se que:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0 + \rho'(\mathbf{x}, t), \quad (2.15a)$$

$$p(\mathbf{x}, t) = p_0 + p'(\mathbf{x}, t), \quad (2.15b)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}'(\mathbf{x}, t), \quad (2.15c)$$

onde  $\rho'$ ,  $p'$  e  $\mathbf{u}'$  são, respectivamente, pequenas flutuações da densidade, pressão e velocidade do fluido. Os termos com sub-índice zero denotam um estado constante estacionário. Usando a Equação (2.1) em forma de componentes para as novas variáveis linearizadas, tem-se:

$$\partial_t \rho + \partial_\beta(\rho u_\beta) = \partial_t(\rho_0 + \rho') + \partial_\beta(\rho_0 u'_\beta + \rho' u'_\beta) = \partial_t \rho' + \rho_0 \partial_\beta u'_\beta = 0, \quad (2.16)$$

de modo que os termos de segunda ordem foram desconsiderados. Tomando agora a derivada em relação ao tempo em (2.16), resulta-se em

$$\partial_t \partial_t \rho' = -\rho_0 \partial_t \partial_\beta u'_\beta. \quad (2.17)$$

Fazendo algo análogo na Equação (2.6), considerando a ausência de forças externas, verifica-se que:

$$-\rho_0 \partial_t \partial_\beta u'_\beta = \partial_\beta \partial_\beta p'. \quad (2.18)$$

Juntando as Equações (2.17) e (2.18), alcança-se o seguinte resultado:

$$\partial_t \partial_t \rho' = \partial_\beta \partial_\beta p'. \quad (2.19)$$

A relação encontrada em (2.19) é a equação de onda quando  $p' = c_s^2 \rho'$ , onde  $c_s$  é a velocidade do som no meio. Com isso

$$p = c_s^2 \rho_0 + c_s^2 \rho' = c_s^2 \rho, \quad (2.20)$$

é a equação de estado isotérmica no regime linear com a entropia quase constante, sendo que  $c_s^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}$ . Pode-se notar também que na NSE a pressão aparece como um gradiente, mostrando que os termos com sub-índice zero não afetam as soluções, pois  $\nabla p = \nabla(p_0 + p') = \nabla p'$ . Portanto a Equação (2.20) junto com (2.1) e (2.4), formam um sistema fechado, contendo agora cinco variáveis desconhecidas e cinco equações. Embora a equação de estado encontrada seja ideal, para escoamentos fracamente compressíveis a pressão pode ser linearmente relacionada com a densidade [4], tornando-a uma ótima aproximação para estes casos. No caso ideal isotérmico tem-se que a seguinte equação de estado é válida:

$$p = \rho RT, \quad (2.21)$$

onde  $T$  é a temperatura e  $R$  a constante específica dos gases. Usando que  $c_s^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}$  (com a temperatura e a entropia quase constantes) e as Equações (2.20) e (2.21), conclui-se que

$$c_s = \sqrt{RT}. \quad (2.22)$$

## 2.4 Números Adimensionais: Número de Reynolds, Mach e Knudsen

Os números adimensionais são de suma importância para a hidrodinâmica, pois relacionam o grau de contribuição das forças ou fenômenos, auxiliando na análise do sistema e na caracterização de regimes.

A NSE é uma equação para meios contínuos, que é uma aproximação válida para baixos números de Knudsen onde o mesmo é definido como a razão entre o livre caminho médio molecular e um comprimento característico do sistema tratado em questão [3]:

$$\text{Kn} = \frac{l_{fmp}}{L}, \quad (2.23)$$

onde  $l_{fmp}$  é o livre caminho médio molecular e  $L$  é o comprimento característico. Já o número de Reynolds é a razão entre as forças inerciais e viscosas do fluido, ou seja,

$$\text{Re} = \frac{\rho UL}{\eta} = \frac{UL}{\nu}, \quad (2.24)$$

onde  $U$  é uma velocidade característica. Para altos números de Reynolds, o regime de escoamento é turbulento; para baixos números de Reynolds, o regime é laminar; e para valores intermediários, o regime é denominado transiente [1]. Junto com o número de Reynolds é importante destacar a lei da similaridade que diz [2]: "dois sistemas de fluxo incompressíveis são dinamicamente semelhantes se tiverem o mesmo número de Reynolds e geometria".

O número de Mach é definido como:

$$\text{Ma} = \frac{U}{c_s}, \quad (2.25)$$

onde  $c_s$  é a velocidade do som no meio. Para baixos números de Mach, o fluido é considerado praticamente incompressível.

## 2.5 Caso Especial: Escoamento Entre duas Placas Paralelas

Soluções analíticas para a NSE só são encontradas para casos mais simples. Um deles é o escoamento bidimensional de um fluido Newtoniano, incompressível e estacionário entre duas placas paralelas, que está ilustrado na Figura 2.1. Este caso é muito importante para este trabalho pois em todos os sistemas estudados o fluido escoava entre duas placas paralelas.

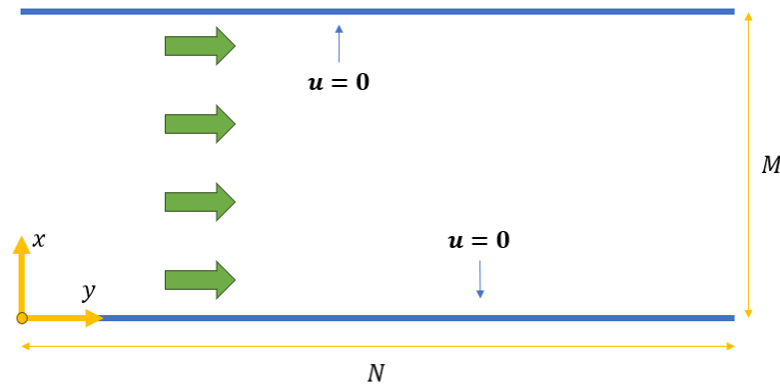


Figura 2.1: Escoamento de um fluido incompressível, Newtoniano e estacionário entre duas placas paralelas de espessura desprezível, distância fixa  $M$  e largura  $N$ . Como é mostrado na figura, as condições de não deslizamento devem ser satisfeitas nas duas placas, ou seja, a velocidade do fluido deve ser zero ali. As setas grandes com coloração verde indicam o sentido do fluxo. O fluido entra pela esquerda do sistema  $x = 0$  e sai na direita em  $x = N$ .

Para este caso, o termo não linear da Equação (2.4), ou seja, o termo  $\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$  é desprezível e o termo  $\rho\partial_t\mathbf{u}$  é nulo [1]. Então a (2.4) em forma de componentes será:

$$-\partial_\alpha p + \eta\partial_\beta\partial_\beta u_\alpha = 0, \quad (2.26)$$

onde foi usado o fato de que  $\partial_\beta u_\beta = 0$ . Pela simetria do escoamento teremos que a única componente não nula da velocidade será  $u_x$  que dependerá somente da coordenada  $y$  e a pressão será unicamente dependente de  $x$ . Com isso a Equação (2.26) se torna

$$-\frac{dp}{dx} + \eta \partial_y \partial_y u_x = 0, \quad (2.27)$$

cuja solução, considerando que a mesma satisfaz as condições de não deslizamento em cima das placas, ou seja,  $u_x(0) = 0$  e  $u_x(M) = 0$ , onde  $M$  é a distancia vertical entre as placas tal que a largura de cada uma é desconsiderada, será:

$$u_x(y) = \frac{1}{2\eta} \frac{dp}{dx} y(y - M), \quad (2.28)$$

em que  $\frac{dp}{dx} < 0$ . Se definirmos que em  $y = \frac{M}{2}$  a velocidade é  $u_0$ , então

$$u_x(y) = -\frac{4u_0}{M^2} y(y - M). \quad (2.29)$$

de modo que  $u_0$  é a velocidade máxima do perfil parabólico.

Calculando agora a vorticidade, que mede quanto uma parcela de fluido gira localmente, cujas componentes são definidas por:

$$\omega_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \partial_\beta u_\gamma, \quad (2.30)$$

em que  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  é o símbolo de Levi-Civita, sendo o mesmo, igual a +1 se  $\alpha\beta\gamma$  são permutações cíclicas, -1 se não são e 0 se algum dos índices forem repetidos. Para o caso bidimensional do escoamento entre duas placas paralelas, tem-se somente a componente  $z$  da vorticidade

$$\omega_z = \partial_x u_y - \partial_y u_x = -\frac{du_x}{dy} = -\frac{1}{\eta} \frac{dp}{dx} \left( y - \frac{M}{2} \right). \quad (2.31)$$

Com o resultado encontrado na Equação (2.31), nota-se que a vorticidade é nula em  $y = \frac{M}{2}$ , positiva em  $y > \frac{M}{2}$  e negativa em  $y < \frac{M}{2}$ . Supondo agora, que a pressão seja dada por uma equação do tipo  $y = ax + b$ , onde  $a$  e  $b$  são, respectivamente, o coeficiente angular e linear de uma reta qualquer, tem-se que  $\frac{dp}{dx} = a = \text{constante}$ . Integrando a Equação (2.31) em toda área do sistema, resulta-se em:

$$\int_0^N \int_0^M \omega_z dx dy = -\frac{1}{\eta} \frac{dp}{dx} \int_0^N \int_0^M \left( y - \frac{M}{2} \right) dx dy = 0, \quad (2.32)$$

onde  $N$  é a largura total do sistema. O resultado encontrado na Equação (2.32) mostra que a soma da vorticidade em todos os pontos do sistema para o caso de um escoamento entre duas placas paralelas, é nula.

A vazão é definida para o caso geral por [1]:

$$q = \iint_S \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} d\sigma, \quad (2.33)$$

tal que  $\hat{\mathbf{n}}$  é o vetor normal à superfície  $S$ . A vazão calcula a quantidade de fluido que passa

em uma determinada superfície  $S$  em cada instante de tempo. Para o caso do escoamento bidimensional entre duas placas paralelas, tem-se que a vazão, que agora será dada por unidade de comprimento, será

$$q = \int_0^M u_x(y) dy = -\frac{M^3}{12\eta} \frac{dp}{dx}, \quad (2.34)$$

que é maior que zero pois  $\frac{dp}{dx} < 0$ .

### 3 Teoria Cinética

Neste capítulo, serão abordados conceitos iniciais sobre a teoria cinética dos gases, que é a base fenomenológica do método de Rede de Boltzmann (LBM), que será tratado nos próximos capítulos. Serão introduzidos conceitos cruciais, como a função de distribuição e sua dinâmica, bem como o operador de colisão e a função de distribuição do equilíbrio. A teoria cinética usa uma descrição estatística mesoscópica para conectar propriedades macroscópicas do fluido, como a densidade, velocidade e pressão, entre outros. A mesma pode ser usada para descrever qualquer fluido [3], porém o foco desse capítulo será para o caso de gases diluídos, embora também possa ser feita uma teoria que se aplique para líquidos em geral [26]. Isso significa que serão considerados gases monoatômicos diluídos de modo que as colisões tratadas são binárias e toda a energia está na forma de energia cinética translacional.

#### 3.1 A Função de Distribuição, a Equação de Boltzmann e o Operador de Colisão

A função de distribuição  $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t)$  representa a densidade de partículas com velocidade  $\boldsymbol{\zeta}$ , na posição  $\mathbf{x}$  e no tempo  $t$ . Sendo uma generalização da densidade  $\rho(\mathbf{x}, t)$ , que é a densidade de massa no espaço físico,  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t)$  descreve a densidade de massa tanto no espaço físico quanto no espaço de velocidades. A dinâmica dessa função é governada pela equação de Boltzmann [4]:

$$D_t f = \partial_t f + \zeta_\beta \partial_\beta f + \frac{F_\beta}{\rho} \partial_{\zeta_\beta} f = \Omega(f), \quad (3.1)$$

onde  $\partial_{\zeta_\beta} = \frac{\partial}{\partial \zeta_\beta}$  é a componente do gradiente no espaço de velocidades,  $F_\beta$  a componente das forças externas,  $D_t = \frac{d}{dt} = \partial_t + \zeta_\beta \partial_\beta + \frac{F_\beta}{\rho} \partial_{\zeta_\beta}$  a derivada total e  $\Omega$  é o chamado operador de colisão, responsável por modificar a função de distribuição devido às colisões. O operador  $\Omega$  deve satisfazer algumas características. A primeira delas está relacionada com a conservação da massa, ou seja,

$$\int \Omega(f) d^3 \zeta = 0, \quad (3.2)$$

a segunda com a conservação do momento, sendo

$$\int \boldsymbol{\zeta} \Omega(f) d^3 \zeta = \mathbf{0}, \quad (3.3)$$

em que as integrais são realizadas em todo o espaço das velocidades. As características relacionadas à conservação da energia total e interna são, respectivamente, dadas por:

$$\int |\boldsymbol{\zeta}|^2 \Omega(f) d^3 \zeta = 0, \quad (3.4a)$$

$$\int |\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}|^2 \Omega(f) d^3 \zeta = 0. \quad (3.4b)$$

O operador de colisão original [25] é muito difícil de ser tratado, tornando necessária uma simplificação. Para isso, será introduzido o operador de colisão BGK [22], cujo nome deriva dos seus inventores Bhatnagar, Gross e Krook. O operador BGK é dado por:

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \quad (3.5)$$

onde  $f^{eq}$  é a função de distribuição do equilíbrio e  $\tau$  é o tempo de relaxação, ou seja, o tempo em que  $f$  relaxa para o equilíbrio. Introduzindo a Equação (3.5) em (3.1), tem-se que

$$D_t f = \partial_t f + \zeta_\beta \partial_\beta f + \frac{F_\beta}{\rho} \partial_{\zeta_\beta} f = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \quad (3.6)$$

que é a equação de Boltzmann com o operador BGK.

### 3.2 A Função de Distribuição do Equilíbrio

Analisando a Equação (3.6) para um caso sem forças externas e espacialmente homogêneo, ou seja,  $F_\beta = 0$  e  $f = f(\zeta, t)$ , tem-se a seguinte relação:

$$\partial_t f = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \quad (3.7)$$

integrando-a em relação a  $t$  e considerando que, para  $t = 0$ ,  $f = f(\zeta, 0)$ , encontra-se que

$$f(\zeta, t) = f^{eq}(\zeta) + e^{-t/\tau}(f(\zeta, 0) - f^{eq}(\zeta)). \quad (3.8)$$

Observando a Equação (3.8), ao fazer  $t \rightarrow +\infty$ , conclui-se que  $f \rightarrow f^{eq}$ . Esse comportamento será assumido para um caso geral, ou seja, se um gás for deixado sozinho tempo suficiente, sua função de distribuição alcançará a distribuição do equilíbrio, que corresponde à distribuição de Maxwell-Boltzmann. No caso geral, esta é dada por [5]:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}, t) = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{D/2} e^{-|\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}|^2 / (2RT)}, \quad (3.9)$$

onde  $T$  é a temperatura,  $\rho$  a densidade de massa,  $R$  a constante específica dos gases,  $D$  o número de dimensões espaciais e  $\mathbf{u}$  é a velocidade do referencial, tal que como considerado nos capítulos anteriores são parâmetros macroscópicos do fluido.

### 3.3 Momentos da Função de Distribuição

A função de distribuição  $f$  pode ser conectada com as variáveis macroscópicas se for tomado os momentos da mesma. Com isso tem-se que a densidade de massa será [3]:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t) d^3 \boldsymbol{\zeta} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t) d^3 \boldsymbol{\zeta}, \quad (3.10)$$

e a densidade de momento, será dada por

$$\rho(\mathbf{x}, t)u_\alpha(\mathbf{x}, t) = \int \zeta_\alpha f(\mathbf{x}, \zeta, t) d^3\zeta = \int \zeta_\alpha f^{eq}(\mathbf{x}, \zeta, t) d^3\zeta. \quad (3.11)$$

Nas Equações (3.10) e (3.11) foram usadas as relações de conservação para o operador BGK, dadas pelas Equações (3.2) e (3.3). As componentes do estresse total também podem ser definidas da seguinte maneira:

$$\sigma_{\alpha\beta} = - \int (\zeta_\alpha - u_\alpha)(\zeta_\beta - u_\beta) f d^3\zeta. \quad (3.12)$$

Pode-se chegar em outras variáveis macroscópicas, mas para os intuítos desse trabalho a densidade de massa e de momento linear são suficientes. Integrando a distribuição do equilíbrio, ou seja, a Equação (3.9), encontra-se os resultados dados pelas Equações (3.10) e (3.11). Outras expressões, que podem ser encontradas procedendo-se da mesma forma com a distribuição do equilíbrio, são:

$$\int \zeta_\alpha \zeta_\beta f^{eq} d^3\zeta = \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \quad (3.13a)$$

$$\int \zeta_\alpha \zeta_\beta \zeta_\gamma f^{eq} d^3\zeta = \rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}), \quad (3.13b)$$

de modo que a Equação (2.22) foi utilizada, ou seja,  $c_s = \sqrt{RT}$ .

### 3.4 Recuperando a Equação de Conservação da Massa

Integrando a Equação (3.1) em todo o espaço de velocidades, ou seja, tomando o primeiro momento, se alcança:

$$\partial_t \int f d^3\zeta + \partial_\beta \int \zeta_\beta f d^3\zeta + \frac{F_\beta}{\rho} \int \partial_{\zeta_\beta} f d^3\zeta = \int \Omega(f) d^3\zeta = 0, \quad (3.14)$$

tal que a Equação (3.2) foi utilizada. Com o teorema fundamental do cálculo, notando-se também que a integral é feita em todo o espaço de velocidades, tem-se que a integral relacionada ao termo de forças externas se anula. Usando as Equações (3.10) e (3.11), obtém-se

$$\partial_t \rho + \partial_\beta (\rho u_\beta) = 0, \quad (3.15)$$

que nada mais é que a equação da continuidade descrita previamente por (2.1).

### 3.5 Recuperando a Equação de Conservação do Momento

Tomando o segundo momento da Equação (3.1), ou seja, multiplicando-a por  $\zeta_\alpha$  e integrando-a em todo o espaço de velocidades, chega-se em:

$$\partial_t \int \zeta_\alpha f d^3\zeta + \partial_\beta \int \zeta_\alpha \zeta_\beta f d^3\zeta + \frac{F_\beta}{\rho} \int \zeta_\alpha \partial_{\zeta_\beta} f d^3\zeta = \int \zeta_\alpha \Omega(f) d^3\zeta = 0, \quad (3.16)$$

de modo que a Equação (3.3) foi usada. A primeira relação a se notar é que

$$\int \zeta_\alpha \partial_{\zeta_\beta} f d^3\zeta = - \int f \partial_{\zeta_\beta} \zeta_\alpha d^3\zeta = -\rho \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.17)$$

onde foram utilizadas a integração por partes e a Equação (3.10) para alcançar este resultado. Outra relação importante é

$$\begin{aligned} \int \zeta_\alpha \zeta_\beta f d^3\zeta &= \rho u_\alpha u_\beta + \int \zeta_\alpha \zeta_\beta f d^3\zeta - u_\alpha \int \zeta_\beta f d^3\zeta - u_\beta \int \zeta_\alpha f d^3\zeta + u_\alpha u_\beta \int f d^3\zeta = \\ &= \rho u_\alpha u_\beta + \int (\zeta_\alpha - u_\alpha)(\zeta_\beta - u_\beta) f d^3\zeta = \rho u_\alpha u_\beta - \sigma_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

tal que foram utilizadas na dedução as Equações (2.8), (2.9), (3.10), (3.11) e (3.12). Colocando (3.17) e (3.18) em (3.16), obtém-se:

$$\partial_t \int \zeta_\alpha f d^3\zeta + \partial_\beta M_{\alpha\beta} + \frac{F_\beta}{\rho} (-\rho \delta_{\alpha\beta}) = 0, \quad (3.19)$$

e usando novamente as Equações (3.10) e (3.11), conclui-se que

$$\partial(\rho u_\alpha) + \partial_\beta M_{\alpha\beta} = F_\alpha, \quad (3.20)$$

que é a NSE dada pela Equação (2.10).

## 4 Método de Rede de Boltzmann

### 4.1 Método Tradicional

O método de rede de Boltzmann (LBM) vem ganhando cada vez mais adeptos ao se tratar de simulações hidrodinâmicas. Diferente dos métodos tradicionais que solucionam diretamente a equação de Navier-Stokes (NSE), o LBM é baseado em uma rede, onde, em cada ponto, existe uma função de distribuição que representa a densidade de partículas com dada velocidade, em uma posição determinada e em um dado instante de tempo. Em cada sítio da rede são realizados dois processos principais: a colisão e a propagação. No primeiro, as funções de distribuição são recalculadas, simbolizando a colisão de partículas. No segundo, a função é propagada para o sítio vizinho de acordo com uma direção específica [3]. Neste capítulo serão introduzidos os conceitos principais do método de rede tradicional e no capítulo seguinte uma modificação do mesmo chamada momentos centrais. Como serão discretizadas algumas variáveis, as mesmas serão tomadas adimensionais, sendo mantida a notação dos capítulos anteriores.

#### 4.1.1 Do Contínuo para o Discreto

O LBM consiste em solucionar a Equação (3.1) para o caso discreto. O primeiro passo para discretizar a equação de Boltzmann se baseia na discretização da função de distribuição do equilíbrio. Para fazer isto de forma rigorosa é necessário expandir a mesma em termo dos polinômios de Hermite e utilizar o processo de quadratura de Gauss-Hermite [3], o que não será abordado aqui. O conjunto de funções do equilíbrio discreto deve satisfazer as mesmas leis de conservação para os primeiros três momentos assim como as funções contínuas [3]. As leis já foram discutidas nas Equações (3.2), (3.3) e (3.4). Uma forma menos rigorosa, porém simplificada, é expandir a função de distribuição do equilíbrio, ou seja, a Equação (3.9) em série de Taylor da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{u}, t) &= f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t) - u_\beta \partial_{\zeta_\beta} f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t) + \frac{1}{2!} u_\alpha u_\beta \partial_{\zeta_\alpha} \partial_{\zeta_\beta} f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, t) - \dots \\
 &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} e^{-(\zeta_\sigma \zeta_\sigma)/(2RT)} - u_\beta \partial_{\zeta_\beta} \left( \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} e^{-(\zeta_\sigma \zeta_\sigma)/(2RT)} \right) + \\
 &\quad \frac{1}{2} u_\alpha u_\beta \partial_{\zeta_\alpha} \partial_{\zeta_\beta} \left( \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} e^{-(\zeta_\sigma \zeta_\sigma)/(2RT)} \right) - \dots \\
 &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} e^{-(\zeta_\sigma \zeta_\sigma)/(2RT)} \left[ 1 - u_\beta \left( -\frac{2\zeta_\beta}{2RT} \right) \right] + \quad (4.1) \\
 &\quad \frac{1}{2} \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} u_\alpha u_\beta \partial_{\zeta_\alpha} \left( -\frac{2\zeta_\beta}{2RT} e^{-(\zeta_\sigma \zeta_\sigma)/(2RT)} \right) - \dots \\
 &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} e^{-(\zeta_\sigma \zeta_\sigma)/(2RT)} \left[ 1 + \frac{\zeta_\beta u_\beta}{RT} + \frac{1}{2} u_\alpha u_\beta \left( -\frac{\delta_{\alpha\beta}}{RT} + \frac{\zeta_\alpha \zeta_\beta}{(RT)^2} \right) \right] - \dots \\
 &= \left( \frac{e^{-(\zeta_\sigma \zeta_\sigma)/(2c_s^2)}}{(2\pi c_s^2)^{D/2}} \right) \rho \left[ 1 + \frac{\zeta_\beta u_\beta}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta (\zeta_\alpha \zeta_\beta - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} \right] - \dots,
 \end{aligned}$$

onde tal expansão pode ser feita somente se for considerado baixos números de Mach, ou seja,  $|\mathbf{u}|/\sqrt{RT} \ll 1$ . Com isso, observa-se que a distribuição do equilíbrio, discretizando-se o espaço de velocidades e desconsiderando os termos de ordem superior, se tornará

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left( 1 + \frac{c_{i\beta} u_\beta}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta (c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} \right), \quad (4.2)$$

onde  $c_i$  são as velocidades discretizadas na direção  $i$ , tal que  $0 \leq i \leq (q-1)$ , onde  $q$  dependerá do modelo LBM abordado e será discutido posteriormente,  $w_i$  é o peso associado com a quadratura de Gauss-Hermite [3] e novamente  $c_s = \sqrt{RT}$  é a velocidade do som no meio. Tendo essas questões em mente, a equação de Boltzmann com o operador BGK discretizada, na ausência de forças externas, será:

$$\partial_t f_i + \mathbf{c}_i \cdot \nabla f_i = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}). \quad (4.3)$$

Integrando a Equação (4.3) de  $t$  até  $t + \Delta t$  ao longo de um caminho e assumindo a constância do termo de colisão neste intervalo [5], encontra-se:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)). \quad (4.4)$$

E por fim, os momentos macroscópicos são dados por:

$$\rho = \sum_{i=0}^{q-1} f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^{q-1} \mathbf{c}_i f_i. \quad (4.5)$$

#### 4.1.2 Velocidades Discretizadas

Os conjuntos de velocidades e pesos não podem ser escolhidos aleatoriamente, eles devem resultar no caso discretizado análogo ao contínuo dado pelas Equações (3.10), (3.11), (3.13a) e (3.13b), ou seja, as velocidades e pesos devem ser escolhidos de forma que ao tomar momentos da função do equilíbrio, encontra-se as variáveis macroscópicas:

$$\sum_{i=0}^{q-1} f_i^{eq} = \rho, \quad (4.6a)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} c_{i\alpha} f_i^{eq} = \rho u_\alpha, \quad (4.6b)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{eq} = \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \quad (4.6c)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} f_i^{eq} = \rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}), \quad (4.6d)$$

e para encontrar as condições que os conjuntos de velocidades e peso devem satisfazer, serão feitas algumas manipulações. Colocando a Equação (4.2) dentro de (4.6a), chega-se em

$$\rho = \rho \left( \sum_{i=0}^{q-1} w_i + \sum_{i=0}^{q-1} w_i \frac{c_{i\beta} u_\beta}{c_s^2} + \sum_{i=0}^{q-1} w_i \frac{u_\alpha u_\beta (c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} \right). \quad (4.7)$$

Com as questões tratadas anteriormente, as seguintes relações devem ser satisfeitas para que o primeiro momento resulte em  $\rho$ :

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i = 1, \quad (4.8a)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i c_{i\alpha} = 0, \quad (4.8b)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = c_s^2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.8c)$$

Procedendo da mesma forma com as Equações (4.6b), (4.6c) e (4.6d), encontra-se todas as relações que devem ser satisfeitas e que serão dadas por:

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i = 1, \quad (4.9a)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i c_{i\alpha} = 0, \quad (4.9b)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = c_s^2 \delta_{\alpha\beta}, \quad (4.9c)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = 0, \quad (4.9d)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\mu} = c_s^2 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\mu} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma}), \quad (4.9e)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\mu} c_{i\nu} = 0. \quad (4.9f)$$

Já que foram introduzidas anteriormente as condições necessárias para escolher um conjunto de velocidades, está na hora de falar mais especificamente sobre algum. Um dos conjuntos mais usados em hidrodinâmica é o conjunto D2Q9 e consiste em uma configuração bidimensional e com nove velocidades discretizadas, como está ilustrado na Figura 4.1, daí a nomenclatura D2Q9, que no geral é da forma DdQq, onde d e q são, respectivamente, o número de dimensões espaciais e de velocidades discretizadas. Os vetores para o D2Q9 são [4]:

$$\mathbf{c}_j = \begin{cases} (0, 0), & j = 0 \\ \frac{\Delta x}{\Delta t} \left( \cos \left[ (j-1) \frac{\pi}{2} \right], \sin \left[ (j-1) \frac{\pi}{2} \right] \right), & j = 1 - 4 \\ \sqrt{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left( \cos \left[ (j - \frac{9}{2}) \frac{\pi}{2} \right], \sin \left[ (j - \frac{9}{2}) \frac{\pi}{2} \right] \right), & j = 5 - 8 \end{cases} \quad (4.10)$$

de modo que ao solucionar-se o sistema dado pelas Equações (4.9a) até (4.9f) para o caso D2Q9

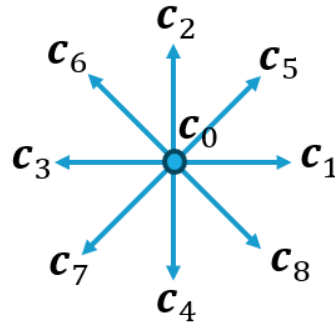


Figura 4.1: Possível conjunto de vetores velocidade para o caso bidimensional e com nove velocidades possíveis (D2Q9). O vetor  $c_0$  no centro indica o caso em que a partícula esteja parada.

com os vetores citados em (4.10), encontra-se que  $w_0 = 4/9$ ,  $w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = 1/9$ ,  $w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = 1/36$  e  $c_s = \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{1}{\sqrt{3}}$ , tal que  $\Delta x$  é o espaçamento de rede e  $\Delta t$  o passo de tempo de cada iteração, que em todo o trabalho serão considerados como um, sendo uma prática bem comum no LBM [4], ou seja,  $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ . A Tabela 4.1.1 mostra os vetores e os pesos para o caso D2Q9 com as considerações anteriores.

