

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA - CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA  
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

MODELO NUMÉRICO EMPREGANDO O MÉTODO DE LATTICE-BOLTZMANN PARA  
ANÁLISE DA DISTRIBUIÇÃO DE FORÇAS HIDRODINÂMICAS EM PARTÍCULAS  
COMPONENTES DE LEITOS POROSOS

por

Andreas Scheuermann Celada

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Porto Alegre, Fevereiro de 2024

### CIP - Catalogação na Publicação

Celada, Andreas Scheuermann  
MODELO NUMÉRICO EMPREGANDO O MÉTODO DE  
LATTICE-BOLTZMANN PARA ANÁLISE DA DISTRIBUIÇÃO DE  
FORÇAS HIDRODINÂMICAS EM PARTÍCULAS COMPONENTES DE  
LEITOS POROSOS / Andreas Scheuermann Celada. -- 2024.  
22 f.  
Orientador: Guilherme Henrique Fiorot.

Trabalho de conclusão de curso (Graduação) --  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de  
Engenharia, Curso de Engenharia Mecânica, Porto  
Alegre, BR-RS, 2024.

1. Escoamento em Meios Porosos. 2. Método Lattice  
Boltzmann. 3. Simulação Computacional. 4. Transporte  
de Sedimentos. I. Fiorot, Guilherme Henrique, orient.  
II. Título.

Andreas Scheuermann Celada

MODELO NUMÉRICO EMPREGANDO O MÉTODO DE LATTICE-BOLTZMANN PARA  
ANÁLISE DA DISTRIBUIÇÃO DE FORÇAS HIDRODINÂMICAS EM PARTÍCULAS  
COMPONENTES DE LEITOS POROSOS

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS  
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE  
**ENGENHEIRO MECÂNICO**  
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO  
CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Ignacio Iturrioz  
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Mecânica dos Fluídos

Orientador: Guilherme Henrique Fiorot

Comissão de Avaliação:

Prof. Guilherme Henrique Fiorot (Presidente)

Prof. Cirilo Seppi Bresolin

Prof. Leticia Jenish Rodrigues

Prof. Ana Luiza de Oliveira Borges

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar minha mais profunda gratidão ao meu orientador, Guilherme Henrique Fiorot, pela sua orientação incansável, apoio e paciência ao longo desta jornada acadêmica. Seu conhecimento e sabedoria foram fundamentais para o desenvolvimento e a conclusão deste trabalho.

Um agradecimento especial ao Prof. Cirilo Bresolin cuja ajuda foi essencial para o progresso deste trabalho. Seus insights valiosos e orientação prática em momentos cruciais foram de grande importância. Sua dedicação ao ensino e à pesquisa foi verdadeiramente inspiradora.

Não posso deixar de agradecer aos meus pais, Oscar e Heide, por me proporcionarem a oportunidade de estudar e por acreditarem em mim incondicionalmente. Seu amor, apoio e sacrifícios foram a base sobre a qual pude construir meus sonhos e aspirações. Este trabalho é também um reflexo do amor e da força que vocês me transmitiram.

A todos vocês, meu sincero obrigado.

## MODELO NUMÉRICO EMPREGANDO O MÉTODO DE LATTICE-BOLTZMANN PARA ANÁLISE DA DISTRIBUIÇÃO DE FORÇAS HIDRODINÂMICAS EM PARTÍCULAS COMPONENTES DE LEITOS POROSOS

**Celada, Andreas Scheuermann**

andreas.celada@hotmail.com

**Resumo.** <Este estudo investiga a interação entre forças hidrodinâmicas e características de leitos porosos em escoamentos, enfocando a porosidade e disposição de partículas para compreender o transporte de sedimentos. Utilizando o método Lattice Boltzmann com esquema D2Q9 e operador BGK, foram simulados quatro domínios porosos, empregando Transformadas de Fourier e Hough para análise da entropia e da estrutura espacial. Os resultados destacaram diferenças notáveis na distribuição de forças entre domínios ordenados e aleatórios, revelando uma transição clara nas condições de escoamento na interface entre regiões porosas e de escoamento livre. As análises sugeriram que a estrutura dos domínios influencia o comportamento fluidodinâmico, embora limitações como a escolha de um modelo 2D possam ter impactado os resultados. Este trabalho realça a importância da estrutura dos domínios porosos no escoamento, indicando a necessidade de futuras pesquisas com modelos mais avançados para análises mais precisas. As descobertas têm implicações práticas em hidráulica e mecânica dos fluidos, com relevância para aplicações industriais e ambientais.>