Vetores	Pesos
$c_0 = (0, 0)$	$w_0 = \frac{4}{9}$
$c_1 = (1, 0)$	$w_1 = \frac{1}{9}$
$c_2 = (0, 1)$	$w_2 = \frac{1}{9}$
$c_3 = (-1, 0)$	$w_3 = \frac{1}{9}$
$c_4 = (0, -1)$	$w_4 = \frac{1}{9}$
$c_5 = (1, 1)$	$w_5 = \frac{1}{36}$
$c_6 = (-1, 1)$	$w_6 = \frac{1}{36}$
$c_7 = (-1, -1)$	$w_7 = \frac{1}{36}$
$c_8 = (1, -1)$	$w_8 = \frac{1}{36}$

Tabela 4.1.1: Configuração de vetores e pesos para o caso de uma rede bidimensional e com nove velocidades (D2Q9). Na primeira coluna estão todos as velocidades calculadas de acordo com a Equação (4.10) e na segunda coluna estão os pesos associados para cada velocidade.

### 4.1.3 Expansão Chapman-Enskog

Para derivar as NSE a partir da equação de Boltzmann discretizada é necessário fazer uso da análise Chapman-Enskog que se baseia no fato de que fenômenos físicos diferentes acontecem em escalas de tempo diferentes. A difusão de massa, momento e energia acontecem em uma escala de tempo mais lenta enquanto a advecção é mais rápida [24]. A análise é feita detalhadamente no Apêndice A.1. Lá foi encontrado que a equação de Boltzmann discretizada soluciona a NSE fracamente compressível para baixos números de Mach e para a viscosidade cinemática

$$\nu = c_s^2 \left( \tau - \frac{1}{2} \right), \quad (4.11)$$

onde  $\tau$  é o tempo de relaxação definido em 3.5 e salientando novamente que foram tomados  $\Delta x = 1$  e  $\Delta t = 1$ . Outro resultado importante encontrado foi a expressão para a taxa de cisalhamento, dada por (ver Equação (A.28)):

$$S_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2\tau\rho c_s^2} \sum_{i=0}^{q-1} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{neq}, \quad (4.12)$$

em que  $f_i^{neq} = f_i - f_i^{eq}$  é a função de distribuição do não-equilíbrio. As aproximações feitas na análise são as grandes responsáveis pela limitação do método para baixos números de Mach e as mesmas são analisadas em [24]. Como pode ser visto na Equação (4.11), para  $\tau < 1/2$  a viscosidade cinemática é negativa, o que não tem sentido físico.

### 4.1.4 Colisão e Propagação

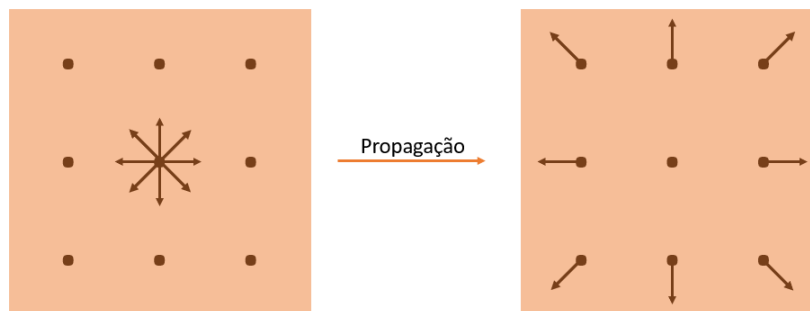


Figura 4.2: Ilustração do processo de propagação escolhendo como exemplo uma rede bidimensional (D2Q9). Aqui foi tomado somente um pedaço da rede, sendo considerado unicamente a propagação das funções de distribuição do sítio central com o intuito puramente didático.

O LBM é composto de dois processos: colisão e propagação. O primeiro deles é responsável por transformar a função de distribuição devido às colisões. No segundo as mesmas são propagadas para o sítio vizinho de acordo com as direções dadas pelo conjunto de velocidades discretizadas  $\{c_i\}$ . O processo de propagação está ilustrado na Figura 4.2.

Observando a equação de Boltzmann:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (4.13)$$

vê-se que, ao tomar  $f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1)$ , tem-se

$$f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (4.14)$$

onde  $f_i^*$  é a função de distribuição depois da colisão. Logo após, tem-se a propagação:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = f_i^*(\mathbf{x}, t). \quad (4.15)$$

#### 4.1.5 Condições de Contorno (Bounce-Back Modificado)

Uma rede LBM consiste em diversos sítios, de modo que cada um deles poderá ser identificado como sólido ou fluido. Se for imaginado um escoamento bidimensional entre duas placas paralelas imóveis, onde as placas são representadas por sítios sólidos e entre elas encontram-se sítios que descrevem o fluido, na superfície delas a velocidade do fluido será zero. Essa condição é conhecida como condição de não deslizamento, que se dá quando a velocidade do fluido é igual à velocidade do objeto sólido naquela região. Para garantir as condições de não deslizamento, o LBM introduz uma condição chamada Bounce-Back (BB). Existem diferentes esquemas de BB, um deles é o Bounce-Back modificado, de forma que ele é realizado depois do processo de propagação e para este caso a colisão deve ser realizada também nos sítios sólidos. O BB é dado por [4]:

$$f_i = f_{i'} + 2 \frac{\rho w_i}{c_s^2} (\mathbf{u}_b \cdot \mathbf{c}_i), \quad (4.16)$$

onde  $\mathbf{u}_b$  é a velocidade do sítio sólido e  $f_{i'}$  é a função de distribuição na direção oposta a  $i$ . Para demonstrar que a condição citada em (4.16) resulta nas condições de não deslizamento, as direções serão separados em dois conjuntos. O primeiro será das direções comuns e o segundo das opostas. Para ficar mais claro essa questão, observa-se que para o D2Q9, o primeiro conjunto de funções de distribuição será  $\{f_1, f_2, f_5, f_6\}$  e o segundo  $\{f_3, f_4, f_7, f_8\}$  (o mesmo vale para as velocidades discretizadas e seus consecutivos pesos). Tendo tais conceitos em mente, com o auxílio de (4.16) e usando-se que  $c_{0\alpha} f_0 = 0$ , tem-se

$$\begin{aligned} \rho u_\alpha &= \sum_{i=0}^{q-1} c_{i\alpha} f_i = \sum_{i \text{ comuns}} c_{i\alpha} f_i + \sum_{i \text{ opostas}} c_{i\alpha} f_i \\ &= \sum_{i \text{ comuns}} c_{i\alpha} f_{i'} + 2 \frac{\rho}{c_s^2} u_{b\beta} \sum_{i \text{ comuns}} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} + \sum_{i \text{ opostas}} c_{i\alpha} f_i \\ &= - \sum_{i \text{ comuns}} c_{i'\alpha} f_{i'} + \sum_{i \text{ opostas}} c_{i\alpha} f_i + 2 \frac{\rho}{c_s^2} u_{b\beta} \sum_{i \text{ comuns}} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \\ &= 2 \frac{\rho}{c_s^2} u_{b\beta} \sum_{i \text{ comuns}} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

em que foi usado o fato de que  $c_{i'\alpha} = -c_{i\alpha}$  e somar as opostas pelo conjunto das comuns é o mesmo que somar comuns no conjunto das opostas. Usando agora a Equação (4.9c), resulta-se em

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{q-1} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta} = \sum_{\substack{i \\ \text{comuns}}} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} + \sum_{\substack{i \\ \text{opostas}}} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \\ &= \sum_{\substack{i \\ \text{comuns}}} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} + \sum_{\substack{i \\ \text{opostas}}} w_{i'} c_{i'\alpha} c_{i'\beta} = 2 \sum_{\substack{i \\ \text{comuns}}} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

de modo que foi usado também o fato de que  $w_i = w_{i'}$ . Então introduzindo a Equação (4.18) em (4.17) a mesma se tornará:

$$\rho u_\alpha = \frac{\rho}{c_s^2} u_{b\beta} (c_s^2 \delta_{\alpha\beta}), \quad (4.19)$$

portanto, conclui-se que

$$u_\alpha = u_{b\alpha}, \quad (4.20)$$

provando que a Equação (4.16) leva às condições de não deslizamento, que para o caso de  $\mathbf{u}_b = \mathbf{0}$ , tem-se que  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ , ou seja, a velocidade do fluido é zero na superfície sólida para uma parede imóvel.

Uma coisa importante a se notar é que as deduções feitas partiram-se da hipótese da inversão das populações dada pela Equação (4.16) e daí foi alcançado que as condições de não deslizamento são satisfeitas através desse processo. Pensando no caso bidimensional entre duas placas paralelas, para garantir as condições de não deslizamento na placa superior deve-se fazer  $f_4 = f_2$ ,  $f_7 = f_5$  e  $f_8 = f_6$ . Como  $f_1$  e  $f_3$  não se propagarão dentro do sólido desde o começo, então  $f_1 = f_3$  também. Para a placa inferior, as condições serão invertidas, ou seja,  $f_2 = f_4$ ,  $f_5 = f_7$  e  $f_6 = f_8$ .

#### 4.1.6 Condições de Contorno com Velocidade Conhecida

Em diversas situações a velocidade em um determinado local ou superfície sólida é previamente estabelecida. Para abordar esse caso, utilizam-se condições de contorno com velocidade conhecida. A seguir, serão demonstradas as condições para o caso em que a velocidade é estabelecida no início de um canal bidimensional (D2Q9) e para tal caso tem-se algumas variáveis desconhecidas  $f_1$ ,  $f_5$ ,  $f_8$  e  $\rho$  (ver Figura 4.3). Sabendo disso, a tarefa será escrever as variáveis desconhecidas em função das demais. Para isto, utilizando-se o conjunto de velocidades definidos na Tabela 4.1.1 e as Equações (4.5), encontra-se que

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8, \quad (4.21)$$

a componente  $x$  da densidade de momento é

$$\rho u_x = \sum_{i=0}^8 c_{ix} f_i = (f_1 - f_3) + (f_5 - f_7) + (f_8 - f_6), \quad (4.22)$$

e a componente  $y$  será

$$\rho u_y = \sum_{i=0}^8 c_{iy} f_i = (f_2 - f_4) + (f_5 - f_7) + (f_6 - f_8). \quad (4.23)$$

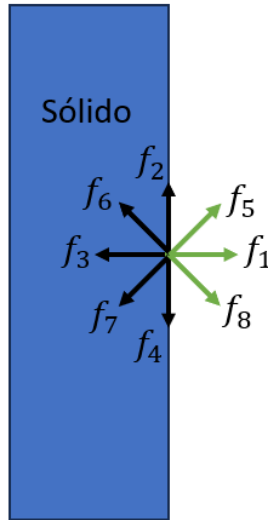


Figura 4.3: Ilustração da condição de contorno com velocidade conhecida para o caso bidimensional D2Q9. As funções de distribuição com vetores de coloração preta representam as distribuições conhecidas e com cor verde as desconhecidas. O objeto em azul denotado por "sólido" representa um local da rede onde a condição de contorno está sendo aplicada. Nota-se que  $f_2$  e  $f_4$  estão apontando em direções opostas na borda do sólido.

Será assumido também a validade do BB para a função de distribuição do não-equilíbrio [27], ou seja,  $f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq}$ , com isso, utilizando-se a distribuição do equilíbrio dada pela Equação (4.2), resulta-se em:

$$f_1^{eq} = \frac{\rho}{9} \left[ 1 + 3u_x + \frac{9}{2} \left( u_x^2 - \frac{1}{3} (u_x^2 + u_y^2) \right) \right], \quad (4.24)$$

e para  $f_3^{eq}$ , chega-se em

$$f_3^{eq} = \frac{\rho}{9} \left[ 1 - 3u_x + \frac{9}{2} \left( u_x^2 - \frac{1}{3} (u_x^2 + u_y^2) \right) \right], \quad (4.25)$$

então

$$f_1 = f_1^{eq} + f_3 - f_3^{eq} = f_3 + \frac{2}{3} \rho u_x. \quad (4.26)$$

Resolvendo o sistema composto pelas Equações (4.21), (4.22), (4.23) e (4.26), resulta-se nas seguintes relações para as variáveis desconhecidas:

$$\rho = \frac{1}{1 - u_x} [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)], \quad (4.27a)$$

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3}\rho u_x, \quad (4.27b)$$

$$f_5 = f_7 + \frac{\rho u_x}{6} + \frac{\rho u_y}{2} - \frac{f_2 - f_4}{2}, \quad (4.27c)$$

$$f_8 = f_6 + \frac{\rho u_x}{6} - \frac{\rho u_y}{2} + \frac{f_2 - f_4}{2}, \quad (4.27d)$$

de modo que para os demais casos, ou seja, para o topo, baixo e lateral da direita, as mesmas ideias podem ser usadas [4]. Caso a densidade seja conhecida e a componente  $x$  da velocidade desconhecida, deve-se inverter a Equação (4.27a), se tornando

$$u_x = 1 - \frac{1}{\rho} [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)], \quad (4.28)$$

tal que a componente  $y$  da velocidade deve ser previamente conhecida de modo a fechar o sistema. A grande vantagem dessa abordagem em relação à Equação (4.16) é que ela proporciona maior precisão numérica [5].

#### 4.1.7 Algoritmo Básico

Será descrito agora uma sucessão de passos a serem feitos para a criação de um algoritmo básico para o LBM. Existem diversas formas e diferentes ordens que os passos podem ser realizadas e aqui será mostrado uma delas. Os passos básicos serão:

1. Iniciar as variáveis  $\mathbf{u}$ ,  $\rho$  e as funções de distribuição de acordo com o tipo de escoamento que se deseja. A função de distribuição pode ser iniciada com a função de distribuição do equilíbrio.
2. Fazer a colisão utilizando a Equação (4.14).
3. Propagar as populações para os sítios vizinhos de acordo com (4.15).
4. Aplicar as condições de contorno.
5. Calcular as variáveis macroscópicas utilizando as Equações (4.5).
6. Retomar ao segundo passo até ser alcançado um determinado critério de convergência.

## 4.2 Momentos Centrais

O operador BGK introduzido anteriormente relaxa as funções de distribuição para o equilíbrio usando somente um tempo de relaxação denotado por  $\tau$ . Tal método apresenta instabilidades à medida que os gradientes de velocidades aumentam. O motivo dessas instabilidades não serão tratadas aqui, porém a principal causa é o surgimento de modos "fantasmas" e de artefatos não invariantes por transformação de Galileu. Para superar essas limitações, foi proposto um novo modelo de colisão, denominado "momentos centrais"(CM) [28]. Nessa nova abordagem cada momento relaxa para o equilíbrio com um tempo de relaxação diferente e no referencial do fluido em movimento. Será adotado aqui a versão não-ortogonal modificada do CM baseado na referência [28]. Portanto, neste capítulo será tratada a implementação desses novos conceitos. Para isso será utilizada a notação de bras e kets para representar os vetores, comum em sistemas quânticos que, neste contexto, será empregada apenas como uma ferramenta para facilitar a descrição do método, não tendo relação com sistemas quânticos em si.

### 4.2.1 Reescrevendo a Equação de Boltzmann com o Novo Formalismo

Para introduzir o CM, uma prévia para o novo formalismo será adotada transformando a equação de Boltzmann com os novos conceitos. Para isso, serão definidos os seguintes vetores:

$$|f_i\rangle = [f_0 \ f_1 \ \cdots \ f_q]^\top, \quad (4.29a)$$

$$|f_i^{eq}\rangle = [f_0^{eq} \ f_1^{eq} \ \cdots \ f_q^{eq}]^\top, \quad (4.29b)$$

$$|f_i^*\rangle = [f_0^* \ f_1^* \ \cdots \ f_q^*]^\top \quad (4.29c)$$

onde  $q$  simboliza no número de direções do modelo específico (DdQq), e a matriz

$$\mathbf{S} = \text{diag}(\omega, \omega, \cdots, \omega) = \omega \mathbf{I}, \quad (4.30)$$

que é a matriz diagonal (todos os elementos fora da diagonal principal são nulos) de relaxação, tal que  $\omega = \frac{1}{\tau}$ .

A equação de Boltzmann, para  $\Delta t = \Delta x = 1$ , é dada por:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \omega[f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)], \quad (4.31)$$

onde  $f_i^*$  é a função de distribuição depois da colisão. Usando os vetores definidos por (4.29) e a matriz (4.30), a equação de Boltzmann poderá ser escrita da seguinte maneira:

$$|f_i^*\rangle = |f_i\rangle - \mathbf{S}(|f_i\rangle - |f_i^{eq}\rangle), \quad (4.32)$$

notando-se que agora não se tem uma equação em forma de componentes  $i$  mas sim uma equação vetorial.

A colisão normalmente é realizada no espaço das velocidades, porém também pode ser

feita no espaço de momentos. Então, definindo-se uma matriz de transformação  $\mathbf{M}^\top$  em que  $|m_i\rangle = \mathbf{M}^\top |f_i\rangle$ , onde  $|m_i\rangle$  representa a função de distribuição no espaço dos momentos, o mesmo valendo para a função de distribuição do equilíbrio, então  $|f_i\rangle = (\mathbf{M}^\top)^{-1} |m_i\rangle$ , de modo que foi assumido o fato da matriz  $\mathbf{M}^\top$  possuir uma inversa, então

$$|m_i^*\rangle = |m_i\rangle - \mathbf{S}(|m_i\rangle - |m_i^{eq}\rangle) = \mathbf{M}^\top |f_i\rangle - \mathbf{S}\mathbf{M}^\top (|f_i\rangle - |f_i^{eq}\rangle), \quad (4.33)$$

que é a equação de Boltzmann no espaço dos momentos. Multiplicando ambos os lados por  $(\mathbf{M}^\top)^{-1}$ , tem-se

$$|f_i^*\rangle = (\mathbf{M}^\top)^{-1} |m_i^*\rangle = |f_i\rangle - (\mathbf{M}^\top)^{-1} \mathbf{S}\mathbf{M}^\top (|f_i\rangle - |f_i^{eq}\rangle), \quad (4.34)$$

com isso, tem-se que  $(\mathbf{M}^\top)^{-1} \mathbf{S}\mathbf{M}^\top = \mathbf{S}$ . O motivo da introdução desses conceitos será sanado na próxima sessão.

#### 4.2.2 Introduzindo os Momentos Centrais

Tomando agora o caso específico bidimensional e com nove direções D2Q9, pode-se definir os seguintes vetores:

$$|f_i\rangle = [f_0 \ f_1 \ \dots \ f_8]^\top, \quad (4.35a)$$

$$|f_i^{eq}\rangle = [f_0^{eq} \ f_1^{eq} \ \dots \ f_8^{eq}]^\top, \quad (4.35b)$$

$$|f_i^*\rangle = [f_0^* \ f_1^* \ \dots \ f_8^*]^\top \quad (4.35c)$$

$$|c_{ix}\rangle = [0 \ 1 \ 0 \ -1 \ 0 \ 1 \ -1 \ -1 \ 1]^\top, \quad (4.35d)$$

$$|c_{iy}\rangle = [0 \ 0 \ 1 \ 0 \ -1 \ 1 \ 1 \ -1 \ -1]^\top. \quad (4.35e)$$

Pode-se definir também o seguinte vetor:

$$|n, m\rangle = |(c_{ix} - u_x)^n (c_{iy} - u_y)^m\rangle = \left[ (c_{0x} - u_x)^n (c_{0y} - u_y)^m \ (c_{1x} - u_x)^n (c_{1y} - u_y)^m \ \dots \ (c_{8x} - u_x)^n (c_{8y} - u_y)^m \right]^\top, \quad (4.36)$$

onde  $c_{ix}$  e  $c_{iy}$  são, respectivamente as componentes dos vetores  $|c_{ix}\rangle$  e  $|c_{iy}\rangle$ . Já  $n$  e  $m$  são inteiros que podem assumir entre 0 e 2. Então pode-se definir uma matriz da seguinte forma:

$$\mathbf{M} = \left[ |0,0\rangle \ |1,0\rangle \ |0,1\rangle \ (|2,0\rangle + |0,2\rangle) \ (|2,0\rangle - |0,2\rangle) \ |1,1\rangle \ |2,1\rangle \ |1,2\rangle \ |2,2\rangle \right], \quad (4.37)$$

onde  $|0,0\rangle$  é o vetor coluna  $|1\rangle = [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]^\top$  e os vetores presentes na matriz  $\mathbf{M}^\top$  são a base dos momentos centrais [28]. Aplicando a transposta  $\mathbf{M}^\top$  em  $|f_i^{eq}\rangle$ ,

tem-se que

$$|m_i^{eq}\rangle = \mathbf{M}^\top |f_i^{eq}\rangle = \left[ \langle 1 | f_i^{eq} \rangle \quad \langle 1, 0 | f_i^{eq} \rangle \quad \langle 0, 1 | f_i^{eq} \rangle \quad \cdots \quad \langle 2, 1 | f_i^{eq} \rangle \quad \langle 1, 2 | f_i^{eq} \rangle \quad \langle 2, 2 | f_i^{eq} \rangle \right]^\top, \quad (4.38)$$

em que  $|m_i^{eq}\rangle$  é o vetor que define a função de distribuição do equilíbrio no espaço dos momentos e cujas componentes podem ser calculadas, usando as Equações (4.6a) até (4.6d), da seguinte maneira:

$$m_0^{eq} = \langle 1 | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 f_i^{eq} = \rho, \quad (4.39a)$$

$$m_1^{eq} = \langle 1, 0 | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x) f_i^{eq} = \rho u_x - \rho u_x = 0, \quad (4.39b)$$

$$m_2^{eq} = \langle 0, 1 | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{iy} - u_y) f_i^{eq} = 0, \quad (4.39c)$$

$$m_3^{eq} = (\langle 2, 0 | + \langle 0, 2 |) | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)^2 f_i^{eq} + \sum_{i=0}^8 (c_{iy} - u_y)^2 f_i^{eq} = 2\rho c_s^2, \quad (4.39d)$$

$$m_4^{eq} = (\langle 2, 0 | - \langle 0, 2 |) | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)^2 f_i^{eq} - \sum_{i=0}^8 (c_{iy} - u_y)^2 f_i^{eq} = 0, \quad (4.39e)$$

$$m_5^{eq} = \langle 1, 1 | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)(c_{iy} - u_y) f_i^{eq} = 0, \quad (4.39f)$$

$$m_6^{eq} = \langle 2, 1 | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)^2 (c_{iy} - u_y) f_i^{eq} = -\rho u_x^2 u_y, \quad (4.39g)$$

$$m_7^{eq} = \langle 1, 2 | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)(c_{iy} - u_y)^2 f_i^{eq} = -\rho u_x u_y^2, \quad (4.39h)$$

$$m_8^{eq} = \langle 2, 2 | f_i^{eq} \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)^2 (c_{iy} - u_y)^2 f_i^{eq} = \rho c_s^4 \left( \frac{3}{c_s^4} u_x^2 u_y^2 + 1 \right), \quad (4.39i)$$

de modo que  $\sum_{i=0}^8 c_{ix}^2 c_{iy}^2 f_i^{eq} = \rho c_s^2 (c_s^2 + u_x^2 + u_y^2)$  foi calculado com a ajuda de um código em python (ver Apêndice B.1). Portanto o vetor  $|m_i^{eq}\rangle$  será:

$$|m^{eq}\rangle = \left[ \rho \quad 0 \quad 0 \quad 2\rho c_s^2 \quad 0 \quad 0 \quad -\rho u_x^2 u_y \quad -\rho u_x u_y^2 \quad \rho c_s^4 \left( \frac{3}{c_s^4} u_x^2 u_y^2 + 1 \right) \right]^\top. \quad (4.40)$$

Nota-se pelas Equações (4.33) e (4.34), que para conseguir encontrar  $|f_i^*\rangle$ , é necessário saber-se  $|m_i^{eq}\rangle$ , que já foi encontrado,  $|m_i\rangle$ , a matriz  $\mathbf{S}$ , que será definida agora,  $\mathbf{M}^\top$ , que também já foi abordada e sua inversa. Então  $\mathbf{S}$  será definida como [28]:

$$\mathbf{S} = \text{diag}(\omega_0, \omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6, \omega_7, \omega_8), \quad (4.41)$$

onde  $\omega_4$  e  $\omega_5$  estão relacionadas com a viscosidade cinemática por:

$$\nu = c_s^2 \left( \frac{1}{\omega_4} - \frac{1}{2} \right), \quad (4.42a)$$

$$\nu = c_s^2 \left( \frac{1}{\omega_5} - \frac{1}{2} \right), \quad (4.42b)$$

$\omega_3$  está relacionado com a viscosidade volumétrica e as frequências restantes aos momentos de ordem superior. Tais relações são encontradas com a análise Chapman-Enskog para o CM, que é análogo ao caso tratado no Apêndice A.1. Portanto, ao contrário do LBM tradicional em que  $\mathbf{S} = \omega \mathbf{I}$ , no CM cada momento tende ao equilíbrio com um tempo de relaxação distinto.

### 4.2.3 Passos para o Algoritmo de Colisão

Juntando todas as ideias desenvolvidas até aqui, a implementação desse novo tipo de colisão pode ser resumido em três passos.

1. Calcular  $|m_i\rangle = \mathbf{M}^\top |f_i\rangle$  usando:

$$m_0 = \langle 1 | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 f_i, \quad (4.43a)$$

$$m_1 = \langle 1, 0 | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x) f_i, \quad (4.43b)$$

$$m_2 = \langle 0, 1 | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{iy} - u_y) f_i, \quad (4.43c)$$

$$m_3 = (\langle 2, 0 | + \langle 0, 2 |) | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)^2 f_i + \sum_{i=0}^8 (c_{iy} - u_y)^2 f_i, \quad (4.43d)$$

$$m_4 = (\langle 2, 0 | - \langle 0, 2 |) | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)^2 f_i - \sum_{i=0}^8 (c_{iy} - u_y)^2 f_i, \quad (4.43e)$$

$$m_5 = \langle 1, 1 | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)(c_{iy} - u_y) f_i, \quad (4.43f)$$

$$m_6 = \langle 2, 1 | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)^2 (c_{iy} - u_y) f_i, \quad (4.43g)$$

$$m_7 = \langle 1, 2 | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)(c_{iy} - u_y)^2 f_i, \quad (4.43h)$$

$$m_8 = \langle 2, 2 | f_i \rangle = \sum_{i=0}^8 (c_{ix} - u_x)^2 (c_{iy} - u_y)^2 f_i. \quad (4.43i)$$

2. Calcular  $|m_i^*\rangle = |m_i\rangle - \mathbf{S}(|m_i\rangle - |m_i^{eq}\rangle)$  com o  $|m_i\rangle$  encontrado no primeiro passo e as Equações (4.40) e (4.41), ou seja:

$$|m_i^*\rangle = |m_i\rangle - \mathbf{S}(|m_i\rangle - |m_i^{eq}\rangle) = \begin{bmatrix} \rho \\ 0 \\ 0 \\ 2c_s^2\rho \\ -m_4\omega_4 + m_4 \\ -m_5\omega_5 + m_5 \\ -\rho u_x^2 u_y \\ -\rho u_x u_y^2 \\ c_s^4\rho \left(1 + \frac{3u_x^2 u_y^2}{c_s^4}\right) \end{bmatrix}, \quad (4.44)$$

em que a matriz  $\mathbf{S}$  foi tomada como  $\mathbf{S} = \text{diag}(1, 1, 1, 1, \omega_4, \omega_5, 1, 1, 1)$ , de modo que os valores podem ser mudados para melhorar a estabilidade e  $\omega_4 = \omega_5 = \omega$ . Um código em python para calcular essa matriz que pode ser facilmente alterado para outras situações e valores distintos das variáveis, foi desenvolvido e está descrito no Apêndice B.2.

3. Calcular a distribuição no espaço de velocidades  $|f_i^*\rangle = (\mathbf{M}^\top)^{-1} |m_i^*\rangle$ , ou seja, inverter a matriz  $\mathbf{M}^\top$ . O mesmo código usado no segundo passo também foi usado para calcular  $|f_i^*\rangle$  para  $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$  e o mesmo está descrito no Apêndice B.2. Então as componentes de  $|f_i^*\rangle$  serão:

$$\begin{aligned} f_0^* &= m_0^* (u_x^2 u_y^2 - u_x^2 - u_y^2 + 1) + \\ m_1^* (2u_x u_y^2 - 2u_x) &+ m_2^* (2u_x^2 u_y - 2u_y) + m_3^* \left(\frac{1}{2}u_x^2 + \frac{1}{2}u_y^2 - 1\right) + \\ m_4^* \left(-\frac{1}{2}u_x^2 + \frac{1}{2}u_y^2\right) &+ 4m_5^* u_x u_y + 2m_6^* u_y + 2m_7^* u_x + m_8^*, \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} f_1^* &= m_0^* \left(-\frac{1}{2}u_x^2 u_y^2 + \frac{1}{2}u_x^2 - \frac{1}{2}u_x u_y^2 + \frac{1}{2}u_x\right) + \\ m_1^* \left(-u_x u_y^2 + u_x - \frac{1}{2}u_y^2 + \frac{1}{2}\right) &+ m_2^* (-u_x^2 u_y - u_x u_y) + \\ m_3^* \left(-\frac{1}{4}u_x^2 - \frac{1}{4}u_x - \frac{1}{4}u_y^2 + \frac{1}{4}\right) &+ m_4^* \left(\frac{1}{4}u_x^2 + \frac{1}{4}u_x - \frac{1}{4}u_y^2 + \frac{1}{4}\right) + \\ m_5^* (-2u_x u_y - u_y) - m_6^* u_y &+ m_7^* \left(-u_x - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}m_8^*, \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} f_2^* &= m_0^* \left(-\frac{1}{2}u_x^2 u_y^2 - \frac{1}{2}u_x^2 u_y + \frac{1}{2}u_y^2 + \frac{1}{2}u_y\right) + m_1^* (-u_x u_y^2 - u_x u_y) + \\ m_2^* \left(-u_x^2 u_y - \frac{1}{2}u_x^2 + u_y + \frac{1}{2}\right) &+ m_3^* \left(-\frac{1}{4}u_x^2 - \frac{1}{4}u_y^2 - \frac{1}{4}u_y + \frac{1}{4}\right) + \\ m_4^* \left(\frac{1}{4}u_x^2 - \frac{1}{4}u_y^2 - \frac{1}{4}u_y - \frac{1}{4}\right) &+ \\ m_5^* (-2u_x u_y - u_x) + m_6^* \left(-u_y - \frac{1}{2}\right) &- m_7^* u_x - \frac{1}{2}m_8^*, \end{aligned} \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned}
f_3^* &= m_0^* \left( -\frac{1}{2}u_x^2u_y^2 + \frac{1}{2}u_x^2 + \frac{1}{2}u_xu_y^2 - \frac{1}{2}u_x \right) + \\
& m_1^* \left( -u_xu_y^2 + u_x + \frac{1}{2}u_y^2 - \frac{1}{2} \right) + m_2^* \left( -u_x^2u_y + u_xu_y \right) + \\
& m_3^* \left( -\frac{1}{4}u_x^2 + \frac{1}{4}u_x - \frac{1}{4}u_y^2 + \frac{1}{4} \right) + m_4^* \left( \frac{1}{4}u_x^2 - \frac{1}{4}u_x - \frac{1}{4}u_y^2 + \frac{1}{4} \right) + \\
& m_5^* \left( -2u_xu_y + u_y \right) - m_6^*u_y + m_7^* \cdot \left( \frac{1}{2} - u_x \right) - \frac{1}{2}m_8^*,
\end{aligned} \tag{4.48}$$

$$\begin{aligned}
f_4^* &= m_0^* \left( -\frac{1}{2}u_x^2u_y^2 + \frac{1}{2}u_x^2u_y + \frac{1}{2}u_y^2 - \frac{1}{2}u_y \right) + \\
& m_1^* \left( -u_xu_y^2 + u_xu_y \right) + m_2^* \left( -u_x^2u_y + \frac{1}{2}u_x^2 + u_y - \frac{1}{2} \right) + \\
& m_3^* \left( -\frac{1}{4}u_x^2 - \frac{1}{4}u_y^2 + \frac{1}{4}u_y + \frac{1}{4} \right) + m_4^* \left( \frac{1}{4}u_x^2 - \frac{1}{4}u_y^2 + \frac{1}{4}u_y - \frac{1}{4} \right) + \\
& m_5^* \left( -2u_xu_y + u_x \right) + m_6^* \left( \frac{1}{2} - u_y \right) - m_7^*u_x - \frac{1}{2}m_8^*,
\end{aligned} \tag{4.49}$$

$$\begin{aligned}
f_5^* &= m_0^* \left( \frac{1}{4}u_x^2u_y^2 + \frac{1}{4}u_x^2u_y + \frac{1}{4}u_xu_y^2 + \frac{1}{4}u_xu_y \right) + \\
& m_1^* \left( \frac{1}{2}u_xu_y^2 + \frac{1}{2}u_xu_y + \frac{1}{4}u_y^2 + \frac{1}{4}u_y \right) + m_2^* \left( \frac{1}{2}u_x^2u_y + \frac{1}{4}u_x^2 + \frac{1}{2}u_xu_y + \frac{1}{4}u_x \right) + \\
& m_3^* \left( \frac{1}{8}u_x^2 + \frac{1}{8}u_x + \frac{1}{8}u_y^2 + \frac{1}{8}u_y \right) + m_4^* \left( -\frac{1}{8}u_x^2 - \frac{1}{8}u_x + \frac{1}{8}u_y^2 + \frac{1}{8}u_y \right) + \\
& m_5^* \left( u_xu_y + \frac{1}{2}u_x + \frac{1}{2}u_y + \frac{1}{4} \right) + m_6^* \left( \frac{1}{2}u_y + \frac{1}{4} \right) + m_7^* \left( \frac{1}{2}u_x + \frac{1}{4} \right) + \frac{1}{4}m_8^*,
\end{aligned} \tag{4.50}$$

$$\begin{aligned}
f_6^* &= m_0^* \left( \frac{1}{4}u_x^2u_y^2 + \frac{1}{4}u_x^2u_y - \frac{1}{4}u_xu_y^2 - \frac{1}{4}u_xu_y \right) + \\
& m_1^* \left( \frac{1}{2}u_xu_y^2 + \frac{1}{2}u_xu_y - \frac{1}{4}u_y^2 - \frac{1}{4}u_y \right) + \\
& m_2^* \left( \frac{1}{2}u_x^2u_y + \frac{1}{4}u_x^2 - \frac{1}{2}u_xu_y - \frac{1}{4}u_x \right) + m_3^* \left( \frac{1}{8}u_x^2 - \frac{1}{8}u_x + \frac{1}{8}u_y^2 + \frac{1}{8}u_y \right) + \\
& m_4^* \left( -\frac{1}{8}u_x^2 + \frac{1}{8}u_x + \frac{1}{8}u_y^2 + \frac{1}{8}u_y \right) + m_5^* \left( u_xu_y + \frac{1}{2}u_x - \frac{1}{2}u_y - \frac{1}{4} \right) + \\
& m_6^* \left( \frac{1}{2}u_y + \frac{1}{4} \right) + m_7^* \left( \frac{1}{2}u_x - \frac{1}{4} \right) + \frac{1}{4}m_8^*,
\end{aligned} \tag{4.51}$$

$$\begin{aligned}
f_7^* &= m_0^* \left( \frac{1}{4}u_x^2u_y^2 - \frac{1}{4}u_x^2u_y - \frac{1}{4}u_xu_y^2 + \frac{1}{4}u_xu_y \right) + \\
& m_1^* \left( \frac{1}{2}u_xu_y^2 - \frac{1}{2}u_xu_y - \frac{1}{4}u_y^2 + \frac{1}{4}u_y \right) + m_2^* \left( \frac{1}{2}u_x^2u_y - \frac{1}{4}u_x^2 - \frac{1}{2}u_xu_y + \frac{1}{4}u_x \right) + \\
& m_3^* \left( \frac{1}{8}u_x^2 - \frac{1}{8}u_x + \frac{1}{8}u_y^2 - \frac{1}{8}u_y \right) + m_4^* \left( -\frac{1}{8}u_x^2 + \frac{1}{8}u_x + \frac{1}{8}u_y^2 - \frac{1}{8}u_y \right) + \\
& m_5^* \left( u_xu_y - \frac{1}{2}u_x - \frac{1}{2}u_y + \frac{1}{4} \right) + m_6^* \left( \frac{1}{2}u_y - \frac{1}{4} \right) + m_7^* \left( \frac{1}{2}u_x - \frac{1}{4} \right) + \frac{1}{4}m_8^*,
\end{aligned} \tag{4.52}$$

$$\begin{aligned}
f_8^* = & m_0^* \left( \frac{1}{4} u_x^2 u_y^2 - \frac{1}{4} u_x^2 u_y + \frac{1}{4} u_x u_y^2 - \frac{1}{4} u_x u_y \right) + \\
& m_1^* \left( \frac{1}{2} u_x u_y^2 - \frac{1}{2} u_x u_y + \frac{1}{4} u_y^2 - \frac{1}{4} u_y \right) + m_2^* \left( \frac{1}{2} u_x^2 u_y - \frac{1}{4} u_x^2 + \frac{1}{2} u_x u_y - \frac{1}{4} u_x \right) + \\
& m_3^* \left( \frac{1}{8} u_x^2 + \frac{1}{8} u_x + \frac{1}{8} u_y^2 - \frac{1}{8} u_y \right) + m_4^* \left( -\frac{1}{8} u_x^2 - \frac{1}{8} u_x + \frac{1}{8} u_y^2 - \frac{1}{8} u_y \right) + \\
& m_5^* \left( u_x u_y - \frac{1}{2} u_x + \frac{1}{2} u_y - \frac{1}{4} \right) + \\
& m_6^* \left( \frac{1}{2} u_y - \frac{1}{4} \right) + m_7^* \left( \frac{1}{2} u_x + \frac{1}{4} \right) + \frac{1}{4} m_8^*.
\end{aligned} \tag{4.53}$$

Os passos previamente descritos juntamente com os códigos fontes apresentados podem ser facilmente modificados para a implementação de novas abordagens ou novos parâmetros físicos, como a introdução de um termo de força externa, por exemplo.

## 5 Parte I - Análise Hidrodinâmica de Sistemas Bidimensionais Obstruídos

### 5.1 Objetivos

Esta parte do trabalho teve como objetivo estudar duas geometrias distintas: a primeira um círculo no centro e outra um semicírculo na parte inferior. O intuito será avaliar como um sistema obstruído por essas geometrias, que são uma tentativa de simplificação da geometria real de um êmbolo e trombo, respectivamente, alteram os parâmetros hidrodinâmicos.

### 5.2 Metodologia

O método de rede de Boltzmann (LBM), introduzido na Seção 4.2, foi utilizado com o intuito de simular fluxos em ductos bidimensionais. Para isso, foi empregado o modelo bidimensional com nove velocidades discretizadas (D2Q9), a fim de simular um escoamento entre duas placas paralelas, que simbolizam as paredes dos vasos sanguíneos. Entre essas duas placas, foram conduzidas simulações com um círculo no centro e com meio círculo na parte inferior do sistema, de forma a analisar como a vazão é afetada em decorrência da obstrução e em alguns casos a diferença de pressão. A influência da variação dos parâmetros hidrodinâmicos e geométricos do sistema foi investigada. Dois tipos principais de escoamentos foram realizados: com diferença de pressão constante e com vazão constante. No primeiro, uma diferença de pressão entre a entrada e a saída do canal é mantida fixa. Já no segundo, a velocidade na entrada do sistema é mantida fixa mantendo assim a vazão constante.

Os parâmetros dos sistemas usados, neste capítulo e nos próximos, com índices contendo a palavra "físico",  $M_{físico}$  e  $N_{físico}$ , por exemplo, correspondem com variáveis físicas e foram selecionados de modo a simular principalmente os vasos das arteríolas de tal forma que os sistemas simulados e reais apresentem números de Reynolds bem próximos (lei da similaridade Seção 2.4). Já os parâmetros sem um índice contendo a palavra "físico", serão parâmetros adimensionais da rede,  $M$  e  $N$ , por exemplo. Os parâmetros adimensionais são muito utilizados no LBM e são inerentes ao método [3], de tal forma que parâmetros característicos do sistema são utilizados no processo para tornar tal grandeza adimensional.

Em todas as simulações, as condições de não deslizamentos (em cima das placas, do círculo e semicírculo) foram obtidas através do Bounce-Back (BB), introduzido na Seção 4.1.5 e as condições com velocidade ou densidade/pressão conhecidas, introduzidas na Seção 4.1.6, foram utilizadas para definir a velocidade ou a densidade/pressão em locais da rede (na entrada ou saída a depender da simulação). O regime estacionário foi também, em todas as simulações, alcançado, ou seja, a simulação terminou quando os campos não variavam mais com o tempo (com exceção dos escoamentos oscilatórios que terminaram depois de um número suficientemente grande de iterações). A vazão também foi calculada utilizando-se a Equação (2.33) para o caso bidimensional e de modo que a integral é substituída por uma soma, ou seja,

$$q = \sum_{y=0}^M u_x(x_0, y), \quad (5.1)$$

onde  $q$  é a vazão por unidade de comprimento e  $x_0$  é a coordenada  $x$  em que a vazão é calculada, notando-se que, pela conservação da massa (Equação 2.3 na forma integral), a vazão deve ser a mesma em todas as seções transversais do sistema. Como a densidade de massa  $\rho_0$  introduzida nas simulações é igual a um, a vazão volumétrica e massiva são bem próximas. A curva ajustada nos gráficos de vazão pelo espaço livre em todo o trabalho é a seguinte curva:

$$f_1(L) = A_1 D_1 \ln \left[ \frac{1 + e^{(L-C_1)/D_1}}{1 + e^{-C_1/D_1}} \right], \quad (5.2)$$

onde  $C_1$  será o ponto crítico encontrado e  $L$  a porcentagem de espaço livre que o fluido tem para escoar. Tal curva é a integral da equação sigmoideal de Boltzmann, que resulta em uma função que, em seus limites são funções lineares com inclinações dadas por  $a_1$  e  $a_2$ . No caso deste trabalho, usou-se  $a_1 = 0$  (reta com inclinação nula para valores de  $L \ll C_1$ ) e  $a_2 = A_1$  (reta com inclinação igual a  $A_1$  para valores de  $L \gg C_1$ ). O termo  $D_1$  é um termo de transição dos dois regimes. A função é usada para o ajuste de curvas de condutividade elétrica e tensão interfacial de surfactantes em função de sua concentração, para a determinação do ponto de micelização  $C_1$  [30, 31]. Em determinados casos um espelhamento desta curva será usado para encontrar um segundo ponto crítico, ou seja,

$$f_2(L) = q_0 - A_2 D_2 \ln \left[ \frac{1 + e^{((M-L)-C_2)/D_2}}{1 + e^{-C_2/D_2}} \right], \quad (5.3)$$

onde  $q_0$  é a vazão para  $R = 0$ ,  $C_2$  o outro ponto crítico e  $M$  a altura do canal.

Nas simulações com os maiores números de Reynolds, vórtices surgem na parte de trás do círculo e a área dos vórtices foi estimada utilizando-se o software comercial ImageJ. Já a vorticidade total do sistema foi calculada usando-se a versão discretizada das Equações 2.31 e 2.32.

Para realizar as simulações um código foi escrito utilizando a linguagem de programação C++ junto com algumas bibliotecas gráficas para a visualização dos escoamentos, como o OpenGL, por exemplo. Demais bibliotecas em Python e em C++ foram utilizadas para o tratamento dos dados. O C++ foi escolhido por ser uma linguagem de alto desempenho, compilada e ao mesmo tempo suportar diversas técnicas modernas, como a programação orientada a objetos e genérica mantendo a eficiência e controle de baixo nível de linguagens como C e Fortran.

### 5.2.1 Círculo no Centro, $|\Delta p|$ Constante e Baixos Números de Reynolds

Aqui foram realizadas duas levas de simulações. Na primeira, a viscosidade cinemática  $\nu$  foi variada, enquanto a diferença de pressão  $|\Delta p|$  foi mantida fixa (Tabela 5.2.2). Já na segunda, variou-se a diferença de pressão, mantendo fixa a viscosidade cinemática (Tabela 5.2.3). Para cada parâmetro variado, foram simulados diversos raios  $R$  e estão descritos na Tabela 5.2.1. Os demais parâmetros mantidos fixos em todas as levas de simulações, onde  $M$  é distância entre as

placas,  $N$  a largura e  $\rho_0$  a densidade inicial, podem ser encontrados na mesma tabela.

Os sistemas simulados estão representados na Figura 5.1. Foram utilizadas as condições de não deslizamento em cima das placas, ou seja,  $\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}(x, M) = \mathbf{0}$ , e no início e final do canal as condições de contorno de densidade/pressão conhecidas foram incluídas de modo a gerar uma diferença de pressão entre a entrada e saída do canal conforme o ajustado para cada simulação. Tais condições de contorno são baseadas nos casos reais de alguns vasos que, livre de obstruções, seguem o perfil parabólico [15].

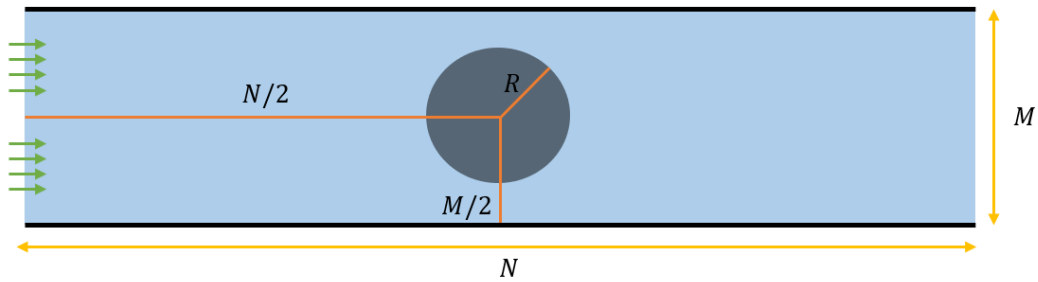


Figura 5.1: Ilustração da geometria do sistema simulado, onde  $N$  é a largura,  $M$  a altura ou distância entre as duas placas e  $R$  é o raio do círculo. O círculo, que simboliza a obstrução do canal, está nas coordenadas  $(N/2, M/2)$ . As setas com coloração verde indicam o sentido do fluxo de modo que o fluido entra pela esquerda do canal e sai pela direita.

Parâmetro	Valor
$M$	50
$M_{físico}$	30 $\mu$ m
$N$	250
$N_{físico}$	150 $\mu$ m
$\rho_0$	1
$\rho_{0físico}$	1060(kg/m <sup>3</sup> ) (densidade do sangue)
$R$	0, 2, 3, 5, 8, 10, 13, 15, 18, 20, 22 ou 23

Tabela 5.2.1: Parâmetros fixos em todas as levas de simulações e os mesmos foram escolhidos próximos dos valores de referência para as arteríolas [29, 15]. Onde  $M$  é a altura ou a distância entre as placas,  $N$  é a largura,  $\rho_0$  a densidade inicial,  $R$  o raio do círculo e  $\rho_{0físico}$  é a densidade do sangue.

$\nu$	$\nu_{físico}$ (m <sup>2</sup> /s)	$Re = \frac{Mu_{máx}}{\nu}$ (canal vazio)
0,108	$2,40 \times 10^{-6}$	0,354
0,122	$2,70 \times 10^{-6}$	0,280
0,136	$3,00 \times 10^{-6}$	0,226
0,149	$3,30 \times 10^{-6}$	0,187
0,163	$3,60 \times 10^{-6}$	0,157

Tabela 5.2.2: Tabela com os parâmetros variados para a primeira leva de simulações para  $|\Delta p| = 6,67 \times 10^{-5}$  ou  $|\Delta p_{físico}| = 96,0$  Pa fixos. Os valores de viscosidade foram selecionados para obter valores próximos aos números de Reynolds encontrados em alguns sistemas de arteríolas, ou seja, valores entre  $Re = 0,1$  e  $Re = 1$  [29, 15].

$ \Delta p $	$ \Delta p_{físico} $ (Pa)	$Re = \frac{Mu_{máx}}{\nu}$ (canal vazio)
$5,28 \times 10^{-5}$	76,0	0,179
$5,97 \times 10^{-5}$	86,0	0,203
$6,67 \times 10^{-5}$	96,0	0,226
$7,36 \times 10^{-5}$	106	0,250
$8,05 \times 10^{-5}$	116	0,274

Tabela 5.2.3: Tabela com os parâmetros variados para a segunda leva de simulações para a viscosidade  $\nu = 0,136$  e  $\nu_{físico} = 3,00 \times 10^{-6}$  (m<sup>2</sup>/s) fixos, sendo o parâmetro físico equivalente a três vezes a viscosidade cinemática da água. Os valores de diferença de pressão foram selecionados para obter valores próximos aos números de Reynolds encontrados em alguns sistemas de arteríolas, ou seja, valores entre  $Re = 0,1$  e  $Re = 1$  [29, 15].

## 5.2.2 Círculo no Centro, $|\Delta p|$ Constante e Números de Reynolds Variados

As simulações realizadas aqui são similares às da anterior, porém números de Reynolds diferentes foram incluídos, mantendo-se a geometria do sistema apresentado anteriormente na Figura 5.1. Porém os parâmetros mantidos fixos em todas as simulações agora podem ser consultados na Tabela 5.2.4. Os raios em cada uma das levas de simulações também foram os mesmos da seção anterior e os parâmetros que foram variados estão apresentados na Tabela 5.2.5.

Parâmetro	Valor
$M$	50
$N$	250
$\rho_0$	1
$\rho_{0físico}$	1060(kg/m <sup>3</sup> )
$R$	0, 2, 3, 5, 8, 10, 13, 15, 18, 20, 22 ou 23
$ \Delta p $	$6,67 \times 10^{-5}$
$ \Delta p_{físico} $	96,0Pa
$\nu_{físico}$	$3,00 \times 10^{-6}$ (m <sup>2</sup> /s)

Tabela 5.2.4: Parâmetros fixos em todas as levas de simulações.

$M_{físico}$ ( $\mu\text{m}$ )	$N_{físico}$ ( $\mu\text{m}$ )	$\nu$	$Re = \frac{Mu_{máx}}{\nu}$ (canal vazio)
30	$5M_{físico}$	0,136	0,226
130	$5M_{físico}$	0,0313	4,25
650	$5M_{físico}$	0,00626	105
1000	$5M_{físico}$	0,00407	237
1300	$5M_{físico}$	0,00313	376

Tabela 5.2.5: Valores que foram mudadas em cada leva de simulações, ou seja, para cada número de Reynolds diferente.

### 5.2.3 Círculo no Centro, Vazão Constante e Números de Reynolds Variados

Para manter a vazão constante é necessário definir uma velocidade no início do sistema (em  $x = 0$ ). Então uma parábola com máximo  $u_0$  utilizando-se a Equação 2.29 será introduzida na entrada do canal. A pressão será constante no final do sistema (afinal, uma condição de contorno deve ser aplicada neste local), e as ideias previamente estabelecidas na Seção 4.1.6 serão novamente utilizadas, onde as geometrias dos sistemas foram mantidas as mesmas das seções previamente discutidas dos casos com um círculo no centro. Apenas a simulação com  $R = 23$  foi excluído por motivos de instabilidade na execução da simulação, devido à discretização estabelecida no LBM. Os parâmetros que foram mantidos fixos são descritos na Tabela 5.2.6 e que variam na 5.2.7. Tais parâmetros foram escolhidos de tal forma que os sistemas, para o caso em que a vazão é constante, sejam análogos aos sistemas previamente simulados para o canal vazio e o número de Reynolds próximo ao encontrado em sistemas biológicos de vasos sanguíneos (como já discutido previamente).

Parâmetro	Valor
$M$	50
$N$	250
$\rho_0$	1
$\rho_{0físico}$	1060(kg/m <sup>3</sup> )
$R$	0, 2, 3, 5, 8, 10, 13, 15, 18, 20 ou 22
$\nu_{físico}$	$3,00 \times 10^{-6}$ (m <sup>2</sup> /s)

Tabela 5.2.6: Parâmetros fixos em todos as levadas de simulações.

$M_{físico}$ ( $\mu\text{m}$ )	$N_{físico}$ ( $\mu\text{m}$ )	$u_0$	$u_{0físico}$ (m/s)	$\nu$	$Re = \frac{Mu_{máx}}{\nu}$ (canal vazio)
30	$5M_{físico}$	0,000614	0,0226	0,136	0,226
130	$5M_{físico}$	0,00266	0,0981	0,0313	4,25
650	$5M_{físico}$	0,0131	0,485	0,00626	105
1000	$5M_{físico}$	0,0193	0,712	0,00407	237
1300	$5M_{físico}$	0,0236	0,869	0,00313	376

Tabela 5.2.7: Valores que foram mudadas em cada leva de simulações, ou seja, para cada número de Reynolds diferente.

#### 5.2.4 Semicírculo na Parte Inferior, $|\Delta p|$ Constante e Números de Reynolds Variados

A geometria seguinte que foi simulada consistiu em um semi-círculo localizado na parte inferior do plano na tentativa de simular uma obstrução que se aproxima de um coágulo ou trombo, como mostrada na Figura 5.2.

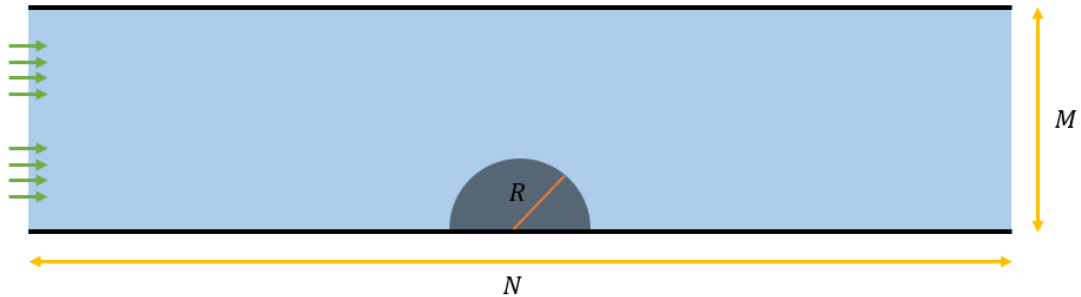


Figura 5.2: Ilustração da geometria do sistema, tal que o círculo se encontra na posição  $(N/2, 0)$ . As setas verdes no início do canal indicam o sentido do fluxo.

Os raios para estes sistemas agora foram:  $R = 0, 2, 3, 5, 8, 10, 13, 15, 18, 20, 22, 23, 24, 28, 30, 33, 35, 38, 40, 43, 45$  e  $48$ . Os parâmetros fixos em todas as levas foram os mesmos da Tabela 5.2.4, com exceção dos raios que nesse caso são diferentes dos apresentados na tabela, e os parâmetros variados são os da 5.2.5.

#### 5.2.5 Semicírculo na Parte Inferior, Vazão Constante e Números de Reynolds Variados

Para este último caso, a geometria simulada foi a abordada na Figura 5.2 e os raios mantidos os mesmos das simulações anteriores que utilizaram um semi-círculo, com exceção do raio  $48$ , que foi removido por motivos de instabilidade da simulação. Os parâmetros mantidos fixos são os mesmos da Tabela 5.2.6, com exceção dos raios que nesse caso são diferentes dos apresentados na tabela. E os parâmetros variados são dados na Tabela 5.2.7.

### 5.3 Resultados e discussões

Baseando-se na metodologia previamente discutida, serão apresentados aqui os resultados das simulações realizadas para as diferentes geometrias e escoamentos. Primeiro, o círculo no centro, com uma diferença de pressão constante entre a entrada e a saída do canal  $|\Delta p|$  e para baixos números de Reynolds (canal vazio). Depois o mesmo círculo no centro com uma diferença de pressão constante, porém agora com números de Reynolds variados. E para finalizar o círculo no centro, a vazão constante será introduzida também para números de Reynolds variados. Então o semicírculo na parte inferior será abordado também para os dois casos: diferença de pressão e vazão constantes para números de Reynolds variados.

#### 5.3.1 Círculo no Centro, $|\Delta p|$ Constante e Baixos Números de Reynolds

O perfil de escoamento para o caso em que  $\nu = 0,136$  e para cinco valores de raios pode ser observado na Figura 5.3. Os demais perfis são análogos. Nota-se também que as condições de não deslizamento são satisfeitas em cima das placas e no círculo central que é evidenciado com a coloração azulada nas figuras. Como pode ser visto também, acontece um estreitamento do local onde o fluido tem para passar na região próxima ao círculo. Com isso, para que a vazão seja mantida constante em toda seção transversal do sistema a velocidade do fluido aumenta naquela região, que é indicado na figura pela coloração amarelada nas regiões de estreitamento.

Para a primeira leva de simulações ( $\nu$  variado e  $|\Delta p|$  constante), a vazão  $q$  em função da porcentagem de espaço livre  $L$ , ou seja, a porcentagem de espaço que o fluido tem para passar, foi analisada, como pode ser visto na Figura 5.4a. Cada ponto de cada curva está relacionado com um dos raios simulados, tal que para  $L = 100$ , tem-se  $R = 0$ , ou seja, o canal vazio e para  $L = 0$ , tem-se obstrução total. No gráfico é possível notar que à medida que a viscosidade diminui e, portanto, a resistência ao cisalhamento no fluido, a vazão aumenta como esperado.

Normalizando as curvas da Figura 5.4a pela multiplicação da vazão pela viscosidade cinemática obtém-se a Figura 5.4b. Nota-se que as curvas se coincidem indicando que a dependência linear da vazão pela viscosidade é mantida. A mesma análise foi feita para a segunda leva de simulações onde a viscosidade cinemática foi fixada e variou-se a diferença de pressão (ver Figuras 5.5a e 5.5b). Porém, neste caso, a dependência da vazão é com o inverso da diferença de pressão e a normalização é feita dividindo esses dois parâmetros.