**Palavras-Chave:** <Escoamento em Meios Porosos, Transporte de Sedimentos, Método Lattice Boltzmann, Simulação Computacional>

**Abstract.** <*This study investigates the interaction between hydrodynamic forces and characteristics of porous beds in flows, focusing on the porosity and arrangement of particles to understand sediment transport. Using the Lattice Boltzmann method with D2Q9 scheme and BGK operator, four distinct porous domains were simulated, employing Fourier and Hough Transforms for entropy analysis and spatial structure. The results highlighted notable differences in force distribution between ordered and random domains, revealing a clear transition in flow conditions at the interface between porous regions and free flow. The analyses suggested that the structure of the domains influences fluidodynamic behavior, although limitations such as the choice of a 2D model may have impacted the results. This work emphasizes the importance of the structure of porous domains in flow, indicating the need for future research with more advanced models for more precise analyses. The findings have practical implications in hydraulics and fluid mechanics, with relevance to industrial and environmental applications.*>

**Keywords:** <Porous Media Flow, Sediment Transport, Lattice Boltzmann Method, Computational Simulation>

## NOMENCLATURA

Abreviaturas e acrônimos

2D Bidimensional

3D Tridimensional

BGK Bhatnagar-Gross-Krook (modelo de colisão no Lattice Boltzmann)

D2Q9 Modelo de discretização com 2 dimensões e 9 direções no Lattice Boltzmann

GPU Graphics Processing Unit (Unidade de Processamento Gráfico)

IA Inteligência Artificial

LBM Lattice Boltzmann Method (Método Lattice Boltzmann)

Símbolos

$\bar{F}$  Força média atuante nos elementos

$\bar{F}_{\text{esc}}$  Média das forças nos elementos expostos ao escoamento livre

$\bar{F}_{\text{mov},i}$  Média móvel das forças no  $i$ -ésimo elemento

$\bar{u}_x$  Média da componente da velocidade macroscópica na direção  $x$

$\bar{u}_x(m)$  Média móvel da velocidade na coluna  $m$

$\Delta \mathbf{p}$  Diferença de *momentum* no cálculo de forças no Lattice Boltzmann

$\mathbf{a}_x$  Campo de aceleração constante no Lattice Boltzmann

$\mathbf{e}_i$  Vetor de velocidade na direção  $i$  no modelo Lattice Boltzmann

$\mathbf{F}$  Força resultante sobre uma superfície no Lattice Boltzmann

$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  Velocidade macroscópica do fluido no Lattice Boltzmann

$\phi$  Porosidade

$\Re\{G(\xi, \eta)\}, \Im\{G(\xi, \eta)\}$  Partes real e imaginária de  $G(\xi, \eta)$