Com todos esses conceitos em mente, ou seja, como o comportamento das curvas para os casos simulados (baixos números de Reynolds) é o mesmo, então pode-se escolher uma das curvas a fim de trazer uma análise mais aprofundada do comportamento da vazão, e para isso, tem-se a Figura 5.6. A primeira coisa a se notar na mesma é que a vazão para o caso do canal vazio, ou seja, para  $L = 100$ , coincide muito bem com o valor teórico previsto, que foi calculado utilizando-se a Equação (2.34) e que está representado pela curva tracejada em vermelho. Outra coisa importante a se notar é que existe uma mudança de regime da vazão à medida que a porcentagem de espaço livre vai diminuindo, indo de um regime linear para o totalmente obstruído ( $q = 0$ ) e tal mudança é caracterizada por um ponto denominado "crítico" que foi encontrado com o auxílio da curva ajustada em azul (e o ponto crítico está descrito pela curva

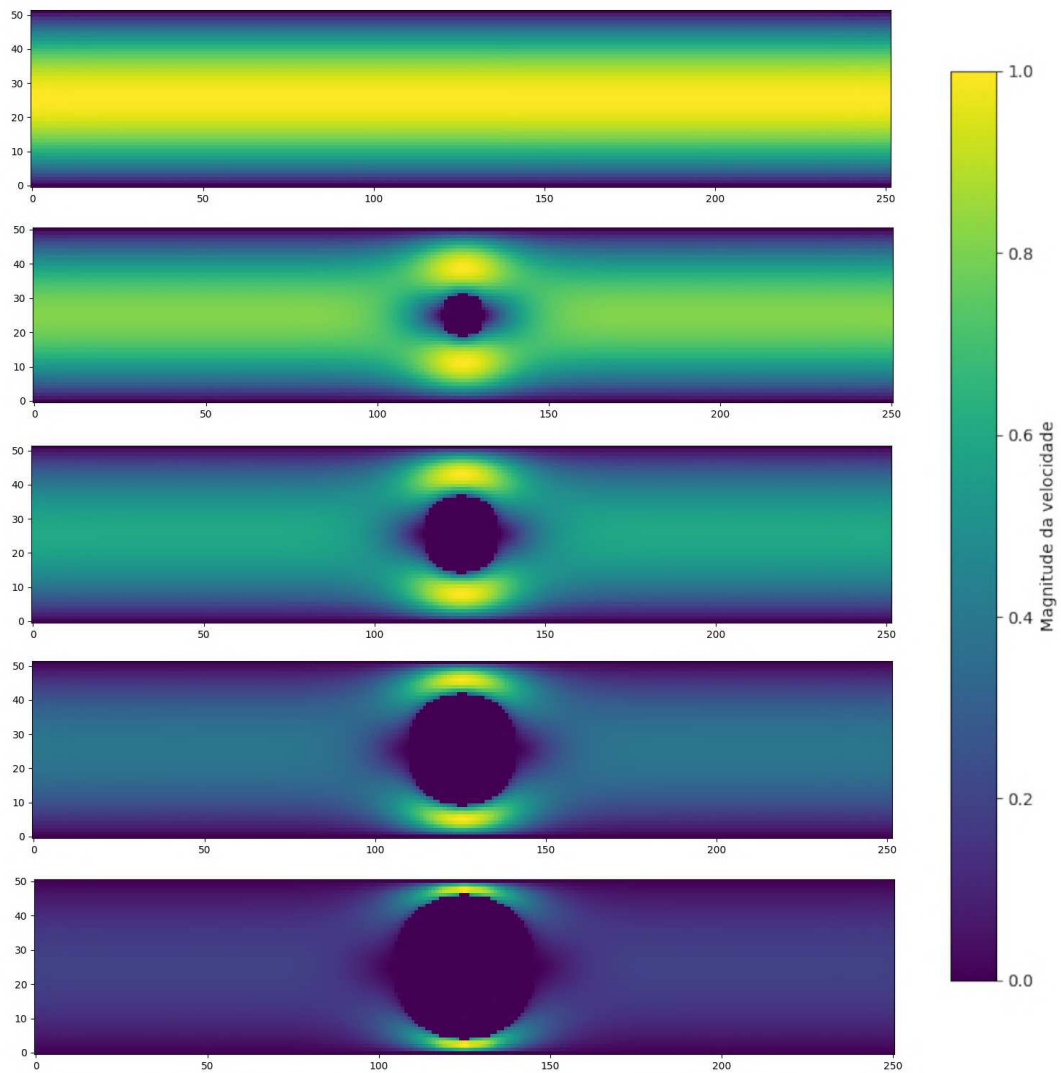


Figura 5.3: Perfis de escoamento para o caso em que  $\nu = 0,136$  para cinco raios diferentes (0, 5, 10, 15 e 20). Como pode ser notado, nos três casos a condição de não deslizamento é satisfeita em cima das placas e no objeto sólido. A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de  $|u|$ .

tracejada em coloração marrom). Tal ponto crítico encontrado corresponde ao espaço livre de 32,7% e uma obstrução de 67,3%. Outra coisa importante a se notar é que a vazão, ao se diminuir a obstrução ( $L$  próximo de 100), leva a um aumento abrupto da vazão. Tal comportamento se deve ao fato da condição de não deslizamento que perturba consideravelmente a vazão do fluido ao ser colocado um círculo no centro do sistema. Essa condição cria um ponto de velocidade nula no centro do sistema e o resultado é uma redução importante da vazão, não importando o quão pequeno seja o raio. Tal efeito não acontece se o círculo é posicionado junto às paredes do canal, como será mostrado na seção seguinte.

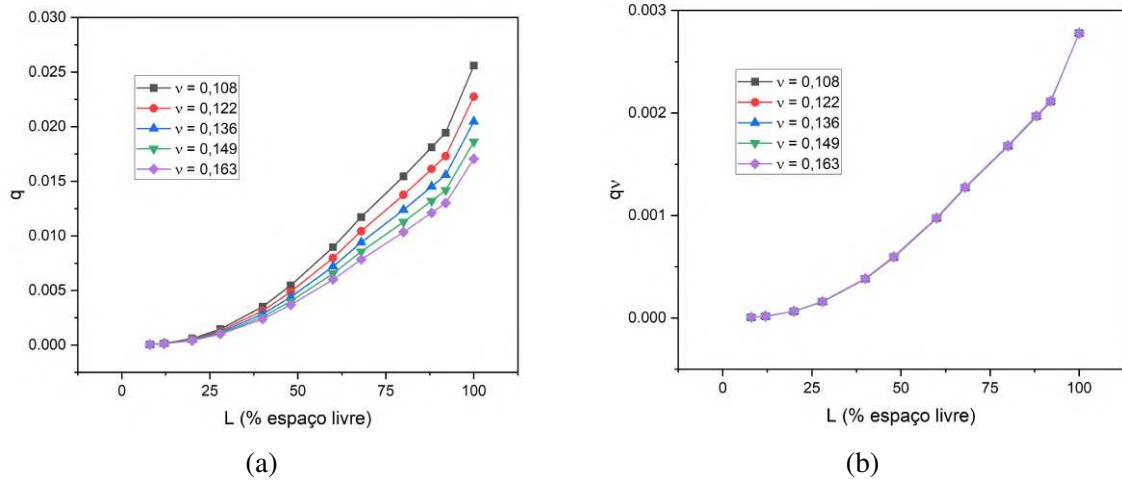


Figura 5.4: Gráfico da vazão  $q$  pelo espaço livre  $L$  de modo que cada curva representa uma viscosidade diferente. (a) Sem normalização. (b) Curvas normalizadas pela viscosidade, ou seja, multiplica-se as cada curva pelo  $\nu$  correspondente. Como pode ser visto as curvas apresentam o mesmo comportamento para todas as diferentes viscosidades.

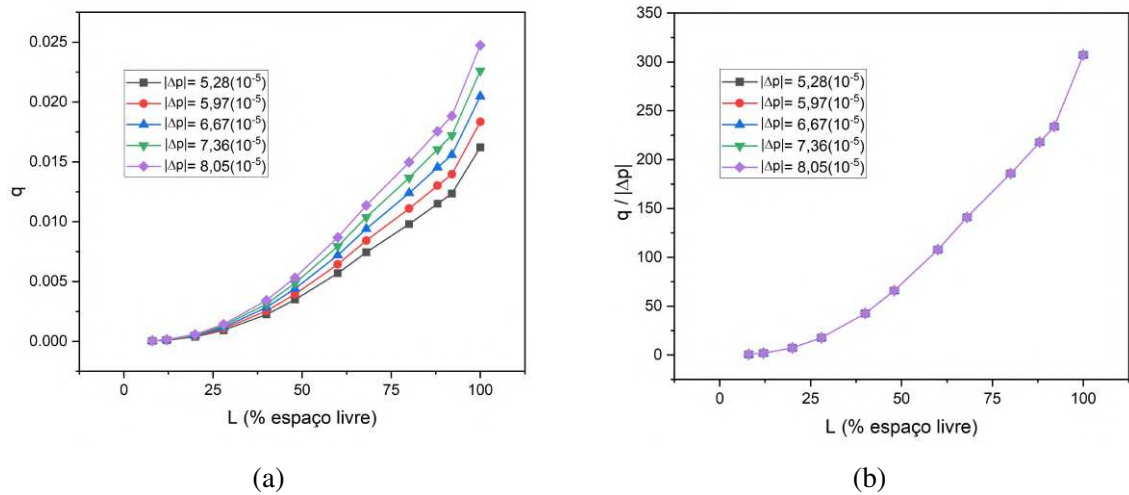


Figura 5.5: Gráficos da vazão  $q$  pelo espaço livre  $L$  de modo que cada curva representa uma diferença de pressão distinta. (a) Sem normalização. (b) Curvas normalizadas pela diferença de pressão (dividindo-se pelo  $|\Delta p|$  específico de cada curva).

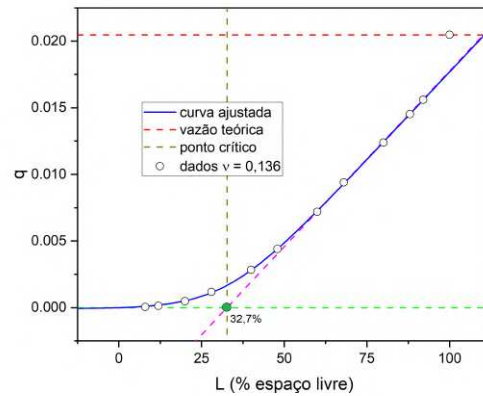


Figura 5.6: Gráfico da vazão  $q$  pelo espaço livre  $L$  que o fluido tem para escoar de forma que uma viscosidade cinemática foi escolhida ( $\nu = 0,136$ ) devido ao fato do comportamento das curvas se coincidirem para os casos simulados quando varia-se a diferença de pressão ou a viscosidade cinemática para baixos números de Reynolds. Os pontos simbolizados por bolas abertas são os dados encontrados nas simulações para cada raio distinto. A curva pontilhada em vermelho, indica a vazão teórica, ou seja, a vazão prevista teoricamente para o canal vazio e a marrom indica o ponto de mudança de comportamento encontrado. A curva em azul é a curva ajustada (Equação (5.2)) que contribuiu para encontrar o ponto de mudança de comportamento.

### 5.3.2 Círculo no Centro, $|\Delta p|$ Constante e Números de Reynolds Variados

O perfil de escoamento para cada viscosidade está representado na Figura 5.7 de modo que em todas as figuras tem-se o mesmo raio ( $R = 10$ ). Se o sistema for dividido em duas metades, sendo a primeira  $x < N/2$  e a segunda  $x > N/2$ , nota-se que, à medida que a viscosidade diminui, ou seja, o número de Reynolds aumenta, a simetria do fluido existente entre as duas metades do sistema é quebrada. Pode ser observado, também, que vórtices surgem atrás do círculo para os casos em que essa simetria é quebrada, ou seja, para  $\nu = 0,00626$ ,  $0,00407$  e  $0,00313$ . Para  $\nu = 0,00626$ , o vórtice não é muito perceptível, porém a simetria também é quebrada para este caso. Os vórtices podem ser evidenciados na direita da Figura 5.7, onde são desenhadas as linhas de fluxo.

A análise da vazão pela porcentagem de espaço livre é feita nas Figuras 5.8a e 5.8b. Na primeira, um mapa de calor foi utilizado para representar o número de Reynolds para todos os sistemas ( $Re = \frac{(M-2R)u_{m\grave{a}x}}{\nu}$ ), de tal forma que quanto mais avermelhado, maior o número de Reynolds será. Já na segunda, tem-se que as curvas apresentadas na primeira figura foram normalizadas pela viscosidade, com isso nota-se um comportamento muito interessante. Para baixos números de Reynolds, ou seja, para as viscosidades  $0,136$  e  $0,0313$ , o comportamento da curva de vazão é praticamente o mesmo para as duas viscosidades (curvas superpostas no gráfico). Já para o restante das viscosidades as curvas não se coincidem quando normalizadas, o que indica a presença de perturbações maiores no sistema, de modo que o termo não linear da equação de Navier-Stokes se torna cada vez mais importante.

Para analisar melhor as situações, foram feitos os procedimentos análogos aos realizados na Figura 5.6 para todas as viscosidades simuladas. A primeira característica a ser observada nas

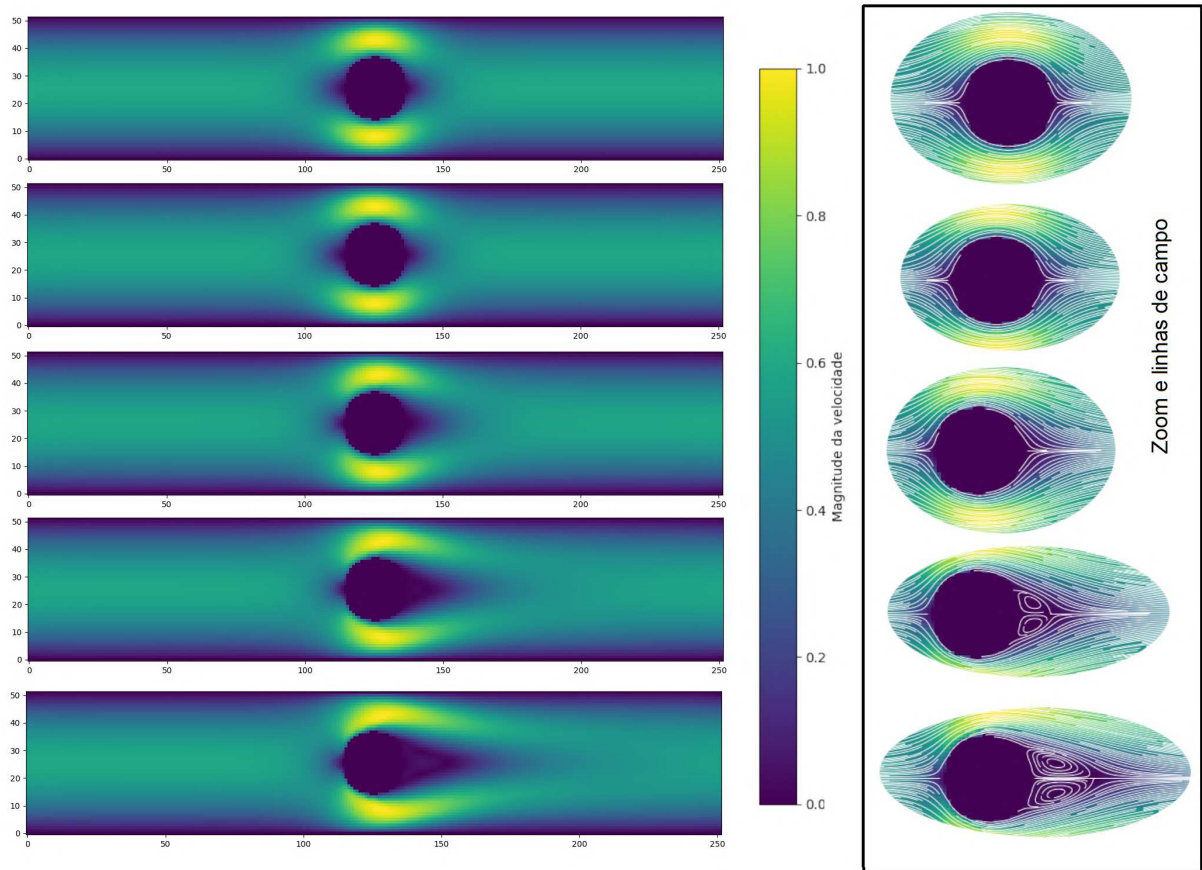


Figura 5.7: Perfil de escoamento para as viscosidades apresentadas na Tabela 5.2.5 em ordem decrescente e para o mesmo raio  $R = 10$ . A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de  $|\mathbf{u}|$ . A caixa no lado direito da imagem é uma ampliação dos arredores do objeto juntamente com as linhas de fluxo. As linhas fluxo representam as possíveis trajetórias que uma tal partícula submersa no fluido poderá ter.

Figuras 5.9a até 5.9e, é que a vazão teórica para o canal vazio calculada pela Equação 2.28 é melhor satisfeita para os dois casos em que o número de Reynolds é baixo, ou seja, para  $\nu = 0,136$  e  $\nu = 0,0313$ , a vazão teórica prevista corresponde perfeitamente com os dados encontrados, como era de se esperar. À medida que a viscosidade diminui ou o número de Reynolds aumenta, o valor encontrado se desvia cada vez mais da previsão teórica demonstrando-se, assim, que os termos não-lineares da Equação 2.4 tornam-se cada vez mais importantes. Uma outra característica a se notar é que, nestes casos, exceto para  $\nu = 0,00313$ , existem dois regimes: o regime linear e o de obstrução total. Para  $\nu = 0,00313$ , surge um terceiro regime linear. Tal transição dos regimes é caracterizada por um ponto denominado crítico e o mesmo coincide para as duas viscosidades mais altas e se diferencia para as mais baixas. Tal ponto foi encontrado com o ajuste dos dados através da curva com coloração azulado nos gráficos. A curva verde no gráfico da viscosidade  $\nu = 0,00313$  é a reta ajustada para o novo regime que surge para este caso.

Uma vez que a diminuição da viscosidade teve, como efeito, tanto desviar o comportamento da vazão com  $L$  quanto o aparecimento de vórtices, tentou-se associar o aparecimento desse novo regime linear para valores altos de  $L$  para  $\nu = 0,00313$  com a vorticidade total do sistema,

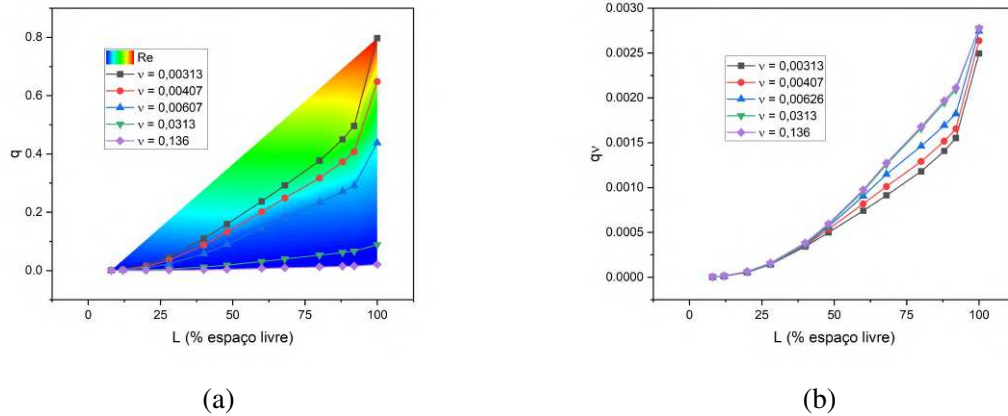
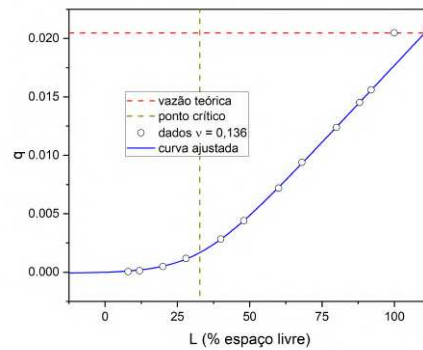
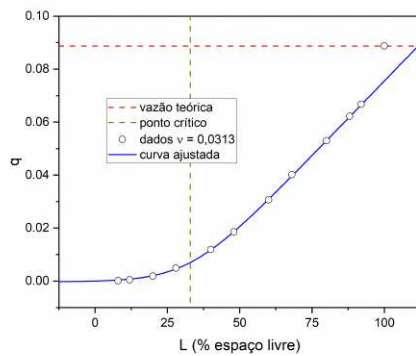


Figura 5.8: (a) Gráfico da vazão  $q$  pelo espaço livre  $L$  que o fluido tem para escoar de todas as viscosidades cinemáticas simuladas. A paleta de cores se refere ao mapa calor do número de Reynolds das simulações. (b) Vazão pela porcentagem de espaço livre normalizado pela viscosidade.

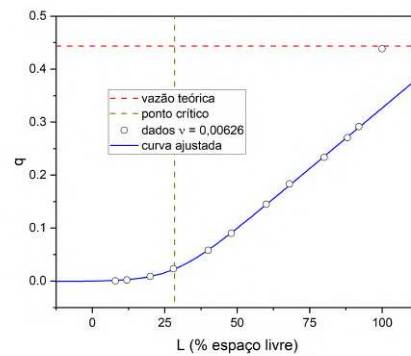
ou seja, a soma da vorticidade em toda a rede (Equação 2.32). Porém, a vorticidade total será zero, pois o sistema é simétrico. Alternativamente, foi calculada a diferença da área do vórtice que surge atrás do círculo pela área do círculo (ver Figura 5.10). Para viscosidades em que existem pontos em que a área do vórtice é maior que a área do círculo, tal quebra de regime é encontrada, ou seja, para  $\nu = 0,00313$  (curva em preto na Figura 5.10), existem pontos acima da reta  $y = 0$ , o que coincide com o fato da curva na Figura 5.9e apresentar o terceiro regime. Nota-se também na Figura 5.10 que para  $\nu = 0,00407$ , existem alguns pontos bem pouco maiores que  $y = 0$ , o que explica o fato da Figura 5.9d ter também quase um terceiro regime linear (deve-se observar o penúltimo ponto próximo a  $L = 100$  na Figura 5.9d). Tais fatos também serão corroborados para os demais sistemas e serão vistos mais adiante para o caso do meio círculo na parte inferior do sistema. Um último ponto a se salientar é que, do mesmo modo que o sistema analisado anteriormente, existe um salto abrupto (último e penúltimo pontos nas Figuras 5.8a até 5.9e) do canal vazio para o levemente obstruído com um círculo de raio 2, o que, novamente, é explicado devido ao fato de que colocar-se um objeto no centro do sistema causam perturbações importantes no fluxo devido à condição de não deslizamento.



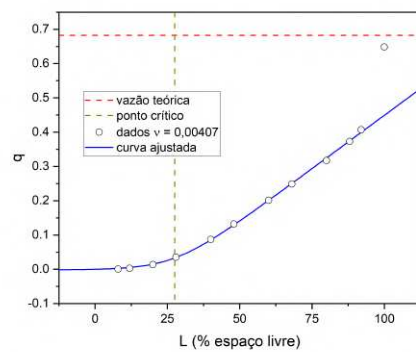
(a)



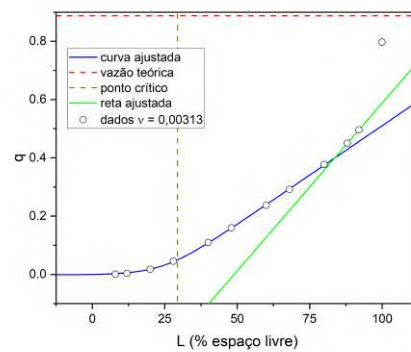
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 5.9: Gráficos da vazão  $q$  pelo espaço livre  $L$  que o fluido tem para escoar. A curva em azul em todos os gráficos são as curvas ajustadas (Equação (5.2)), o ponto tracejado em marrom é o ponto crítico encontrado para cada uma das curvas e o ponto tracejado vermelho a vazão teórica para o canal vazio calculada pela Equação 2.28. (a)  $\nu = 0,136$ . (b)  $\nu = 0,0313$ . (c)  $\nu = 0,00626$ . (d)  $\nu = 0,00407$ . (e)  $\nu = 0,00313$ .

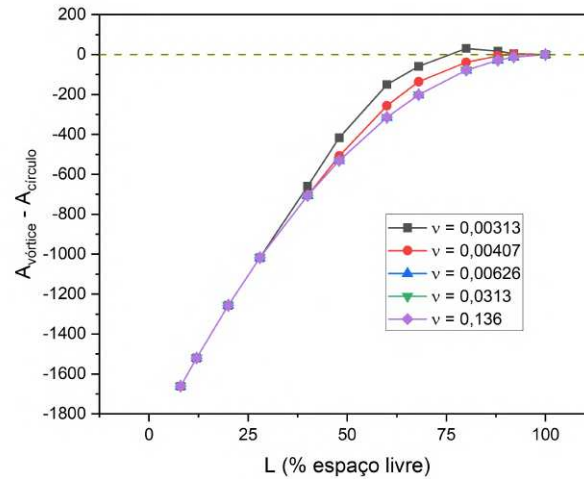


Figura 5.10: Diferença da área dos vórtices pela área do círculo para todos os raios distintos. Cada curva indica uma viscosidade diferente. Nota-se que para o caso em que  $\nu = 0,00313$  existem pontos acima da reta  $y = 0$ , indicando assim a presença de um terceiro regime linear.

### 5.3.3 Círculo no Centro, Vazão Constante e Números de Reynolds Variados

Os perfis de escoamento para este caso podem ser visualizados na Figura 5.11. Nota-se que, diferentemente do caso em que a diferença de pressão entre a entrada e a saída do canal é mantida constante, quando a vazão é fixa a diferença de pressão tem que aumentar à medida que o raio dos círculos aumentam para garantir a mesma vazão que para o caso do canal vazio. Em ordem decrescente da viscosidade as vazões serão: 0,0204, 0,0887, 0,438, 0,644 e 0,785. O escoamento para as mesmas viscosidades, então, se tornam mais perturbados e, para a viscosidade  $\nu = 0,00313$ , o perfil de escoamento se torna oscilatório gerando-se uma dinâmica de vórtices.

Como a vazão é a mesma, foi analisada como a diferença de pressão entre a entrada e a saída do canal muda para cada raio. Em  $\nu = 0,00313$ , como o perfil de escoamento é oscilatório, uma média no tempo foi realizada depois que o padrão oscilatório começou a ser notado. Com isso tem-se as Figuras 5.12a e 5.12b. Na primeira a diferença de pressão é analisada em relação ao espaço livre e uma das primeiras coisas a se notar é que à medida que o sistema vai se tornando cada vez mais obstruído, a diferença de pressão necessária para manter a vazão constante tende ao infinito. Analisando a Figura 5.12b nota-se que a diferença de pressão segue o comportamento de uma lei de potência que é evidenciado pelo fato do gráfico exibir o comportamento linear em escala log-log. Biologicamente a vazão constante seria um caso extremo onde o sistema biológico se altera com o intuito de manter a vazão constante em um determinado tecido, o que reflete a importância do estudo deste caso. Com a obstrução se tornando cada vez mais proeminente, o sistema real necessitaria aumentar a diferença de pressão infinitamente para garantir que os nutrientes cheguem até um determinado tecido, o que seria uma tarefa inviável. Por exemplo, considerando-se o primeiro ( $R = 0$  ou  $L = 100$ ) e último ( $R = 22$  ou  $L = 12$ ) pontos para o caso da viscosidade  $\nu = 0,136$ , tem-se que a diferença de

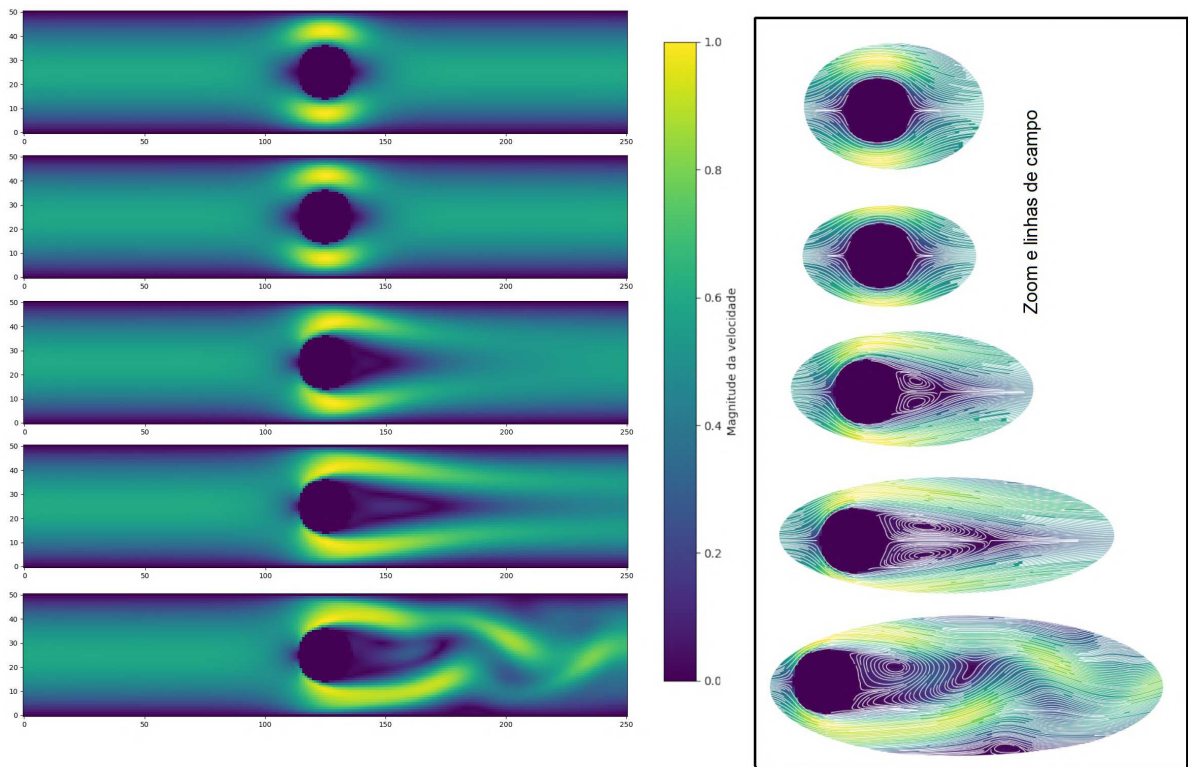


Figura 5.11: Perfil de escoamento para as viscosidades apresentadas na Tabela 5.2.7 em ordem decrescente e para o mesmo raio  $R = 10$ . A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de  $|\mathbf{u}|$ . A caixa no lado direito da imagem é uma ampliação dos arredores do objeto juntamente com as linhas de fluxo.

pressão aumentou-se aproximadamente 160 vezes em relação ao canal vazio, que pode ser algo impraticável biologicamente. Estas análises desta seção podem trazer indícios de que, quando a obstrução, que representa um êmbolo, atinge um determinado tamanho, os mecanismos do organismo que tentam aumentar o fluxo de sangue para um determinado tecido podem não ser suficientes para tal porcentagem de obstrução.

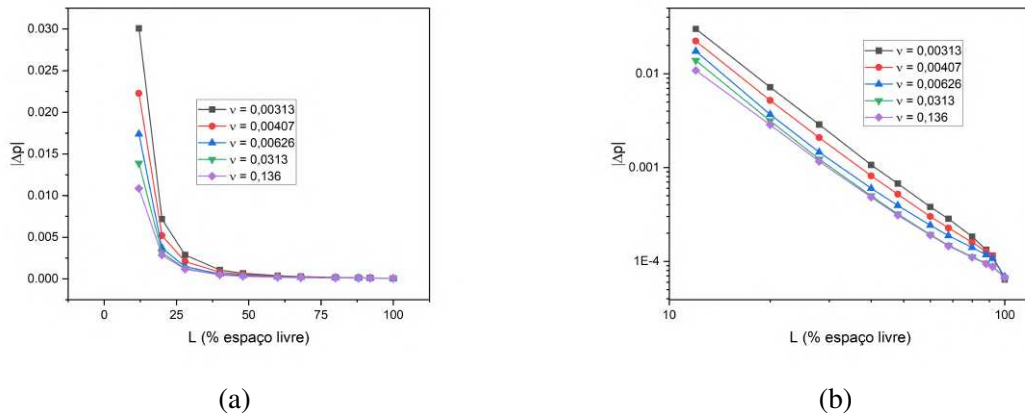


Figura 5.12: Diferença de pressão  $|\Delta p|$  pela porcentagem de espaço livre que o fluido tem para escoar  $L$ . (a) Curvas para as diferentes viscosidades cinemáticas. (b) Curvas em escala logarítmica em ambos os eixos.

### 5.3.4 Semicírculo na Parte Inferior, $|\Delta p|$ Constante e Números de Reynolds Variados

O perfil de escoamento para este caso pode ser visto na Figura 5.13. Uma das primeiras coisas a notar é que, análogo ao caso do círculo no centro do sistema (escoamento com diferença de pressão constante), para baixas viscosidades cinemáticas, ou seja, números de Reynolds maiores, existe uma quebra de simetria do sistema e nota-se a presença de vórtices atrás do círculo, porém neste caso somente um vórtice é formado.

Fazendo-se a mesma análise dos casos anteriores, usando as Figuras 5.14a e 5.14b, encontra-se que para os números de Reynolds mais baixos, ou seja, para as viscosidades cinemáticas  $\nu = 0,136$  e  $\nu = 0,0313$  as curvas de vazão normalizadas coincidem. À medida que o número de Reynolds aumenta (viscosidades diminuem), as curvas se distanciam cada vez mais uma da outra.

Analisando agora as curvas de vazão com a porcentagem de espaço livre (Figuras 5.16a a 5.16e), nota-se também, assim como no caso anterior do círculo no centro (escoamento com diferença de pressão constante), que a vazão teórica calculada para o canal vazio, utilizando-se a Equação 2.34, é satisfeita para as viscosidades mais altas (baixos números de Reynolds). Novamente foi observado a influência dos termos não-lineares da equação de Navier-Stokes que aparece para viscosidades menores.

Uma característica fundamental das simulações tendo o semicírculo localizado no plano inferior, e não no centro, é que a perturbação da vazão a medida que o raio aumento ( $L$  diminui) é gradativa em relação ao fluxo sem obstrução. Com isso pode-se identificar três regimes para as simulação de viscosidade elevada: o de nenhuma obstrução, linear e obstrução total. Com tais mudanças de regime, encontra-se agora dois pontos denominados críticos e para a viscosidade cinemática 0,136 o primeiro ponto ocorre em um espaço livre de 25,0% e uma obstrução de 75,0%. Já o segundo ponto ocorre em um espaço livre de 81,8% e uma obstrução de 18,2%.

Para o caso das viscosidades menores ( $\nu = 0,00407$  e  $\nu = 0,00313$ ), observa-se um regime linear adicional, que também foi identificado na Figura 5.9e da seção anterior em  $L \approx 62$ .

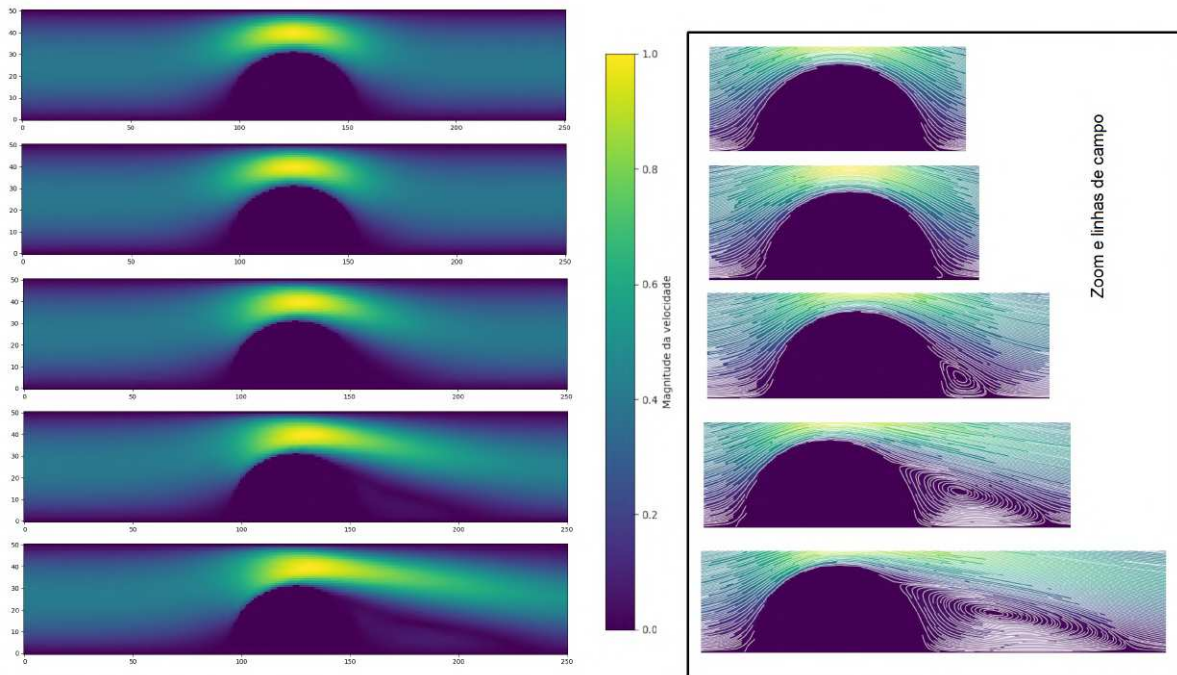


Figura 5.13: Perfil de escoamento para as viscosidades apresentadas na Tabela 5.2.5 em ordem decrescente e para o raio  $R = 30$ . A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de  $|u|$ . A caixa nomeada como zoom e linhas de campo, representa uma ampliação dos arredores do círculo possibilitando uma melhor visão dos vórtices formados.

Então procedendo da mesma forma, ou seja, analisando a área do vórtice menos a área do círculo (Figura 5.15a), vê-se que somente as duas curvas referentes às viscosidades cinemáticas 0,00407 e 0,00313 tem pontos acima de  $y = 0$ , ou seja, somente para essas duas curvas existem pontos em que a área do vórtice é maior do que a área do círculo.

Diferente do caso tratado do círculo no centro do sistema, que o rotacional total é nulo, para o meio círculo na parte inferior do sistema o rotacional total, calculado de forma análoga na Equação 2.32 porém de maneira discretizada, não será nulo e o mesmo pode ser visto na Figura 5.15b. Nota-se que o máximo de vorticidade ocorre justamente nas proximidades de  $L = 62$ , sugerindo que a transição dos regimes lineares está relacionada com efeitos de formação de vórtices no sistema.

Fazendo um apanhado, encontrou-se que a análise da diferença da área do vórtice pela área do círculo mostra se haverá uma quebra no regime linear (existência de pontos acima de  $y = 0$ ) e a análise da vorticidade total sugere em qual ponto  $L$  essa quebra irá acontecer para o caso em que a vorticidade é diferente de zero (pontos de máximo no gráfico da vorticidade total).

Um último, mas não menos importante dado a se notar nas Figuras 5.16a até 5.16e, é que, diferentemente do caso análogo com o círculo no centro, não existe um salto abrupto que acontece nos dois últimos pontos (ver Figuras 5.9a até 5.9e), ocorre algo gradativo e isso se deve ao fato do círculo colocado na parte inferior do sistema não perturba de forma tão significativa quanto ao colocado no centro do sistema.

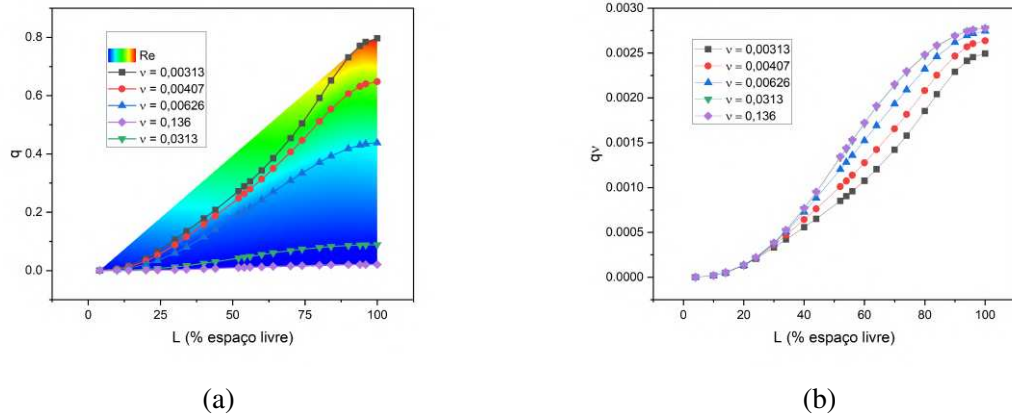


Figura 5.14: Vazão  $q$  pela porcentagem de espaço livre  $L$ . (a) Sem normalizar e com mapa de calor do número de Reynolds. (b) Normalizado pela viscosidade cinemática.

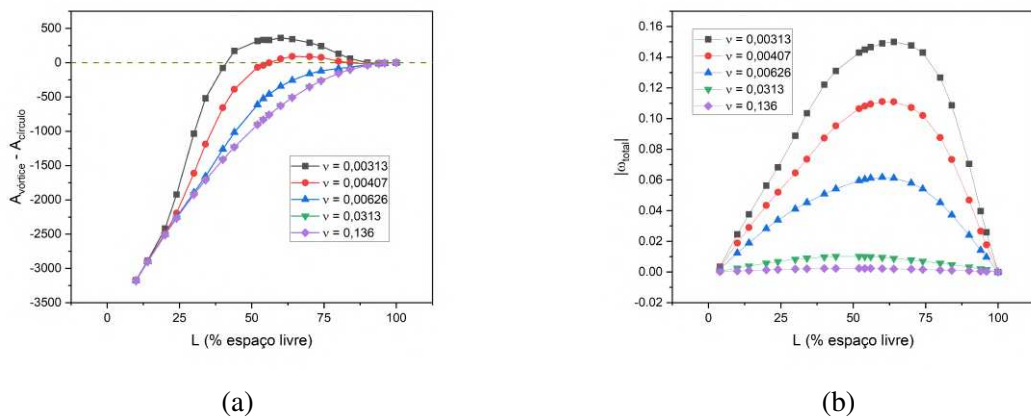
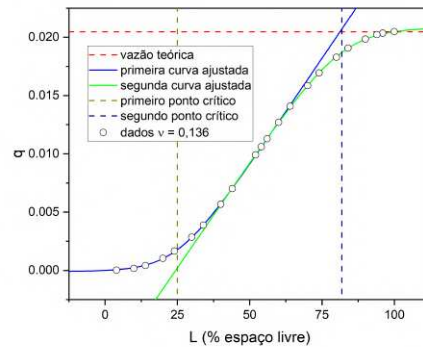
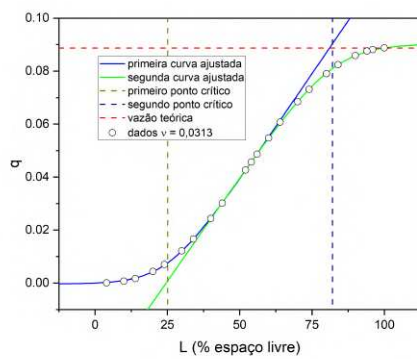


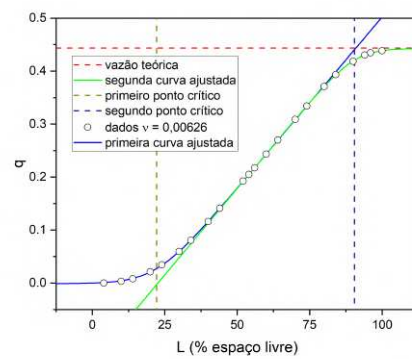
Figura 5.15: (a) Diferença da área do vórtice pela área do círculo de modo que cada curva simboliza uma viscosidade diferente. (b) Módulo da vorticidade total do sistema. Nota-se que os máximos se encontram em  $L$  próximo de 62.



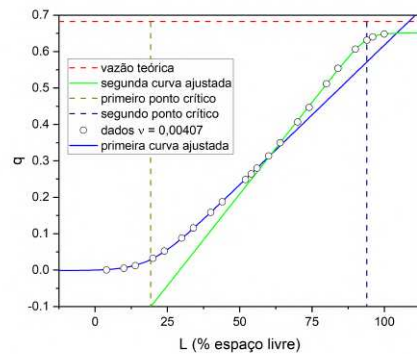
(a)



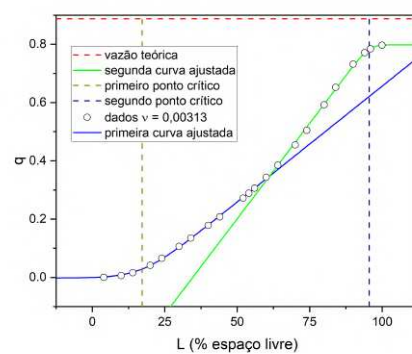
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 5.16: Gráficos da vazão  $q$  pelo espaço livre  $L$  que o fluido tem para escoar. A curva em azul e verde são as curvas ajustadas (Equação (5.2) e (5.3)). As retas diagonais tracejadas são os pontos críticos encontrados usando-se os ajustes e a reta horizontal tracejada em coloração vermelha indica a vazão teórica calculada utilizando-se a solução da equação de Navier-Stokes para o caso do canal vazio. (a)  $\nu = 0,136$ . (b)  $\nu = 0,0313$ . (c)  $\nu = 0,00626$ . (d)  $\nu = 0,00407$ . (e)  $\nu = 0,00313$ .

### 5.3.5 Semicírculo na Parte Inferior, Vazão Constante e Números de Reynolds Variados

O perfil de escoamento é mostrado na Figura 5.17, tal que para  $\nu = 0,00313$  o perfil de escoamento é oscilatório, sendo que em todas as análises que serão feitas, a média no tempo dos valores foi tomada.

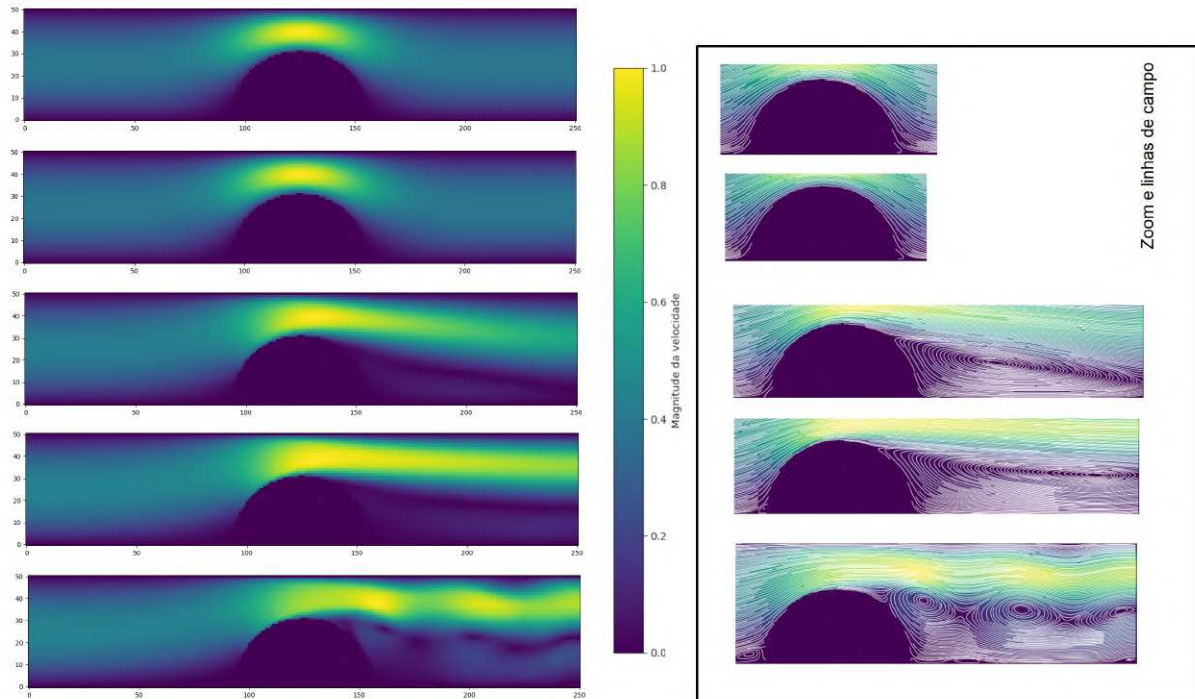


Figura 5.17: Perfil de escoamento para as viscosidades apresentadas na Tabela 5.2.5 em ordem decrescente e para o raio  $R = 30$ . A caixa nomeada como zoom e linhas de campo, representa uma ampliação dos arredores do círculo possibilitando uma melhor visão dos vórtices formados. A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de  $|\mathbf{u}|$ .

Analisando a diferença de pressão entre a entrada e a saída do sistema dada pelas Figuras 5.18a e 5.18b, observa-se na primeira que, assim como no caso do círculo no centro para o mesmo escoamento, quanto mais obstruído o sistema, maior a diferença de pressão deve ser para manter a vazão constante e como pode ser visto na segunda figura, isso acontece também na forma de lei de potência. Para a viscosidade  $\nu = 0,136$ , tem-se que a diferença de pressão aumentou 123 vezes para o máximo de obstrução em comparação com o canal vazio. Se for observado as Figuras 5.12a e 5.12b, nota-se que tanto para o círculo na parte inferior quanto no centro, os resultados são análogos, variando-se somente os valores, porém os comportamentos são bem próximos e conseqüentemente as análises são bem parecidas.

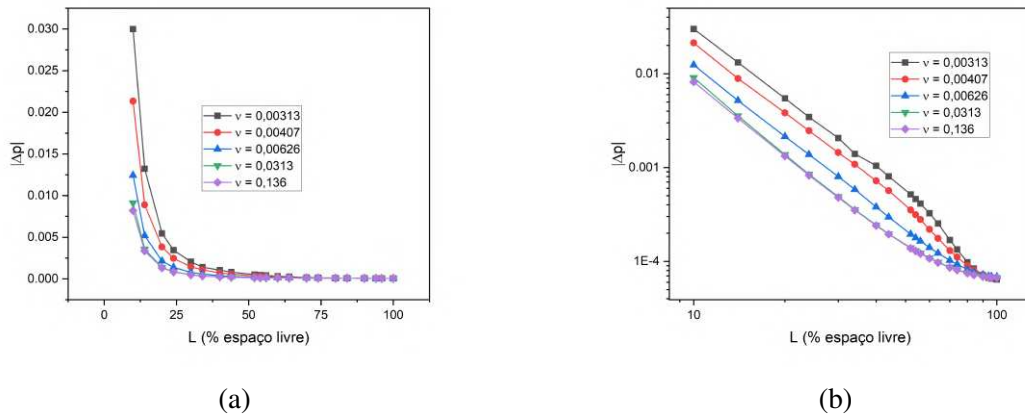


Figura 5.18: Diferença de pressão  $|\Delta p|$  pela porcentagem de espaço livre que o fluido tem para escoar  $L$ . (a) Cada curva indica uma viscosidade cinemática distinta. (b) Curvas em escala logarítmica nos dois eixos.

## 5.4 Conclusões da Parte I

Nessa primeira parte foi simulado o fluxo de um fluido newtoniano em regime laminar em ductos bidimensionais com obstruções parciais. Para o círculo no centro e escoamento com diferença de pressão constante, foi possível identificar uma mudança de regime do linear para o totalmente obstruído, caracterizado por um ponto de mudança em espaço livre de 32,7%. À medida que o número de Reynolds aumentou uma quebra do regime linear foi identificada e a mesma pôde ser relacionada com a diferença da área do vórtice pela área do círculo. Já no semicírculo na parte inferior, resultados análogos foram encontrados, de modo que para números de Reynolds maiores tal quebra do regime linear também foi observada, porém agora como a vorticidade total não é nula, tal quebra pôde ser relacionada com o máximo de vorticidade. Tais resultados são importantes pois dão indícios de quando (qual porcentagem de obstrução) um êmbolo (círculo no centro) e um trombo (semicírculo abaixo) podem mudar o regime da vazão e se tornarem patológicos.

## **6 Parte II - Modelo de Formação de Coágulos**

### **6.1 Objetivos**

O objetivo desta parte do trabalho foi desenvolver um modelo computacional, utilizando o método de rede de Boltzmann, de formação de coágulos que descreva os três estágios de crescimento observados *in vivo* e comparar a geometria obtida pela simulação com os dados experimentais. Como esta parte do trabalho um modelo de formação de coágulos será proposto, uma revisão das descrições dos mecanismos biológicos por trás da formação dos coágulos e sua geometria será feita na seção seguinte. Após, será apresentada a metodologia, o modelo usado e os resultados.

### **6.2 Biologia do Crescimento de Coágulos**

Os processos da formação de coágulos são cada vez mais compreendidos à medida que as técnicas experimentais foram se aperfeiçoando com o tempo. Quando existe uma lesão na parede endotelial de um vaso sanguíneo, um coágulo se forma com o intuito de impedir a perda de sangue naquela região. Os detalhes biológicos mais profundos de tal processo são complicados e podem ser consultados em [12, 13, 14] e não serão abordados aqui com tal grau de detalhamento. Neste capítulo serão apresentados alguns conceitos fundamentais da formação de um coágulo e algumas de suas características.

#### **6.2.1 Coagulação Sanguínea**

Naturalmente na corrente sanguínea, substâncias anticoagulantes predominam sobre as pró-coagulantes assim o sangue não coagula à medida que flui pela circulação. Isso muda quando um vaso é lesionado e substâncias pró-coagulantes da área da lesão são "ativadas", com isso um coágulo é desenvolvido no local. A coagulação é essencial para a sobrevivência humana pois evita a hemorragia quando uma lesão acontece em algum determinado vaso. A coagulação resulta de uma série de reações químicas envolvendo um grupo de enzimas plasmáticas específicas, os fatores de coagulação. Tal discussão apresentada acima, assim como as demais desta parte de coagulação foram uma releitura inteiramente baseada na referência [15].

Quando um vaso é cortado ou rompido, o espasmo vascular acontece, que é um dos mecanismos para evitar a perda de sangue. Depois um tampão de plaquetas é formado no local na tentativa de tampar o buraco no vaso. Por fim, a coagulação acontece e o crescimento de tecido fibroso fecha o vaso permanentemente. Existem alguns modelos de coagulação, dentre eles o modelo clássico se baseia em duas vias: a intrínseca e extrínseca, que convergem para uma via comum. Já o modelo novo propõe algumas fases: iniciação, amplificação e propagação. Aqui será discutido mais detalhadamente somente o modelo clássico pois ele fornece uma base fundamental para entender os principais eventos da coagulação.

O mecanismo de coagulação se baseia em três etapas: é formada o ativador de protrombina

em resposta à ruptura do vaso ou lesão do próprio sangue, a conversão de protrombina em trombina é catalisada pelo ativador de protrombina e por fim a trombina atua como enzima e converte o fibrinogênio em filamentos de fibrina, formando assim o próprio coágulo [15]. Existem dois jeitos de formar o ativador de protrombina, pela via extrínseca e pela intrínseca. A via extrínseca começa com a liberação do fator tecidual que é uma enzima ou mistura de enzimas com ação proteolítica e fosfolípídeos de membrana celular. Depois o fator tecidual se combina com o Fator VII e atua juntamente com os íons cálcio sobre o fator X para formar o fator Xa, ou seja, o fator X ativado. Os fosfolípídeos teciduais junto com o fator Xa, se combinam para formar o ativador de protrombina. Por fim, juntamente com os íons cálcio, a protrombina é clivada para formar a trombina. Já tendo trombinas formadas, o fator V é ativado pela ação proteolítica da mesma, com isso o fator Va passa a ser um acelerador adicional da ativação da protrombina. A via extrínseca pode ser visualizada na Figura 6.1 e os fatores de coagulação na 6.3.

Já a via intrínseca, começa com o trauma ao próprio sangue ou o contato com o colágeno da parede lesionada. Tal esquema da via pode ser visualizada na Figura 6.2 e para um grau de detalhamento o capítulo 36 da referência [15], pode ser consultado.

Por fim, o fibrinogênio será convertido em filamentos de fibrina através da atuação da trombina e como resultado longos filamentos de fibrina serão formados que juntarão os glóbulos vermelhos e o plasma formando assim o próprio coágulo.

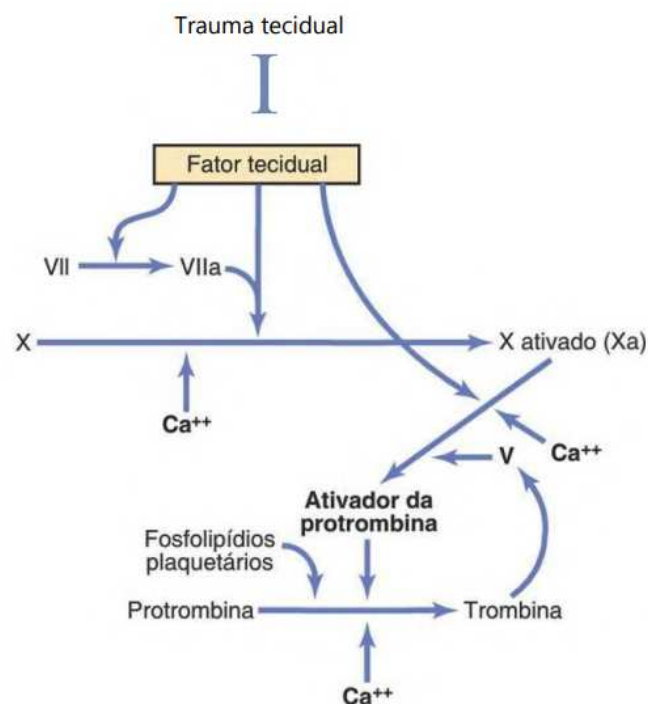


Figura 6.1: Esquema ilustrativo da via extrínseca extraído da referência [15].