$\rho(\mathbf{x}, t)$  Massa específica do fluido no Lattice Boltzmann

$\tau$  Tempo de relaxamento no modelo Lattice Boltzmann

$\theta$  Ângulo na representação polar da Transformada de Hough

$\xi, \eta$  Frequências espaciais nas direções  $x$  e  $y$

$c_s$  Velocidade do som no meio

$D$  Diâmetro dos elementos do meio poroso

$f(x, y)$  Função imagem no domínio espacial

$F_i$	Força atuante no $i$ -ésimo elemento
$f_i(\mathbf{x}, t)$	Funções de densidade de partículas no Lattice Boltzmann
$f_i^{eq}$	Função de distribuição de equilíbrio no modelo Lattice Boltzmann
$G(\xi, \eta)$	Transformada de Fourier de $f(x, y)$ no domínio da frequência
$H$	Entropia calculada a partir da transformada de Fourier
$H$	Entropia dos domínios
$N$	Número de colunas na matriz
$R$	Razão entre a média das forças nos elementos expostos ao escoamento livre e a média geral
$r$	Distância da origem até a linha na Transformada de Hough
$u_{x,i}$	Componente da velocidade em $x$ na coluna $i$
$V$	Volume simulado
$V_i$	Pequeno volume
$w_i$	Pesos no modelo Lattice Boltzmann D2Q9

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO .....</b>	<b>8</b>
<b>2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .....</b>	<b>8</b>
2.1 MÉTODOS NUMÉRICOS EM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL .....	8
2.2 O MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS .....	8
2.3 O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS .....	9
2.4 O MÉTODO LATTICE BOLTZMANN .....	9
<b>3. METODOLOGIA .....</b>	<b>9</b>
3.1 DEFINIÇÃO DOS DOMÍNIOS .....	9
3.2 DIFERENCIAÇÃO DOS DOMÍNIOS .....	10
3.2.1 Transformada de Fourier .....	10
3.2.2 Transformada de Hough.....	11
3.3 ESCOLHA DO MODELO NUMÉRICO DE LATTICE BOLTZMANN .....	12
3.4 DESCRIÇÃO MATEMÁTICA DO MODELO ESCOLHIDO.....	12
3.5 CÁLCULO DA DENSIDADE E VELOCIDADE MACROSCÓPICA	13
3.6 CÁLCULO DE FORÇAS EM ELEMENTOS .....	13
3.7 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA.....	14
<b>4. RESULTADOS .....</b>	<b>14</b>
4.1 ANÁLISE DO PERFIL DE VELOCIDADES NOS DOMÍNIOS .....	14
4.2 ANÁLISE DAS FORÇAS NOS ELEMENTOS DO EMPACOTAMENTO.....	16
<b>5. CONCLUSÃO .....</b>	<b>21</b>
<b>Referências.....</b>	<b>21</b>



## 1. INTRODUÇÃO

A análise da dinâmica de fluidos em meios porosos é um campo de estudo fundamental para diversas áreas da ciência e engenharia, como hidrologia, recuperação de petróleo e design de materiais filtrantes. O comportamento dos fluidos quando interagem com estruturas porosas exige métodos numéricos robustos e precisos para sua simulação e compreensão. Nesse contexto, o Método de Lattice-Boltzmann (LBM) surge como uma ferramenta poderosa devido à sua capacidade de modelar escoamentos complexos com geometrias irregulares, permitindo a análise detalhada das forças hidrodinâmicas atuantes.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento e aplicação de um modelo numérico baseado no LBM para investigar a distribuição de forças hidrodinâmicas em partículas que compõem leitos porosos. O presente trabalho de cunho científico foca na análise das forças hidrodinâmicas que afetam as partículas componentes dos leitos porosos através de simulações computacionais, explorando a relação entre a estrutura dos leitos porosos e a distribuição de forças.

A metodologia adotada envolve a definição de domínios de estudo, parametrização das simulações e a implementação do modelo LBM com ênfase na análise das forças atuantes nas partículas componentes do leito que se encontram expostas ao escoamento livre. Resultados e discussões são apresentados para diferentes configurações de domínios porosos, demonstrando a capacidade do modelo em capturar as nuances do escoamento e fornecer uma compreensão mais profunda das interações fluido-partícula.

A contribuição deste trabalho estende-se além da aplicação única em leitos porosos, oferecendo um modelo para futuras investigações sobre escoamentos em meio porosos. A combinação do LBM com técnicas de análise proporciona uma ferramenta valiosa para o estudo de fenômenos fluidodinâmicos, abrindo caminho para novas aplicações em engenharia e ciência dos materiais.