### 6.2.2 Geometria do Coágulo

A geometria do coágulo (ver Figura 6.4a e 6.4b) consiste basicamente em duas estruturas: o núcleo e a casca [11, 16]. O núcleo é um pacote denso que contém plaquetas altamente ativadas e

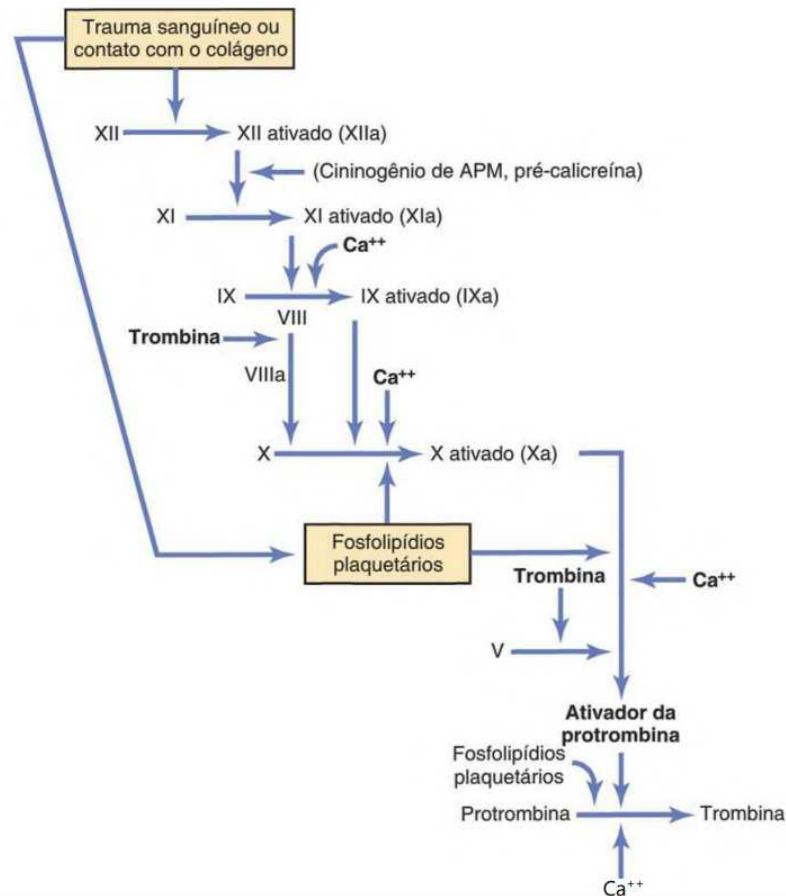


Figura 6.2: Esquema ilustrativo da via intrínseca extraído da referência [15].

está mais próximo do local da lesão. Já na casca as plaquetas estão mais fracamente compactadas e a grande maioria da massa que é perdida pelo coágulo é desprendida dessa região. O núcleo pode ser visto como algo preso à lesão que impede o fluxo sanguíneo selando-a. A referência [11] também destaca a importância de identificar as duas regiões dos coágulos, pois quando são identificadas, o desenvolvimento de drogas e tratamentos podem ser direcionados especificamente para a casca, uma vez que possui maior propensão para se desprender e potencialmente obstruir demais regiões do sistema circulatório.

Utilizando-se a hipótese do comportamento viscoplástico de Bingham [11] (um material que se comporta como sólido rígido com baixos estresses e fluido quando um estresse crítico é alcançado), o coágulo pode ser encarado como sendo composto de partículas discretas presas em um gel e que interagem entre si criando algo parecido com um corpo sólido, sendo necessário a aplicação de um determinado estresse mínimo para quebrar sua estrutura.

Os resultados apresentados na referência [11] sobre a geometria do coágulo foram obtidos a partir de um experimento no músculo cremaster de um rato, onde um coágulo foi induzido por laser. Em seguida, uma imagem bidimensional foi feita por microscopia confocal. Então foi estimada a estrutura tridimensional do coágulo utilizando-se essas imagens.

Fator da Coagulação	Sinônimos
Fibrinogênio	Fator 1
Protrombina	Fator II
Fator tecidual	Fator III; tromboplastina tecidual
Cálcio	Fator IV
Fator V	Pró-acelerina; fator lábil; globulina Ac (Ac-G)
Fator VII	Acelerador da conversão sérica da protrombina (ACSP); pró-convertina; fator estável
Fator VIII	Fator anti-hemofílico (FAH); globulina anti-hemofílica (GAH); fator anti-hemofílico A
Fator IX	Componente da tromboplastina plasmática (CTP); fator Christmas; fator anti-hemofílico B
Fator X	Fator Stuart; fator Stuart-Prower
Fator XI	Antecedente da tromboplastina plasmática (ATP); fator anti-hemofílico C
Fator XII	Fator Hageman
Fator XIII	Fator estabilizador da fibrina
Pré-caliceína	Fator Fletcher
Cininogênio de alto peso molecular	Fator de Fitzgerald, cininogênio de APM (alto peso molecular)
Plaquetas	

Figura 6.3: Fatores de coagulação e seus sinônimos de modo que os mesmos são representados por questões históricas usando-se números romanos. Tal tabela foi extraída da referência [15].

### 6.2.3 Estágios de Formação

Alguns estágios da formação da estrutura de um coágulo são aparentemente comuns em todos os coágulos formados [11]. No primeiro estágio (crescimento uniforme), o tamanho do coágulo cresce devido à deposição plaquetária no local da lesão, de modo que o crescimento vertical supera o horizontal. A causa disso é que o coágulo cresce horizontalmente devido ao fato das plaquetas se aderirem à região lesionada e isso restringe o alongamento horizontal, pois as mesmas não podem se aderir à região não lesionada do endotélio, em condições fisiológicas. O crescimento vertical se torna ilimitado nessa etapa, pois as plaquetas ativadas podem se aderir umas às outras e então as células se acumulam mais rapidamente na vertical do que na horizontal.

No segundo estágio (dobramento) o crescimento na vertical começa a diminuir, pois, à medida que o coágulo cresce ele obstrui cada vez mais o lúmen e é submetido a forças hidrodinâmicas maiores. O crescimento na horizontal permanece não afetado e continua à mesma taxa, pois parte da massa do coágulo começa a ser transferida do topo para a região posterior do coágulo (seguindo o fluxo). O fim desse período se dá quando o coágulo alcança a

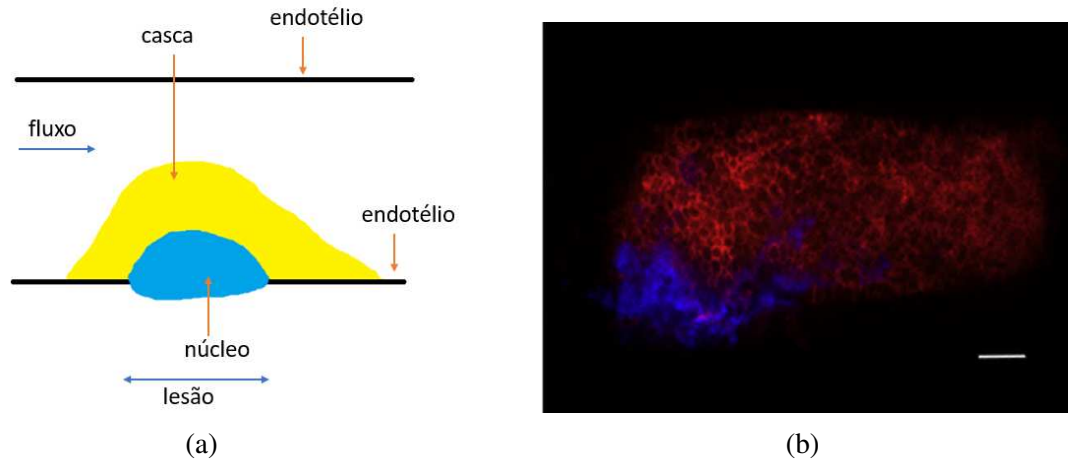


Figura 6.4: (a) Ilustração da estrutura geométrica do coágulo. Em azul encontra-se o local denominado núcleo e em amarelo a casca. (b) Imagem in vivo extraída da referência [11] mostrando os diferentes graus de ativação das plaquetas. Em azul o núcleo do coágulo foi marcado com P-selectina e em vermelho a casca com o marcador anti-CD41. A barra de escala representa  $10\mu\text{m}$ .

sua máxima área.

No terceiro estágio (estabilização estrutural) o tamanho do coágulo começa a diminuir, de modo que a altura diminui e a largura continua crescendo formando uma estrutura alongada e, por fim, o desprendimento dessa massa facilita ainda mais a redução da altura do coágulo [11]. Essa interação entre as forças do fluido e a estrutura do coágulo continua de uma maneira que pode ser identificada como um estado de pseudo-equilíbrio de tal forma que o coágulo lentamente se afina e se alonga até se retrair e selar a lesão.

Todos esses estágios podem ser vistos na Figura 6.5. Estes resultados são uma tentativa da referência [11] de criar uma teoria unificada que se aplique para todos os coágulos formados.

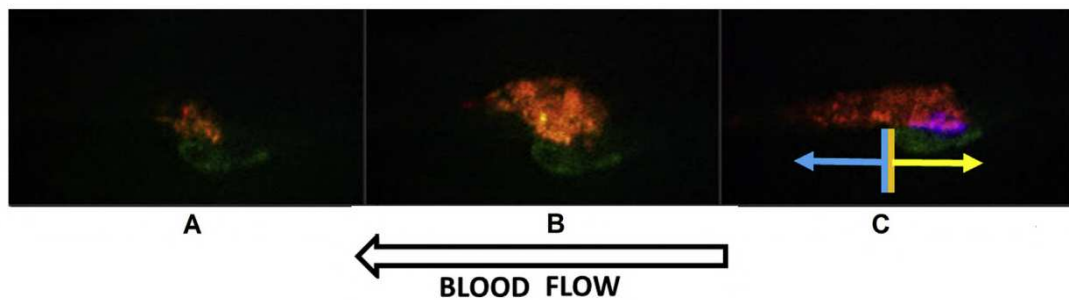


Figura 6.5: Imagem extraída da referência [11], onde em vermelho mostra-se as plaquetas (marcador de plaquetas Anti-CD41), em azul o núcleo (marcador de plaquetas ativadas anti-P-selectina) e em verde a lesão (Albumina Fluorescente). A primeira imagem da esquerda é referente ao primeiro estágio de formação. A do meio ao dobramento e o terceiro ao de estabilização.

#### **6.2.4 A Circulação**

Os tecidos do corpo humano necessitam de nutrição e oxigenação e tal necessidade é suprida pela circulação. Além de carregar os nutrientes necessários, ela também leva hormônios de uma parte do corpo para outra e elimina os produtos do metabolismo. Quando um tecido necessita de um maior fluxo sanguíneo, a intensidade do fluxo é controlada tal que essa necessidade seja suprida. A circulação é dividida em duas: a sistêmica, que é responsável pelo fluxo sanguíneo para todos os tecidos corporais, com exceção do pulmão, e a pulmonar. Cada parte da circulação tem um papel específico. As artérias transportam sangue sob alta pressão para os tecidos de modo que o sangue flui em alta velocidade. Já as arteríolas são pequenos ramos finais do sistema arterial e são os principais reguladores do fluxo sanguíneo para um determinado tecido pois possuem uma parede muscular muito forte e grande resistência ao fluxo sanguíneo, de modo que quando contraídas ou relaxadas podem alterar de centenas até milhares de vezes o fluxo sanguíneo em resposta à sua necessidade por nutrientes. Das arteríolas o sangue é liberado para os capilares, que são os responsáveis pelas trocas de nutrientes, hormônios e demais entes entre o sangue e o líquido intersticial. Para isso, os capilares tem paredes permeáveis à água e pequenas substâncias moleculares. Depois de sair dos capilares o sangue flui para as vênulas e para as veias que conduzem de volta para o coração. As veias também são reservatórios sanguíneos conseguindo desviar parte do sangue para outras partes da circulação [15].

#### **6.2.5 Distensibilidade Vascular**

Com intuito de manter constante o fluxo sanguíneo para os pequenos vasos teciduais, os vasos sanguíneos podem se distender [15]. Através desse processo, a morte das células dos tecidos por falta de nutrientes e oxigenação, em casos onde o fluxo é comprometido, é evitada. Quando uma obstrução ocorre em um determinado vaso, o organismo possui alguns mecanismos para tentar compensar tal diminuição do fluxo sanguíneo, sendo alguns deles: a dilatação de vasos sanguíneos próximos e o aumento local de pressão. Sabendo disso, as tentativas de reproduzir tais sistemas computacionalmente, em que uma obstrução de um vaso acontece, podem ser conduzidas também considerando uma vazão constante no sistema de modo que a diferença de pressão seja livre. O sistema real de uma obstrução acarretada por um coágulo se encontra entre os dois regimes, ou seja, entre o regime de vazão constante e de diferença de pressão constante. Por causa destes fatos ambas as abordagens, ou até mesmo uma abordagem mista, podem ser exploradas nos estudos [11].

## 6.3 Metodologia

Um modelo de formação de um coágulo baseado nos conceitos biológicos introduzidos na Seção 6.2, será apresentado. Para isso, o método de rede de Boltzmann (LBM) foi utilizado para simular a hidrodinâmica de um fluido incompressível e Newtoniano entre duas placas paralelas. Como salientado anteriormente durante a apresentação do método, o mesmo consiste em uma rede discreta contendo sítios, em que cada sítio é definida uma função de distribuição. O modelo utilizado foi o modelo bidimensional com nove velocidades discretizadas (D2Q9). O escoamento foi entre duas placas paralelas e teve o intuito de simular um vaso com tamanho e número de Reynolds característicos de uma arteríola (para o caso em que o vaso esteja livre de obstruções) [29]. Mantendo-se a geometria e o mesmo número de Reynolds dos sistemas reais e simulados, garante-se, assim, que os sistemas concordam entre si.

### 6.3.1 Parâmetros e Condições de Contorno

A geometria do sistema inicialmente começará com uma meia elipse (ver Figura 6.7) com os semi-eixos  $a = 20$  e  $b = \frac{27}{25}a$  (área da elipse baseada na geometria dos coágulos apresentados em [11]). A distância entre as placas foi de  $M = 50$  e  $M_{físico} = 30\mu\text{m}$  e o comprimento do canal de  $N = 5M$  e  $N_{físico} = 5M_{físico}$ . Os outros parâmetros fixos do sistema são:  $\rho_0 = 1$ ,  $\rho_{0_{físico}} = 1060\text{kg/m}^3$ ,  $\nu = 0,136$  e  $\nu_{físico} = 3,00 \times 10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$ . As condições de contorno para a entrada do canal são as com velocidade conhecida e para a saída a pressão é mantida fixa utilizando-se a condição com densidade conhecida. Este sistema sem obstrução, ou seja, o canal vazio, possui número de Reynolds 0,226, sendo bem próximo ao número de Reynolds encontrado em arteríolas [11, 29]. O escoamento é o de Poiseuille, ou seja, para o canal vazio, o campo de velocidades do fluido é parabólico, assim como nos sistemas de tais vasos sanguíneos aqui estudados [15]. Um perfil parabólico de velocidades com o valor central máximo  $u_0 = 0,000614$  e  $u_{0_{físico}} = 0,0226(\text{m/s})$  (ver Equação (2.29)) foi imposta na entrada do canal.

### 6.3.2 O Modelo Proposto

O crescimento do coágulo é simulado pela deposição acima da região inicial ocupado pela elipse, que é o local da lesão, uma camada de partículas sólidas que satisfazem a condição de não deslizamento a cada intervalo  $\Delta t_{depositar}$ . Este depósito tem o intuito de se relacionar com as partículas sanguíneas que são carregadas pelo sangue e se aglomeram nos locais onde ocorre a ativação plaquetária. Usando-se as Equações (2.12) e (A.31), a taxa de cisalhamento  $\dot{\gamma}$  foi calculada em todo o contorno do sólido (isto indica que a posição  $y$  onde  $\dot{\gamma}$  será calculado é diferente para cada  $x$  a depender do contorno do sólido). A evolução do coágulo foi modelado da seguinte forma: caso a tensão de cisalhamento  $\dot{\gamma}(x)$  em um ponto da superfície do coágulo de coordenada  $x$  seja maior que um  $\dot{\gamma}_{corte}(x)$  essa partícula é arrastada para a posição horizontal seguinte e ficando na posição vertical acima da superfície do coágulo nesse ponto.

O perfil escolhido para  $\dot{\gamma}_{corte}(x)$  foi linear, sendo crescente até a posição central do coágulo e decrescente após essa posição (Figura 6.6) com:

$$\dot{\gamma}_{corte}(x) = \begin{cases} \left(\frac{\dot{\gamma}_0}{N/2-x_{f_0}}\right)(x-x_{f_0}), & \text{se } x < \frac{N}{2}, \\ -\left(\frac{\dot{\gamma}_0}{x_f-N/2}\right)(x-x_f), & \text{se } x \geq \frac{N}{2}. \end{cases} \quad (6.1)$$

Para as simulações foi fixado  $x_{f_0} = 105$  e os valores de  $\dot{\gamma}_0 = \dot{\gamma}_{corte}(N/2)$  e  $x_f$  foram variados.

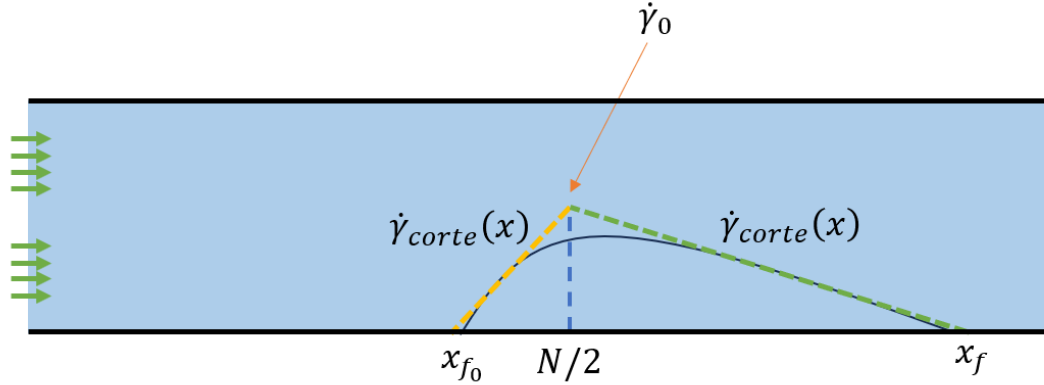


Figura 6.6: Perfil para a função  $\dot{\gamma}_{corte}$  escolhido. Tal perfil contabiliza o fato das partículas mais próximas ao centro (núcleo) do coágulo estarem mais fortemente ligadas.

Foram usados três abordagens para o fluxo durante o crescimento do coágulo: i) diferença entre a entrada e saída do ducto constante; ii) vazão constante; iii) diferença de pressão e vazão variáveis. Nesse último caso o valor da velocidade  $u_0$  é aumentado de um valor constante  $\Delta u_0$  sempre que a diferença de pressão entre a entrada e a saída do canal ultrapassar um determinado valor  $|\Delta p|_{corte}$ . O intuito dessa condição é simular os mecanismos de compensação da vazão que o organismo possui quando o fluxo para um determinado tecido é insuficiente (ver Seção sobre formação de coágulos).

O processo de evolução dos depósitos no coágulo ocorre diversas vezes durante a simulação até que as partículas na superfície sejam arrastadas formando uma cauda na região posterior do coágulo, ou seja, a ideia por trás é tentar simular o dobramento do coágulo causado pelas forças hidrodinâmicas. Um resumo dos passos é apresentado abaixo:

1. Começa-se a simulação com uma elipse de centro  $(N/2, 0)$  e com uma perfil de velocidade parabólico na entrada com máximo  $u_0$ .
2. A cada iteração, para o caso de fluxos com diferença de pressão e vazão variáveis, verifica-se se a diferença de pressão entre a entrada e a saída do canal é maior que um valor de corte  $|\Delta p|_{corte}$ . Se for maior, aumenta  $u_0$  (o máximo da parábola de entrada) para  $u_0 + \Delta u_0$ .
3. Em todo o contorno da superfície sólida (interface fluido-sólido), calcula-se  $\dot{\gamma}$  usando as Equações (2.14) e (4.12) daí verifica-se se  $\dot{\gamma}$  é maior que  $\dot{\gamma}_{corte}$ . Sendo maior, a partícula da região  $(x, y)$  irá para a posição  $(x + 1, y + \Delta y)$ , onde  $\Delta y$  é escolhido o ponto mais próximo da superfície sólida que é um fluido. Caso seja menor, permanece no mesmo local (ver Figura 6.8).

4. Caso o resto da divisão do número de iterações por  $\Delta t_{depositar}$  seja igual a zero, deposita-se acima do contorno sólido e no local da lesão uma camada de partículas sólidas.
5. Volta-se novamente no passo 2.

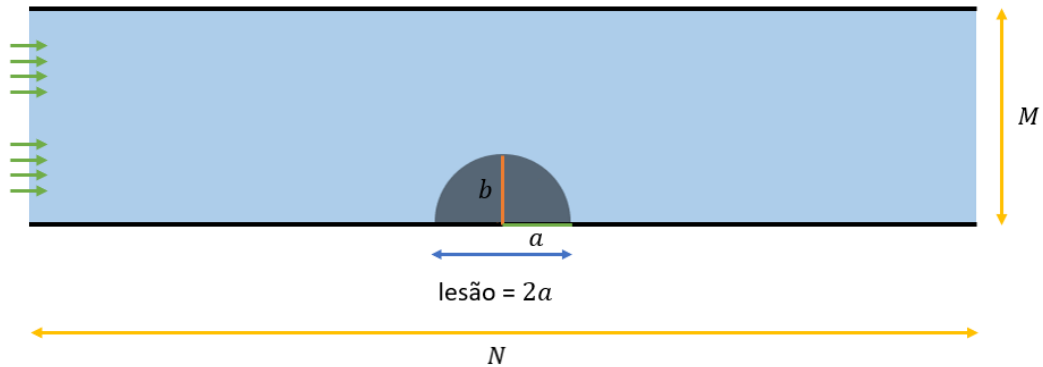


Figura 6.7: Ilustração da geometria do sistema, tal que a elipse se encontra na posição  $(N/2, 0)$ . No início do canal pode ser visualizado algumas setas em coloração verde. Elas indicam o sentido do fluxo. As condições de não deslizamento são satisfeitas em cima das duas placas, ou seja, a velocidade do fluido é zero nas mesmas e nos pontos sólidos.

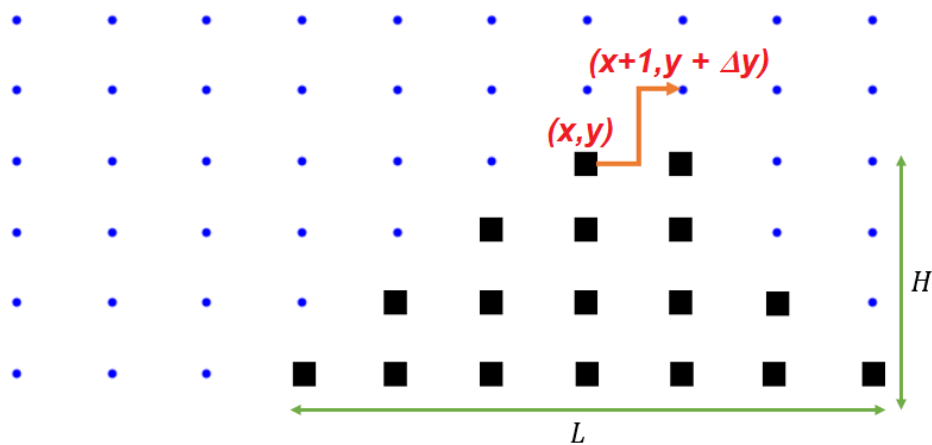


Figura 6.8: Ilustração do processo de arrasto das partículas sólidas no contorno do objeto sólido que obstrui o canal. Os quadrados em preto, indicam os pontos identificados como sólidos, ou seja, satisfazendo as condições de não deslizamento ( $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ ). Os pontos em azul, indicam os locais identificados como um fluido. Se  $\dot{\gamma}$  for maior que  $\dot{\gamma}_{corte}$  (Equações (6.1)) a partícula será arrastada para o próximo vizinho na interface fluido-sólido. O ponto na coordenada  $(x, y)$  que anteriormente era identificado como sólido passa a ser considerado agora como fluido.

## 6.4 Resultados e Discussões

Aqui serão apresentados os resultados das simulações utilizando-se a metodologia proposta na Seção 6.3. Primeiramente alguns parâmetros bases foram fixados para analisar os resultados do modelo, logo em seguida os parâmetros foram variados na tentativa de demonstrar a versatilidade do modelo em descrever a geometria do coágulo.

### 6.4.1 Parâmetros Fixos

O perfil de escoamento para  $\dot{\gamma}_0 = 3,10 \times 10^{-4}$ ,  $x_f = 182$ ,  $|\Delta p|_{corte} = 2,17 \times 10^{-4}$ ,  $\Delta u_0 = 8,50 \times 10^{-8}$  e  $\Delta t_{depositar} = 100$ , está ilustrado na Figura 6.9. Estes parâmetros foram usados como base para as demais simulações em que somente um dos parâmetros foi variado e os demais foram mantidos constantes e as mesmas serão apresentadas no final deste capítulo. Fazendo a análise da área normalizada pela área onde acontece o pico de área  $A/A_{pico}$  pelo tempo normalizado pelo tempo onde esse pico acontece, ou seja,  $t/t_{A(pico)}$ , tem-se pela Figura 6.10b, que os três regimes foram encontrados pelo modelo, ou seja, o primeiro regime onde a área cresce na região da lesão (tempo normalizado entre 0 e 0,5), o segundo regime onde começa a etapa de dobramento (tempo normalizado entre 0,5 e 1) e a estabilização onde a área começa a decrescer aos poucos (tempo normalizado  $> 1$ ). Ainda na Figura 6.10b, a mesma análise pode ser feita para a razão entre a altura e a largura do coágulo  $AR = \frac{H}{L}$  (ver Figura 6.7). Para o primeiro regime, o coágulo cresce estritamente no local da lesão, então a altura aumenta, pois acontece a ativação plaquetária estritamente neste local, com isso a largura do coágulo se restringe e a altura cresce sem parar, então o  $AR$  aumenta até alcançar um pico em 0,5. A partir de 0,5 a etapa de dobramento começa, ou seja, parte da massa do coágulo é arrastada para trás por não resistir às forças hidrodinâmicas, então a largura do coágulo começa a aumentar, com isso o  $AR$  decresce. Por fim, no terceiro estágio o coágulo começa perder massa e conseqüentemente sua altura diminui, como pode ser visto na curva de  $AR$  que muda de regime. Na Figura 6.10b os três regimes discutidos anteriormente foram separados por retas verticais tracejadas. Na mesma figura também foi realizada a comparação dos dados in vivo da arteríola cremaster do rato extraídos de [11] com os dados da simulação e nota-se que o modelo apresentou resultados bem satisfatórios. Na Figura 6.10a, para comparação o controle da vazão não foi levado em conta, ou seja, a vazão foi mantida constante e com isso nota-se que o terceiro regime de crescimento não foi alcançado pelo modelo pois a área não começa a decrescer.

As Figuras 6.10c e 6.10d são respectivamente a diferença de pressão entre a entrada e a saída do canal pelo tempo de simulação e a velocidade (máximo da parábola) pelo tempo de simulação. Uma coisa interessante a se notar é que  $u_0$  começa a crescer quando a diferença de pressão de corte é alcançada (primeira reta vertical tracejada em ambos os gráficos) e se estabiliza depois de um determinado tempo de simulação (segunda reta vertical) e ambos alcançam um platô que reflete a estabilização estrutural do coágulo.

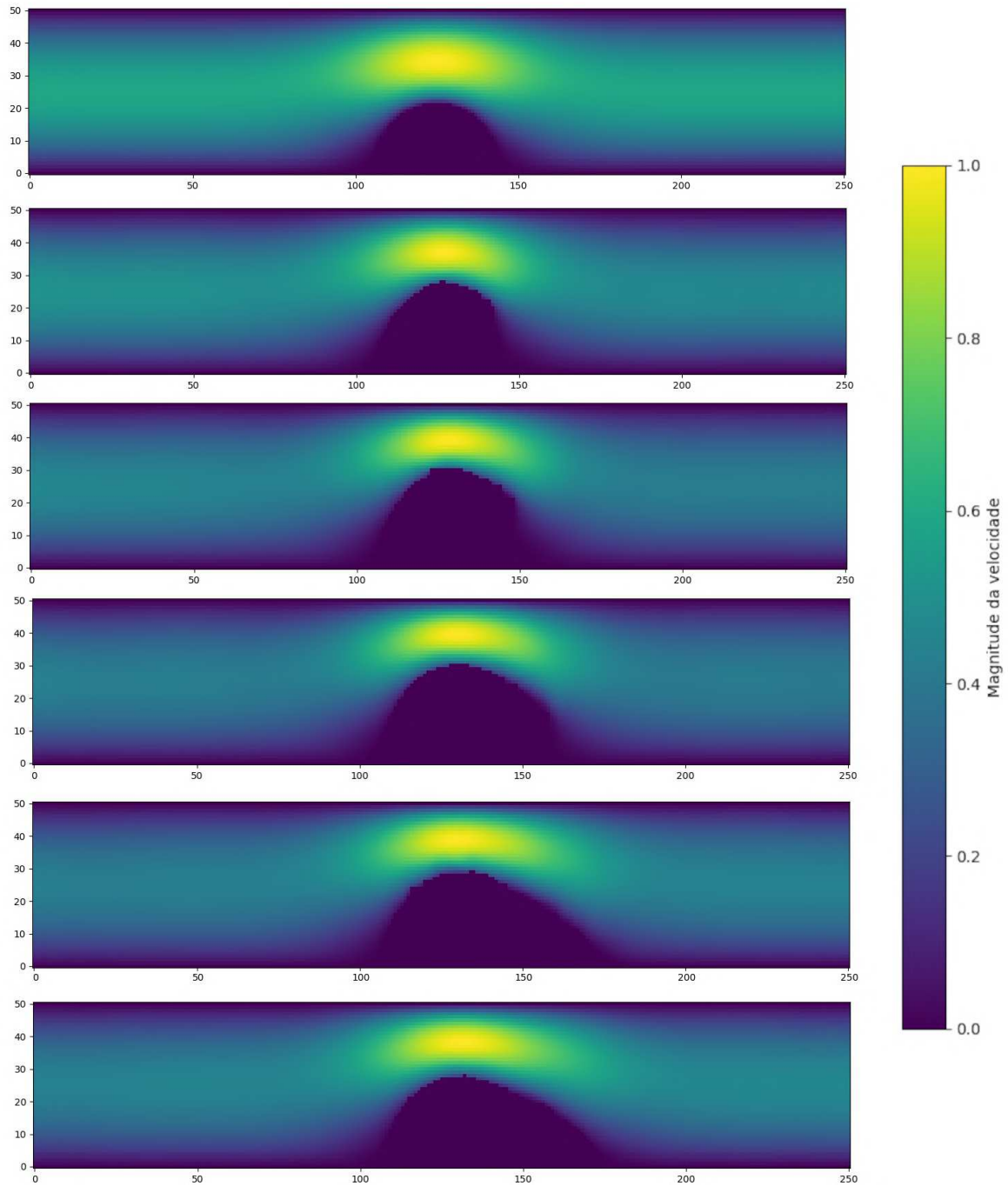


Figura 6.9: Perfil de escoamento de modo que a coloração indica a magnitude do campo de velocidades. Cada perfil é referente aos seguintes tempos de simulação: 0, 500, 1000, 1500, 2000 e 2500 respectivamente. Como pode ser visto, inicialmente a obstrução cresce verticalmente, logo depois é arrastada até ter a forma de uma calda de cometa. As condições de não deslizamento na obstrução são satisfeitas, como pode ser visto através da coloração azulada. A escala de cores ao lado é referente a uma fração do máximo de  $|\mathbf{u}|$ .

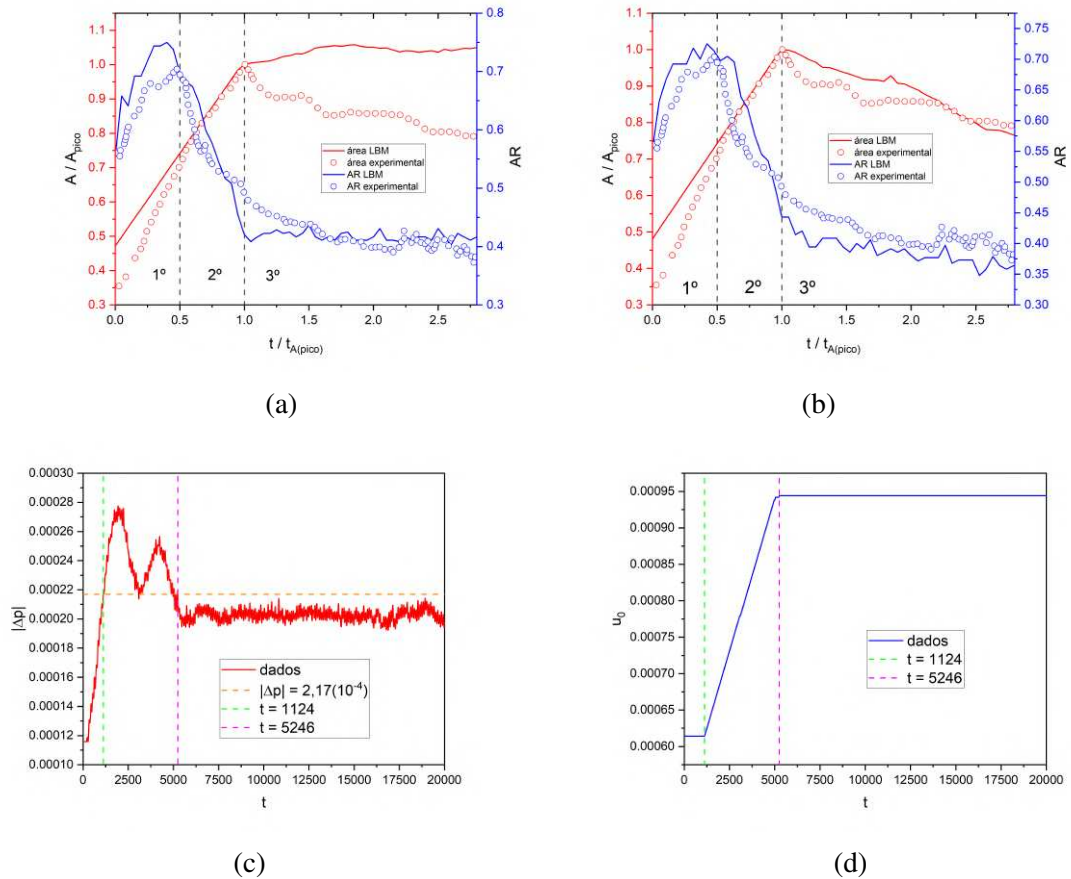


Figura 6.10: (a) Gráfico da área normalizada pela área onde o pico acontece e do AR ambos pelo tempo de simulação normalizado pelo tempo onde acontece o pico de área para o caso onde a vazão não é ajustada. As curvas contínuas são os resultados das simulações e os pontos são os dados experimentais extraídos de [11]. As retas verticais tracejadas separam os três regimes. (b) O mesmo tipo de gráfico anterior, porém a vazão é ajustada. Nota-se que o terceiro regime de crescimento é encontrado quando tal condição é considerada. (c) Gráfico da diferença de pressão pelo tempo de simulação. As curvas tracejadas denotam os locais onde a diferença de pressão de corte é alcançada e a velocidade começa a ser incrementada. (d) Gráfico da velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) pelo tempo de simulação. As curvas tracejadas denotam os locais onde a diferença de pressão de corte é alcançada e a velocidade começa a ser incrementada.

### 6.4.2 Variando os Parâmetros

Tendo tudo isso em mente, serão analisadas aqui algumas variações dos parâmetros livres  $\dot{\gamma}_0$ ,  $x_f$ ,  $|\Delta p|_{corte}$ ,  $\Delta t_{depositar}$  e  $\Delta u_0$  na tentativa de demonstrar a versatilidade do modelo. Tais variações podem ser encontradas nas Figuras 6.11, 6.12, 6.13, 6.14 e 6.15. Na Figura 6.11a, por exemplo, quando  $\dot{\gamma}_0$  muda, a inclinação da reta muda no primeiro e segundo regimes. Já na Figura 6.11b o pico em 0,5 do  $AR$  muda à medida que  $\dot{\gamma}_0$  muda. Na Figura 6.15b, o  $AR$  no terceiro regime aumenta expressivamente quando  $x_f$  diminui. Em 6.14a mudar  $|\Delta p|_{corte}$  não altera a inclinação da reta nos primeiros dois regimes da área. Inúmeras outras análises podem ser feitas, porém não é o intuito principal aqui e sim demonstrar a versatilidade do modelo.

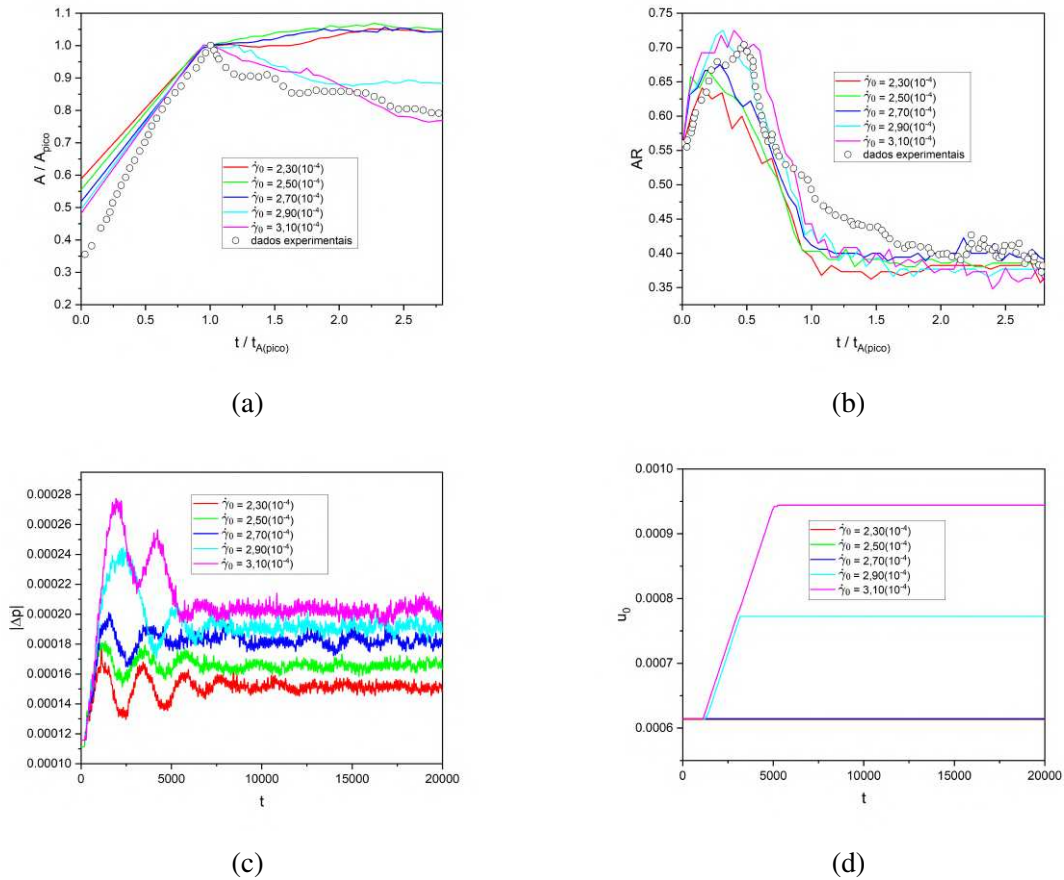


Figura 6.11: (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $\dot{\gamma}_0$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $\dot{\gamma}_0$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $\dot{\gamma}_0$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $\dot{\gamma}_0$ .

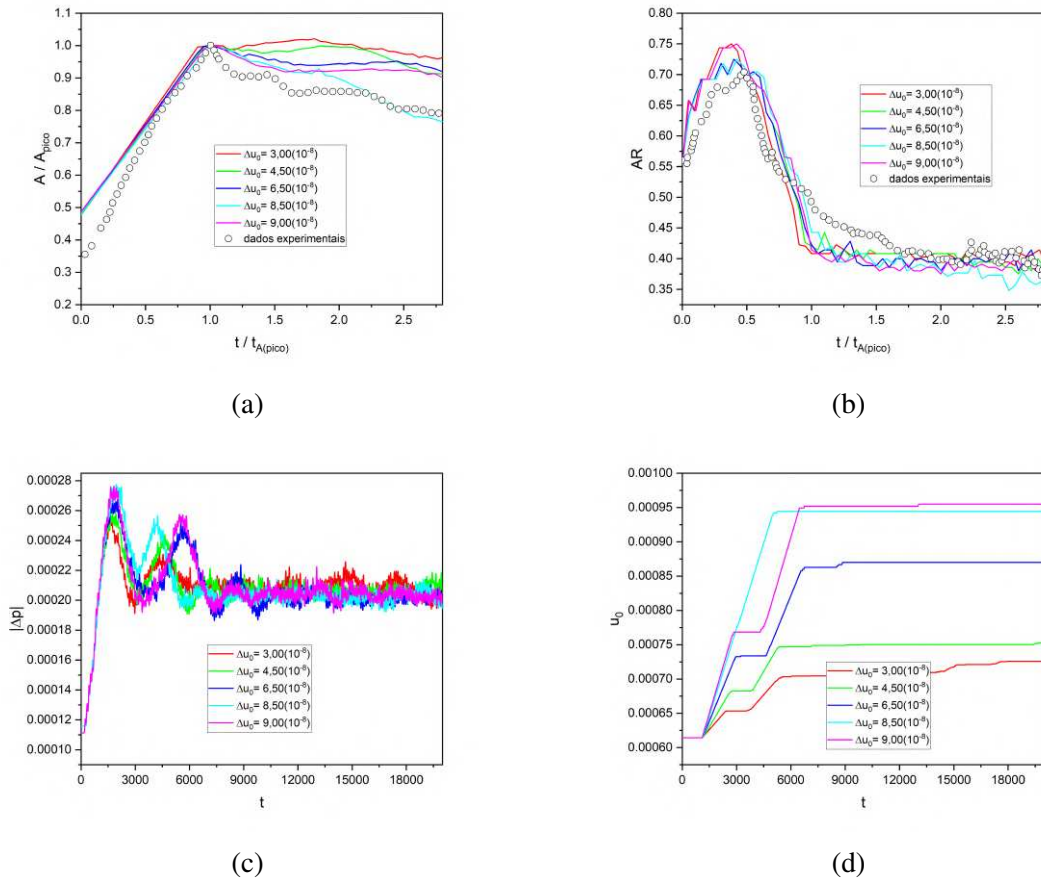


Figura 6.12: (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $\Delta u_0$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $\Delta u_0$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $\Delta u_0$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $\Delta u_0$ .

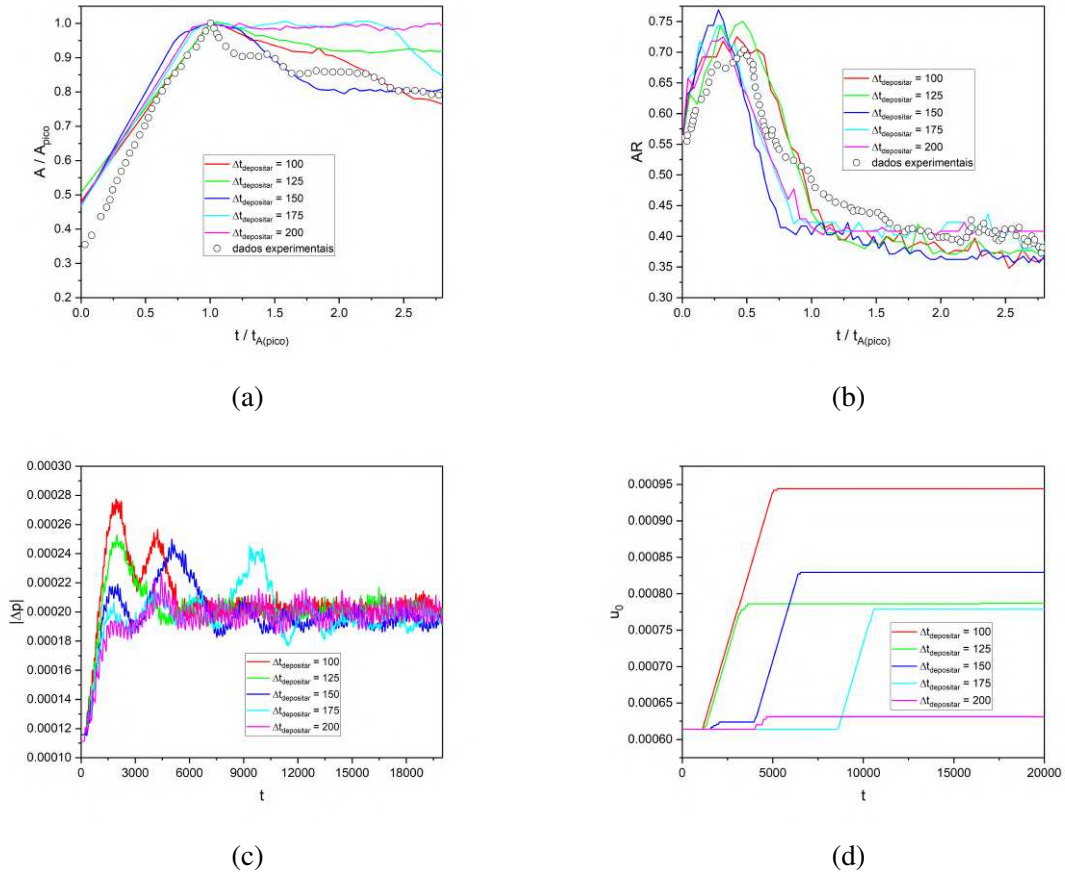


Figura 6.13: (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $\Delta t_{depositar}$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $\Delta t_{depositar}$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $\Delta t_{depositar}$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $\Delta t_{depositar}$ .

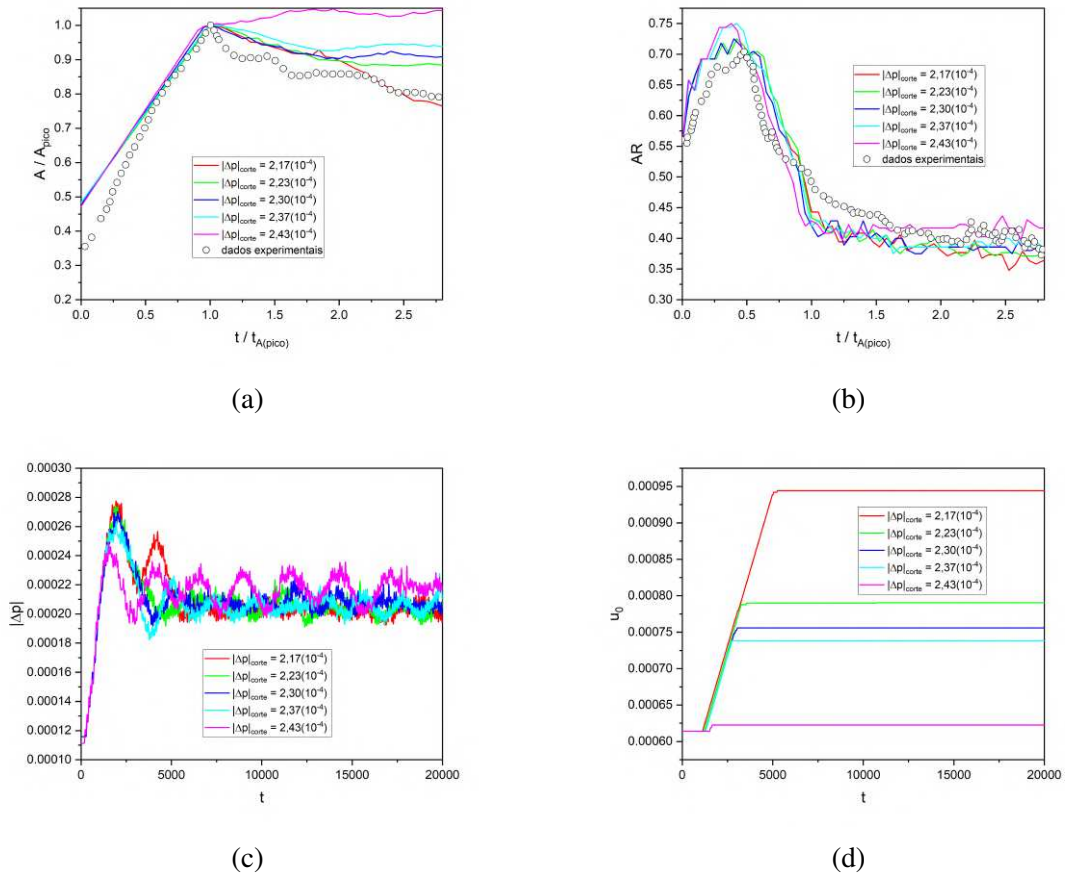


Figura 6.14: (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $|\Delta p|_{corte}$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $|\Delta p|_{corte}$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $|\Delta p|_{corte}$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $|\Delta p|_{corte}$ .

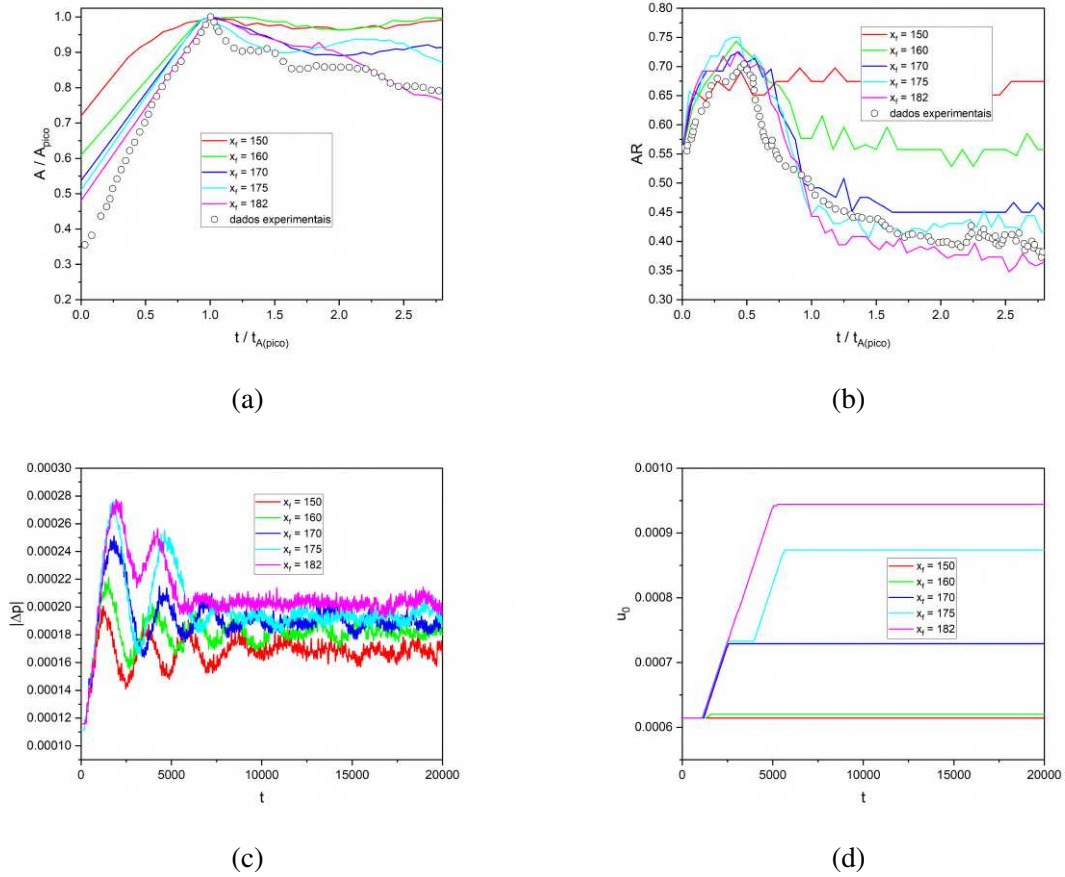


Figura 6.15: (a) Área ( $A$ ) normalizada pela área onde o pico acontece ( $A_{pico}$ ) para cada valor de  $x_f$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de área divulgados pelo artigo [11]. (b) Razão entre a largura e altura ( $AR = \frac{H}{L}$ ) para cada valor de  $x_f$ . Os pontos com a legenda dados experimentais se referem aos dados de  $AR$  divulgados pelo artigo [11]. (c) Gráfico da diferença de pressão em relação ao tempo para cada valor de  $x_f$ . (d) Velocidade de entrada do canal  $u_0$  (máximo da parábola) em relação ao tempo para cada valor de  $x_f$ .

## 6.5 Conclusões da Parte II

Nessa parte do trabalho foi desenvolvido um modelo para o crescimento de coágulos em sistemas vasculares onde o fluxo do líquido foi simulado pelo método de rede de Boltzmann. De forma geral o modelo se provou eficiente em reproduzir os três regimes teóricos (Seção 6.2) apresentados utilizando-se a regulação da vazão de acordo com uma pressão de corte. Um conceito importante é que quando não se é considerado essa hipótese do controle da vazão e a diferença de pressão é mantida fixa, o coágulo cresce até bloquear totalmente o canal. Já quando a vazão não é ajustada, porém mantida fixa, o coágulo não apresenta o terceiro regime demonstrado aqui. Esse tipo de análise reforça a importância do controle da vazão na tentativa de garantir um fluxo adequado para um determinado local, ou seja, o controle da vazão pode ser algo muito importante no desenvolvimento de um coágulo que pode ser patológico (trombo) ou não.

## 7 Conclusões Gerais e Perspectivas

Na primeira parte deste trabalho foi realizado um estudo sobre como as obstruções em um escoamento entre duas placas paralelas mudam os parâmetros hidrodinâmicos de um fluido newtoniano. Para o caso de um círculo no centro, baixos números de Reynolds e diferença de pressão constante, as curvas normalizadas de vazão se coincidem e foi encontrada uma mudança de comportamento da vazão, caracterizada por um ponto de mudança e o mesmo corresponde ao espaço livre de 32,7%. Esse ponto separa os dois regimes observados neste caso: o regime linear e de obstrução total. Aumentando o número de Reynolds observou-se que as curvas agora começam se distanciar uma das outras quando normalizadas e acontece uma quebra do regime linear em duas partes e a mesma pôde ser identificada através da análise da diferença da área dos vórtices formados pela área do círculo. Ou seja, quando essa diferença tem pontos acima de  $y = 0$ , acontece a quebra. O mesmo escoamento agora com vazão constante também foi analisado e foi encontrado que a diferença de pressão segue uma lei de potência. Para o meio círculo na parte inferior, resultados análogos foram encontrados, porém agora como a vorticidade total do sistema não é nula, pôde ser identificado o local da quebra do regime linear e a mesma análise da área do vórtice foi feita, confirmando o resultado anterior, ou seja, para as curvas que surgem tal quebra, a diferença da área do vórtice pela área do círculo contém valores maiores que zero. Por fim, ao contrário do círculo no centro que acontece uma mudança abrupta do regime de livre escoamento para o obstruído, para o caso do meio círculo abaixo, tal mudança ocorre de forma suave.

Tais conclusões dão uma ideia de como uma obstrução, como um êmbolo (círculo no centro) ou um coágulo/trombo (semicírculo) por exemplo, podem afetar o fluxo resultando em uma menor entrega de oxigênio e nutrientes para os tecidos, dando indícios da porcentagem de obstrução para se tornarem patológicos. Por fim, um modelo de crescimento de coágulo baseado no arrasto de partículas, foi proposto. O escoamento considerado foi misto, ou seja, o mesmo considera o controle do fluxo sanguíneo realizado pelo organismo na tentativa de manter a vazão para um determinado tecido de modo que a presença dos três regimes de crescimento foram observados: no primeiro o coágulo cresce no local da lesão, no segundo é arrastado pelas forças hidrodinâmicas do fluido começando a formar uma espécie de calda de cometa e por fim a estabilização acontece. A geometria do coágulo também foi comparada com os dados in vivo e se mostrou bem satisfatória. Ao considerar-se o mesmo modelo, porém com a vazão constante, o terceiro regime não é alcançado. Já se for considerado a diferença de pressão entre a saída e a entrada do canal como constante, o coágulo cresce e obstrui totalmente o canal. Com isso tem-se indícios da importância dos mecanismos de compensação exercidos pelo organismo, ou seja, a distensibilidade dos vasos próximos e do aumento local de pressão, ao formar um coágulo patológico ou não, de modo que deficiências em tais mecanismos podem ser os grandes responsáveis pela formação de um trombo, prejudicando gravemente a saúde do paciente.

Este trabalho foi inicialmente pensado para o estudo da formação de coágulos ou trombos e como os mesmos alteram as variáveis hidrodinâmicas de interesse, porém as mesmas ideias aqui desenvolvidas podem se aplicar para estudar diversas outras condições de interesse médico,

como no caso de embolia pulmonar, aterosclerose, trombose venosa profunda, infarto agudo do miocárdio, acidente vascular cerebral, vasculite, embolia gordurosa e dentre inúmeras outras condições que envolvem obstruções em diversos vasos do corpo humano. Como perspectivas de trabalhos futuros, possíveis ideias de aprimorar o modelo e os sistemas estudados considerando o caso tridimensional e talvez a geometria real de um vaso surgem, assim como a introdução de partículas que poderão ser arrastadas pelo fluido no modelo desenvolvido. Considerar também os efeitos pulsáteis e não-newtonianos em alguns vasos e o efeito da elasticidade da parede vascular.