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1. Métodos Numéricos em Fluidodinâmica Computacional

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) é uma área da mecânica dos fluidos que utiliza métodos numéricos e algoritmos para analisar e resolver problemas envolvendo fluxos de fluidos. Métodos comuns incluem o Método dos Volumes Finitos (FVM), o Método dos Elementos Finitos (FEM) e o Método das Diferenças Finitas (FDM), cada um com suas características e aplicações. Estes métodos considerados convencionais, são resolvidos a partir da equação de continuidade e de Navier-Stokes. Adicionalmente, pode-se incluir equações de energia e estado a depender do problema a ser resolvido (KRUEGER et al., 2016).

### 2.2. O Método das Diferenças Finitas

O Método das diferenças finitas é simples. Baseia-se em selecionar um conjunto de equações e substituir as derivadas por aproximações por diferenças finitas. Pode-se utilizar diferentes tipos de esquemas de diferenciação como *forward*, *backward* e *central*. Cada um dos esquemas tem vantagens e desvantagens e podem ser usados de forma combinada ao substituir os termos de uma equação (MAZUMDER, 2016a; KRUEGER et al., 2016).

### 2.3. O Método dos Volumes Finitos

O Método dos volumes finitos tem como premissa dividir um volume simulado  $V$  em pequenos volumes  $V_i$ , que podem ter diferentes formatos e tamanhos. No meio de cada volume existe um nó em que cada variável da solução é representada como a média dentro daquele volume. Este método é feito para resolver equações de conservação que são o tipo de equação que tipicamente se encontra em mecânica dos fluidos. Este é um método conservativo por design, ou seja massa e quantidade de movimento vão sempre ser conservados (MAZUMDER, 2016b; KRUEGER et al., 2016).

### 2.4. O Método Lattice Boltzmann

O Método Lattice Boltzmann (LBM) é um método numérico alternativo para a simulação de fluidos. Diferente dos métodos baseados diretamente nas equações de Navier-Stokes, o LBM baseia-se na mecânica estatística e simula o comportamento de populações de partículas sobre uma grade reticular (rede), proporcionando uma abordagem mesoscópica para a dinâmica dos fluidos.

No LBM, a dinâmica do fluido é descrita por uma função de distribuição de partículas, que evolui ao longo do tempo seguindo regras locais simples. Este método é particularmente eficaz para lidar com fenômenos complexos como fluxos turbulentos, interfaces fluido-fluido e padrões de fluxo em geometrias complicadas.

Uma das principais vantagens do LBM é a sua simplicidade e facilidade de implementação, especialmente em arquiteturas de computação paralela. Além disso, o LBM é altamente adaptável para simular fluxos em meios porosos, padrões de fluxo multifásicos e fenômenos de transferência de calor (BOON, 2003; KRUEGER et al., 2016).

## 3. METODOLOGIA

Nesta seção são apresentados os procedimentos metodológicos adotados na pesquisa, incluindo a definição dos domínios de estudo, a parametrização das simulações, a configuração do método de Lattice Boltzmann (LBM) e os critérios para análise dos resultados.

### 3.1. Definição dos Domínios

Foram definidos domínios de dimensões 400x800 unidades latticianas, especificamente domínios porosos que contêm partículas com raio de 10 unidades latticianas. Utilizou-se um total de quatro domínios, cada um com características de porosidade semelhantes, como descrito na Tabela 1.