## Referências

- [1] – T. E. Faber, *"Fluid Dynamics For Physicists"*, (Cambridge University Press, 1995).
- [2] – E.M.Lifshitz, L.D.Landau, *"Fluid Mechanics"*, 2 ed., (Butterworth-Heinemann, 1987).
- [3] – T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E. M. Viggien, *"The Lattice Boltzmann Method - Principles and Practice"*, (Springer International Publishing Switzerland, 2017).
- [4] – A. A. Mohamad, *"Lattice Boltzmann Method - Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes"*, (Springer-Verlag London Limited, 2011).
- [5] – A. A. Mohamad, *"Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering"*, (1st ed., World Scientific, Singapore, 2011).
- [6] – J. Vasseur, F. B. Wadsworth, J. P. Coumans, and D. B. Dingwell, *"Permeability of packs of polydisperse hard spheres"*, (Phys. Rev. E 103, 062613 2021).
- [7] – Wang, Han, Wang, Wendong, Su, Yuliang, Jin, Zhehui, *"Lattice Boltzmann Model for Oil/Water Two-Phase Flow in Nanoporous Media Considering Heterogeneous Viscosity, Liquid/Solid, and Liquid/Liquid Slip"*, (SPE Journal, 27, 06, 2022).
- [8] – Aljaž Maslo, Jože Panjan, Dušan Žagar, *"Large-scale oil spill simulation using the lattice Boltzmann method, validation on the Lebanon oil spill case"*, (Marine Pollution Bulletin, 84, 1, 2014).
- [9] – Bing He, Chunyan Qin, Wenbo Chen, Binghai Wen, *"Numerical simulation of pulmonary airway reopening by the multiphase lattice Boltzmann method"* Image 1", (Computers and Mathematics with Applications, 108, 2022).
- [10] – L. Amaya-Bower, T. Lee, P. Trans, *"Lattice Boltzmann simulations of bubble formation in a microfluidic T-junction"*, (R. Soc. A. 369 2011).
- [11] – Kadri OE, Chandran VD, Surblyte M, Voronov RS, *"In vivo measurement of blood clot mechanics from computational fluid dynamics based on intravital microscopy images."*, (Comput Biol Med, 2019).
- [12] – Romualdo Troisi, Nicole Balasco, Ida Autiero, Filomena Sica, Luigi Vitagliano, *"New insight into the traditional model of the coagulation cascade and its regulation: illustrated review of a three-dimensional view"*, (Elsevier, 2023).

- [13] – S. Park, J. Park, "*Back to basics: the coagulation pathway*", (Blood Res. 59, 35, 2024).
- [14] – Palta S, Saroa R, Palta A, "*Overview of the coagulation system*", (Indian J Anaesth, 2014).
- [15] – A. C. Guyton, J. E. Hall, "*Tratado de Fisiologia Médica*", (13<sup>a</sup> ed., Elsevier, Rio de Janeiro, 2017).
- [16] – Alexander Y. Mitrophanov, Glenn Merrill-Skoloff, Steven P. Grover, Vijay Govindarajan, Arun Kolanjiyil, Daniel S. Hariprasad, Ginu Unnikrishnan, Robert Flaumenhaft, Jaques Reifman, "*Injury Length and Arteriole Constriction Shape Clot Growth and Blood-Flow Acceleration in a Mouse Model of Thrombosis*", (Arteriosclerosis, Thrombosis, and Vascular Biology, 2020).
- [17] – Alan D. Michelson, "*CHAPTER 34 - Real-Time In Vivo Imaging of Platelets During Thrombus Formation*", (Academic Press, Second Edition, Burlington, 2007).
- [18] – Tomaiuolo, Maurizio, Stalker, Timothy J, Welsh, John D, Diamond, Scott L, Sinno, Talid, Brass, Lawrence F, "*A systems approach to hemostasis: 2. Computational analysis of molecular transport in the thrombus microenvironment*", (Blood, 124, 11, 2014).
- [19] – P. Moldrup, T. Olesen, T. Komatsu, P. Schjønning, and D. E. Rolston, "*Tortuosity, diffusivity, and permeability in the soil liquid and gaseous phases*", (Soil Sci. Soc. Am. J. 65, 613 2001).
- [20] – J. Vasseur, F. B. Wadsworth, D. B. Dingwell, "*Permeability of polydisperse magma foam*", (Geology 48, 536 2020).
- [21] – Z. Yang, A. Elgamal, "*Influence of permeability on liquefaction-induced shear deformation*", (J. Eng. Mech. 128, 720 2002).
- [22] – P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook, "*A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems*", (Phys. Rev. 94, 511 1954).
- [23] – F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, "*The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*", (Springer Cham Heidelberg New York Dordrecht London, 2016).
- [24] – Kruger, Timm, Varnik, Fathollah, Raabe, Dierk, "*Shear stress in lattice Boltzmann simulations*", (Phys. Rev. E, 79, 4, 2009).
- [25] – S. R. A. Salinas, "*Introduction to Statistical Physics*", (1st ed., New York, Springer, 2001).
- [26] – Born Max, Green H. S, "*A general kinetic theory of liquids I. The molecular distribution functions*", (Proc. R. Soc. Lond., A188, 1946).

- [27] – Zou, Qisu e He, Xiaoyi, "*On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model*", (Physics of Fluids, 9, 6, 1997).
- [28] – Alessandro De Rosis, "*Non-orthogonal central moments relaxing to a discrete equilibrium: A D2Q9 lattice Boltzmann model*", (EPL, 116, 44003, 2017).
- [29] – Doutel E, Galindo-Rosales FJ, Campo-Deaño L, "*Hemodynamics Challenges for the Navigation of Medical Microbots for the Treatment of CVDs*", (Materials (Basel), 2021).
- [30] – Carpena, P., Aguiar, J., Bernaola-Galván, P., Carnero Ruiz, C., "*Problems Associated with the Treatment of Conductivity-Concentration Data in Surfactant Solutions: Simulations and Experiments*", (American Chemical Society (Langmuir), 2002).
- [31] – Juliano F. Teixeira, Juliana S. Quintão, Kairon M. Oliveira e Alvaro V.N.C. Teixeira, "*Self-assembly of mixed surfactants sodium dodecylsulfate and polyethylene glycol dodecyl ether in aqueous solutions*", (Journal of Molecular Liquids, 2024).

## A Apêndice - Deduções

### A.1 Expansão Chapman-Enskog - Método Tradicional

A derivada temporal pode ser dividida em algumas partes:

$$\partial_t = \epsilon \partial_{t_0} + \epsilon^2 \partial_{t_1} + \epsilon^3 \partial_{t_2} + \mathcal{O}(\epsilon^4), \quad (\text{A.1})$$

onde  $\epsilon$  é um termo da ordem do número de Knudsen e cada tempo que aparece nas derivadas indica uma escala de tempo diferente. Já espacialmente os processos são todos de mesma ordem, então o gradiente pode ser escrito como

$$\nabla = \epsilon \nabla_1 = \epsilon \left( \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial y_1}, \frac{\partial}{\partial z_1} \right) = \epsilon \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (\text{A.2})$$

e a função de distribuição expandida em torno do equilíbrio como

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \epsilon^3 f_i^{(3)} + \mathcal{O}(\epsilon^4), \quad (\text{A.3})$$

tal que  $f_i^{(0)} = f^{eq}$ , onde  $0 \leq i \leq (q-1)$  de modo que  $q$  depende do número de velocidades discretizadas. Expandindo a função de distribuição em série de Taylor e considerando  $\Delta t = 1$ , tem-se:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{x}, t) = (\mathbf{c}_i \cdot \nabla + \partial_t) f_i + \frac{1}{2!} (\mathbf{c}_i \cdot \nabla + \partial_t)^2 f_i + \dots = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}). \quad (\text{A.4})$$

Colocando as Equações (A.1), (A.2) e (A.3) em (A.4), resulta-se em

$$\begin{aligned} & \left( \epsilon \mathbf{c}_i \cdot \nabla_1 + \epsilon \partial_{t_0} + \epsilon^2 \partial_{t_1} + \epsilon^3 \partial_{t_2} + \mathcal{O}(\epsilon^4) \right) \left( f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \epsilon^3 f_i^{(3)} + \mathcal{O}(\epsilon^4) \right) + \\ & \frac{1}{2!} \left( \epsilon \mathbf{c}_i \cdot \nabla_1 + \epsilon \partial_{t_0} + \epsilon^2 \partial_{t_1} + \epsilon^3 \partial_{t_2} + \mathcal{O}(\epsilon^4) \right)^2 \left( f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \epsilon^3 f_i^{(3)} + \mathcal{O}(\epsilon^4) \right) + \dots = \\ & -\frac{1}{\tau} \left( \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \epsilon^3 f_i^{(3)} + \mathcal{O}(\epsilon^4) \right), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

que com as devidas manipulações, os termos de primeira ordem em  $\epsilon$  podem ser agrupados, resultando em

$$(\mathbf{c}_i \cdot \nabla_1 + \partial_{t_0}) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)}, \quad (\text{A.6})$$

enquanto que o agrupamento dos termos de segunda ordem, chega-se em

$$\begin{aligned} & \partial_{t_1} f_i^{(0)} + (\mathbf{c}_i \cdot \nabla_1 + \partial_{t_0}) f_i^{(1)} + \frac{1}{2} (\mathbf{c}_i \cdot \nabla_1 + \partial_{t_0})^2 f_i^{(0)} \\ & = \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left( \frac{1}{2} - \tau \right) (\mathbf{c}_i \cdot \nabla + \partial_{t_0})^2 f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Deve-se lembrar das Equações (4.6a) até (4.6d), que serão utilizadas constantemente em toda a dedução e são dadas por:

$$\sum_i f_i^{(0)} = \rho, \quad (\text{A.8a})$$

$$\sum_i c_{i\alpha} f_i^{(0)} = \rho u_\alpha, \quad (\text{A.8b})$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} = \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \quad (\text{A.8c})$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} f_i^{(0)} = \rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}), \quad (\text{A.8d})$$

onde em todos os somatórios que seguirão  $i$  vai de 0 até  $(q - 1)$ , de modo que tais limites serão omitidos para evitar repetição.

Será necessário também definir o tensor

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)}, \quad (\text{A.9})$$

que é uma definição análoga de  $\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}$  para o caso do não-equilíbrio, e também as hipóteses

$$\sum_i f_i^{(n)} = 0, \quad \forall n \neq 0 \quad (\text{A.10a})$$

$$\sum_i c_{i\alpha} f_i^{(n)} = 0, \quad \forall n \neq 0 \quad (\text{A.10b})$$

que serão utilizadas mais adiante.

Trabalhando primeiramente com a primeira ordem em  $\epsilon$ , somando a Equação (A.6) em  $i$ , tem-se:

$$\sum_i (\mathbf{c}_i \cdot \nabla_1 + \partial_{t_0}) f_i^{(0)} = \sum_i (c_{i\beta} \partial_\beta + \partial_{t_0}) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(1)} = 0, \quad (\text{A.11})$$

que resultará em

$$\partial_{t_0} \rho + \partial_\beta (\rho u_\beta) = 0, \quad (\text{A.12})$$

onde foram utilizadas Equações (A.8a) e (A.8b) para alcançar as variáveis hidrodinâmicas e a hipótese dada pela Equação (A.10a).

Ainda com a primeira ordem, Somando a Equação (A.6) em  $i$  e multiplicando por  $c_{i\alpha}$ , obtém-se:

$$\sum_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\beta + c_{i\alpha} \partial_{t_0}) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i c_{i\alpha} f_i^{(1)}, \quad (\text{A.13})$$

então, usando (A.8b), (A.8c) e a hipótese (A.10b),

$$\partial_{t_0} (\rho u_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \partial_{t_0} (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) = 0. \quad (\text{A.14})$$

Novamente usando a equação de primeira ordem em  $\epsilon$ , somando (A.6) em  $i$  e multiplicando por  $c_{i\alpha} c_{i\gamma}$ , chega-se em:

$$\sum_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\beta + c_{i\alpha} c_{i\gamma} \partial_{t_0}) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\gamma} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} \Pi_{\alpha\gamma}^{(1)}, \quad (\text{A.15})$$

daí concluem-se todos os resultados que irão utilizar a equação de primeira ordem.

Fazendo algo análogo para o caso de segunda ordem, ou seja, somando a Equação (A.7) em  $i$ , alcança-se:

$$\begin{aligned} & \sum_i \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \sum_i (\mathbf{c}_i \cdot \nabla + \partial_{t_0})^2 f_i^{(0)} \\ &= \sum_i \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \sum_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta + 2c_{i\alpha} \partial_\alpha \partial_{t_0} + \partial_{t_0} \partial_{t_0}) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(2)} = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

onde a Equação (A.10a) foi usada novamente, daí

$$\begin{aligned} & \partial_{t_1} \rho + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \left[ \partial_\alpha \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + 2\partial_\alpha \partial_{t_0} (\rho u_\alpha) + \partial_{t_0} \partial_{t_0} (\rho) \right] \\ &= \partial_{t_1} \rho + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \left[ \partial_\alpha \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + 2\partial_\alpha \partial_{t_0} (\rho u_\alpha) - \partial_{t_0} \partial_\alpha (\rho u_\alpha) \right] \\ &= \partial_{t_1} \rho + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_\alpha \left[ \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_{t_0} (\rho u_\alpha) \right] = \partial_{t_1} \rho + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_\alpha \left[ -\frac{1}{\tau} \sum_i c_{i\alpha} f_i^{(1)} \right] = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

em que a Equação (A.12) foi também utilizada. Então, conclui-se, usando (A.13) e (A.14), que

$$\partial_{t_1} \rho = 0, \quad (\text{A.18})$$

Continuando no termo de segunda ordem, ou seja, somando (A.7) em  $i$  e multiplicando por  $c_{i\gamma}$ , tem-se:

$$\sum_i c_{i\gamma} \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \sum_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\alpha \partial_\beta + 2c_{i\alpha} c_{i\gamma} \partial_\alpha \partial_{t_0} + c_{i\gamma} \partial_{t_0} \partial_{t_0}) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i c_{i\gamma} f_i^{(2)} = 0, \quad (\text{A.19})$$

então

$$\begin{aligned} & \sum_i c_{i\gamma} \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\alpha \partial_\beta f_i^{(0)} + \\ & 2 \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_\alpha \partial_{t_0} \left( \sum_i c_{i\alpha} c_{i\gamma} f_i^{(0)} \right) + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_{t_0} \partial_{t_0} \left( \sum_i c_{i\gamma} f_i^{(0)} \right) \\ &= \partial_{t_1} (\rho u_\gamma) + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\alpha \partial_\beta f_i^{(0)} + 2 \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_\alpha \partial_{t_0} \Pi_{\alpha\gamma}^{(0)} - \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_\alpha \partial_{t_0} \Pi_{\alpha\gamma}^{(0)} \\ &= \partial_{t_1} (\rho u_\gamma) + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\alpha \partial_\beta f_i^{(0)} + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_\alpha \partial_{t_0} \Pi_{\alpha\gamma}^{(0)} \\ &= \partial_{t_1} (\rho u_\gamma) + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_\alpha \left( \sum_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\beta + c_{i\alpha} c_{i\gamma} \partial_{t_0}) f_i^{(0)} \right) \\ &= \partial_{t_1} (\rho u_\gamma) + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \partial_\alpha \left( -\frac{1}{\tau} \Pi_{\alpha\gamma}^{(1)} \right) = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

notando-se que a Equação (A.15) foi utilizada. Com isso conclui-se que

$$\partial_{t_1} (\rho u_\alpha) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0. \quad (\text{A.21})$$

Fazendo um apanhado dos principais resultados, tem-se o seguinte:

$$\partial_{t_0}\bar{\rho} + \partial_\beta(\rho u_\beta) = 0, \quad (\text{A.22a})$$

$$\partial_{t_1}\rho = 0, \quad (\text{A.22b})$$

$$\partial_{t_0}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \partial_{t_0}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) = 0, \quad (\text{A.22c})$$

$$\partial_{t_1}(\rho u_\alpha) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0. \quad (\text{A.22d})$$

Para resultar na equação da continuidade, as contribuições de todas as escalas de tempo devem ser somadas, ou seja, somando as Equações (A.22a) e (A.22b), resulta-se:

$$\partial_t \rho + \partial_\beta(\rho u_\beta) = 0. \quad (\text{A.23})$$

Somando agora (A.22c) e (A.22d), chega-se em:

$$\begin{aligned} & \partial_{t_0}(\rho u_\alpha) + \partial_{t_1}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \\ & \quad \partial_{t_0}(\rho u_\alpha) + \partial_{t_1}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta \left( \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} \right) + \\ & \quad \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta \left( -\tau \sum_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\gamma + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{t_0}) f_i^{(0)} \right) \\ & \quad = \partial_{t_0}(\rho u_\alpha) + \partial_{t_1}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) - \\ & \quad \tau \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta \left[ \partial_\gamma (\rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta})) + \partial_{t_0}(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) \right] \\ & \quad = \partial_{t_0}(\rho u_\alpha) + \partial_{t_1}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) \\ & \quad - \tau c_s^2 \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta \left[ \partial_\alpha(\rho u_\beta) + \partial_\beta(\rho u_\alpha) + \partial_\gamma(\rho u_\gamma \delta_{\alpha\beta}) - \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma(\rho u_\gamma) + \frac{1}{c_s^2} \partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta) \right] \\ & \quad = \partial_{t_0}(\rho u_\alpha) + \partial_{t_1}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) \\ & \quad - \tau c_s^2 \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta \left[ \partial_\alpha(\rho u_\beta) + \partial_\beta(\rho u_\alpha) + \frac{1}{c_s^2} \partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta) \right] = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

com isso o tensor

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} &= -\tau c_s^2 \left[ \partial_\beta(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha(\rho u_\beta) + \frac{1}{c_s^2} \partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta) \right] \\ &= -\tau c_s^2 \rho (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) + \tau \partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) \\ &\approx -\tau c_s^2 \rho (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) = -\frac{\tau c_s^2}{\nu} \sigma'_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

foi identificado e a definição dada pela Equação (2.7) para o caso fracamente compressível, foi utilizada. Para baixos números de Mach, a aproximação feita é bem coerente [24]. Portanto, a Equação (A.24) com a aproximação feita em (A.25) resulta em

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) - \partial_\beta \left[ c_s^2 \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\nu} \sigma'_{\alpha\beta} \right] = 0, \quad (\text{A.26})$$

que é a equação de Navier-Stokes para  $\nu = c_s^2 \left( \tau - \frac{1}{2} \right)$ .

Com o auxílio da Equação (A.25), é possível recuperar o tensor  $\mathbf{S}$  e suas componentes serão:

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2\nu\rho}\sigma'_{\alpha\beta} \approx -\frac{1}{2\tau\rho c_s^2}\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}, \quad (\text{A.27})$$

então

$$S_{\alpha\beta} \approx -\frac{1}{2\tau\rho c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)}. \quad (\text{A.28})$$

Tem-se também que o tensor  $\sigma'$  será:

$$\sigma'_{\alpha\beta} = 2\rho\nu S_{\alpha\beta} \approx -\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)}, \quad (\text{A.29})$$

e sua forma sem traço, que é muito encontrada em livros textos, será

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \sigma'_{\alpha\beta} - \frac{1}{D}\delta_{\alpha\beta}\sigma'_{\gamma\gamma} \approx -\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \sum_i \left[ c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{D} c_{i\gamma} c_{i\gamma} \right] f_i^{(1)}, \quad (\text{A.30})$$

onde  $D$  é a dimensão espacial.

Como pode ser notado, o tensor  $S_{\alpha\beta}$  foi encontrado em função do termo  $f_i^{(1)}$ , que não é conhecido a priori, então uma outra aproximação deve ser feita [24]. Será necessário trocar  $f_i^{(1)}$  por  $f_i^{neq} = f_i - f_i^{eq}$ , que é a função de distribuição do não-equilíbrio. Com isso, tem-se

$$S_{\alpha\beta} \approx -\frac{1}{2\tau\rho c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{neq}. \quad (\text{A.31})$$

## B Apêndice - Códigos

### B.1 Obtenção dos Termos para os Momentos Centrais

O primeiro termo obtido através do auxílio de bibliotecas python, é o seguinte:

$$\sum_i c_{ix}^2 c_{iy}^2 f_i^{eq} = \rho c_s^2 (c_s^2 + u_x^2 + u_y^2), \quad (\text{B.1})$$

de modo que o mesmo foi usado para calcular a função de distribuição do equilíbrio na base dos momentos (ver (4.39i)). O código em python é então:

```

1 import sympy as sp
2
3
4 # distribuicao do equilibrio
5 def feq(i, wi, rho, cix, ciy, ux, uy, cs):
6     return wi[i]*rho*(1+((cix[i]*ux + ciy[i]*uy) / (cs**2)) +
7         (((ux**2)*(cix[i]**2) + 2*ux*uy*cix[i]*ciy[i] +
8         (uy**2)*(ciy[i]**2)) / (2*cs**4)) -
9         ((ux*ux + uy*uy) / (2*cs**2)))
10 #--
11
12 # definindo as variaveis
13 cs = sp.symbols('c_s')
14 cs_2 = sp.sqrt(3) * cs
15 f0, f1, f2, f3, f4, f5, f6, f7, f8 = sp.symbols(
16 'f_0 f_1 f_2 f_3 f_4 f_5 f_6 f_7 f_8')
17 rho, ux, uy = sp.symbols('rho u_x u_y')
```

```

18 # ---
19
20 # ket |f_i>
21 fi = sp.Matrix([f0, f1, f2, f3, f4, f5, f6, f7, f8])
22
23
24 # ket |c_{ix}>
25 cix = sp.Matrix([0, cs_2 * 1, 0, -cs_2 * 1, 0, cs_2 * 1,
26 -cs_2 * 1, -cs_2 * 1, cs_2 * 1])
27 # ---
28
29 # ket |c_{iy}>
30 ciy = sp.Matrix([0, 0, cs_2 * 1, 0, -cs_2 * 1, cs_2 * 1,
31 cs_2 * 1, -cs_2 * 1, -cs_2 * 1])
32 # ---
33
34 # pesos d2q9
35 wi = sp.Matrix([sp.Rational(4,9), sp.Rational(1,9),
36 sp.Rational(1,9), sp.Rational(1,9),
37 sp.Rational(1,9), sp.Rational(1,36), sp.Rational(1,36),
38 sp.Rational(1,36), sp.Rational(1,36)])
39 # ---
40
41
42 # calcula as componentes do tensor e imprime em latex
43 for a in ['x', 'y']:
44     for b in ['x', 'y']:
45         for c in ['x', 'y']:
46             for d in ['x', 'y']:
47
48                 result = 0
49                 name_print = ''
50
51                 for i in range(0,9):
52                     c_values = [0,0,0,0]
53                     name = ''
54                     if a == 'x':
55                         c_values[0] = cix[i]
56                         name += 'x'
57                     else:
58                         c_values[0] = ciy[i]
59                         name += 'y'
60
61                     if b == 'x':
62                         c_values[1] = cix[i]
63                         name += 'x'
64                     else:
65                         c_values[1] = ciy[i]
66                         name += 'y'
67
68                     if c == 'x':
69                         c_values[2] = cix[i]
70                         name += 'x'

```

```

71         else:
72             c_values[2] = ciy[i]
73             name += 'y'
74
75         if d == 'x':
76             c_values[3] = cix[i]
77             name += 'x'
78         else:
79             c_values[3] = ciy[i]
80             name += 'y'
81
82
83         result = (result +
84                 c_values[0] * c_values[1] * c_values[2] * \
85                 c_values[3] * \
86                 feq(i, wi, rho, cix, ciy, ux, uy, cs))
87         name_print = name
88
89         print('T_{' + name_print + '}', '=',
90               sp.latex(sp.simplify(result)), '\\\\')
91 # ---

```

## B.2 Obtenção das Matrizes para os Momentos Centrais

Para obter-se (4.44) e (4.45) até (4.53), o seguinte código foi usado:

```

1
2 import sympy as sp
3
4 # descomentar para cs literal
5 #cs = sp.symbols('c_s')
6 #cs_2 = sp.sqrt(3) * cs
7 # ---
8
9 # coloque comentarios para cs literal
10 cs = 1 / sp.sqrt(3)
11 cs_2 = 1.0
12 # ---
13
14 # definindo as variaveis
15 f0, f1, f2, f3, f4, f5, f6, f7, f8 = sp.symbols(
16 'f_0 f_1 f_2 f_3 f_4 f_5 f_6 f_7 f_8')
17 rho, ux, uy = sp.symbols('rho u_x u_y')
18 omega4, omega5 = sp.symbols('omega_4 omega_5')
19 m0, m1, m2, m3, m4, m5, m6, m7, m8 = sp.symbols(
20 'm_0 m_1 m_2 m_3 m_4 m_5 m_6 m_7 m_8')
21 m0_ast, m1_ast, m2_ast, m3_ast, m4_ast = sp.symbols(
22 'm_0^* m_1^* m_2^* m_3^* m_4^*')
23 m5_ast, m6_ast, m7_ast, m8_ast = sp.symbols(
24 'm_5^* m_6^* m_7^* m_8^*')
25 # ---
26
27 # ket |f_i>

```

```

28 fi = sp.Matrix([f0, f1, f2, f3, f4, f5, f6, f7, f8])
29
30
31 # ket |c_{ix}>
32 cix = sp.Matrix([0, cs_2 * 1, 0, -cs_2 * 1, 0, cs_2 * 1,
33 -cs_2 * 1, -cs_2 * 1, cs_2 * 1])
34 # ---
35
36 # ket |c_{iy}>
37 ciy = sp.Matrix([0, 0, cs_2 * 1, 0, -cs_2 * 1, cs_2 * 1,
38 cs_2 * 1, -cs_2 * 1, -cs_2 * 1])
39 # ---
40
41 # pesos d2q9
42 wi = sp.Matrix([sp.Rational(4,9), sp.Rational(1,9),
43 sp.Rational(1,9), sp.Rational(1,9),
44 sp.Rational(1,9), sp.Rational(1,36), sp.Rational(1,36),
45 sp.Rational(1,36), sp.Rational(1,36)])
46 # ---
47
48
49 # matriz S
50 S = sp.diag(1,1,1,1, omega4, omega5, 1, 1, 1)
51 # ---
52
53 # ket |m^{eq}>
54 mi_eq = sp.Matrix([rho, 0, 0, 2*rho*cs**2, 0, 0,
55 -rho*(ux**2)*uy, - rho*ux*(uy**2),
56 rho*(cs**4)*((3/(cs**4))*(ux**2)*(uy**2) + 1)])
57 # ---
58
59 # ket |m>
60 mi = sp.Matrix([m0, m1, m2, m3, m4, m5, m6, m7, m8])
61 # ---
62
63 # matriz M^T
64 ux_ket = sp.Matrix([ux, ux, ux, ux, ux, ux, ux, ux, ux])
65 uy_ket = sp.Matrix([uy, uy, uy, uy, uy, uy, uy, uy, uy])
66 cix_ket = cix - ux_ket
67 ciy_ket = ciy - uy_ket
68
69 a0 = sp.Matrix([1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1])
70 a1 = cix_ket # (c_{0x} - u_x, ...)
71 a2 = ciy_ket # (c_{0y} - u_y, ...)
72
73 a3 = cix_ket.applyfunc(
74 lambda x: x**2) + ciy_ket.applyfunc(
75 lambda x: x**2)
76 # ((c_{0x} - u_x)^2 + (c_{0y} - u_y)^2, ...)
77
78 a4 = cix_ket.applyfunc(
79 lambda x: x**2) - ciy_ket.applyfunc(
80 lambda x: x**2)

```

```

81 # ((c_{0x} - u_x)^2 - (c_{0y} - u_y)^2, ...)
82
83 a5 = cix_ket.multiply_elementwise(
84 ciy_ket)# ((c_{0x} - u_x)(c_{0y} - u_y), ...)
85
86 a6 = cix_ket.applyfunc(
87 lambda x: x**2).multiply_elementwise(ciy_ket)
88 # ((c_{0x} - u_x)^2 (c_{0y} - u_y), ...)
89
90 a7 = cix_ket.multiply_elementwise(
91 ciy_ket.applyfunc(lambda x: x**2))
92 # ((c_{0x} - u_x) (c_{0y} - u_y)^2, ...)
93
94 a8 = cix_ket.applyfunc(
95 lambda x: x**2).multiply_elementwise(
96 ciy_ket.applyfunc(lambda x: x**2))
97 # ((c_{0x} - u_x)^2 (c_{0y} - u_y)^2, ...)
98
99 M = sp.Matrix.hstack(a0, a1, a2, a3, a4, a5, a6, a7, a8)
100 # ---
101
102
103 # PRIMEIRO PASSO calcular |m_i>
104
105 # SEGUNDO PASSO calcular |m_i^*>
106 # usando |m_i> do passo anterior
107 mi_ast = mi - S * (mi - mi_eq)
108 print('|m_i^*\\rangle = ', sp.latex(mi_ast), '\\\\')
109 # ---
110
111 # TERCEIRO PASSO calcular |f_i^*>
112 # usando |m_i^*> do passo anterior
113 mi_ast_2 = sp.Matrix(
114 [m0_ast, m1_ast, m2_ast, m3_ast,
115 m4_ast, m5_ast, m6_ast, m7_ast, m8_ast])
116
117 fi_ast = (M.T).inv() * mi_ast_2
118 print('\\n\\n|f_i^*\\rangle = ', sp.latex(fi_ast))
119 # ---

```