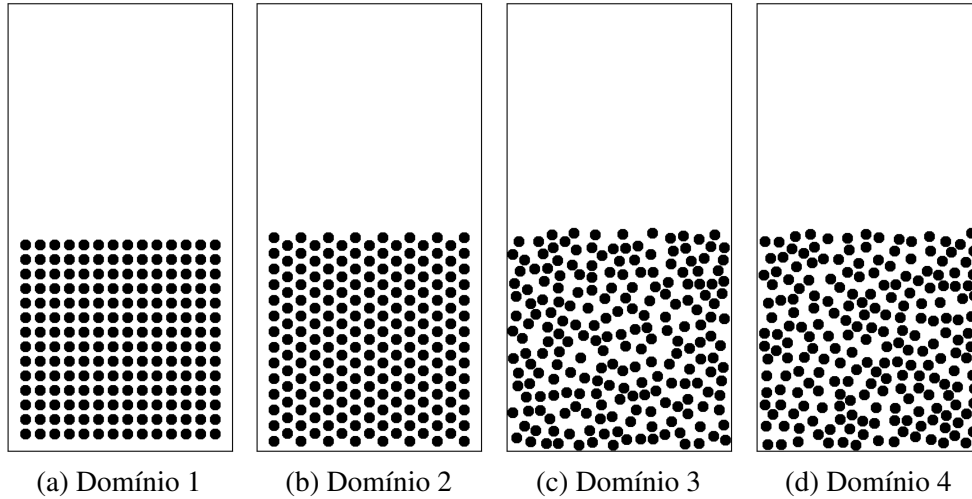
Tabela 1 – Porosidade dos Domínios

Domínio	Porosidade ( $\phi$ )
Domínio 1	0.626
Domínio 2	0.613
Domínio 3	0.599
Domínio 4	0.599

Devido a limitações numéricas na geração de domínio, não foi possível utilizar domínios com a mesma porosidade, entretanto a diferença máxima não ultrapassa

3%, tornado os efeitos de diferença de porosidade mínimos em relação a desordem dos domínios. A Figura 1 a seguir demonstra os 4 domínios gerados.

Figura 1 – Domínios gerados



Dentre estes domínios, dois apresentam alinhamento latticiano (Figuras 1a e 1b), sendo um com configuração quadrática e o outro com configuração triangular. Os dois domínios restantes (Figuras 1c e 1d) foram gerados utilizando uma função geradora aleatória da biblioteca PoresPy, oferecendo um interessante contraste em termos de distribuição e orientação espacial.

### 3.2. Diferenciação dos Domínios

Para diferenciar os domínios e para analisar as características do escoamento das partes porosas de cada domínio foram utilizadas transformadas de Hough e Fourier. Tal abordagem permitiu a quantificação e qualificação das diferenças entre os domínios de maneira sistemática.

#### 3.2.1. Transformada de Fourier

A transformada de Fourier foi utilizada para calcular a entropia nas partes porosas de cada domínio. Neste contexto, a entropia serve como uma medida quantitativa da desordem ou complexidade da estrutura porosa.

A transformada de Fourier em 2D é definida pela integral:

$$G(\xi, \eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) e^{-2\pi i(\xi x + \eta y)} dx dy \quad (3.1)$$

onde  $f(x, y)$  é a função imagem no domínio espacial e  $G(\xi, \eta)$  é a transformação no domínio da frequência, com  $\xi$  e  $\eta$  representando as frequências espaciais nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente.

Após a realização da transformada de Fourier, a magnitude espectral em cada ponto do domínio da frequência é calculada. A magnitude espectral, representada por  $|G(\xi, \eta)|$ , é obtida a partir da transformada de Fourier complexa  $G(\xi, \eta)$  e é dada pela fórmula:

$$|G(\xi, \eta)| = \sqrt{\Re\{G(\xi, \eta)\}^2 + \Im\{G(\xi, \eta)\}^2} \quad (3.2)$$

onde  $\Re\{G(\xi, \eta)\}$  e  $\Im\{G(\xi, \eta)\}$  são as partes real e imaginária de  $G(\xi, \eta)$ , respectivamente.

Para calcular a entropia (THUM, 1984) baseada na magnitude da transformada de Fourier, a seguinte equação foi utilizada:

$$H = - \sum_{\xi, \eta} |G(\xi, \eta)| \log |G(\xi, \eta)| \quad (3.3)$$

onde  $|G(\xi, \eta)|$  representa a magnitude da transformada de Fourier em cada ponto do domínio da frequência.

Utilizando das técnicas acima pode-se montar a Tabela 2 a seguir.

Tabela 2 – Entropia Calculada para Cada Domínio

Domínio	$H \times 10^5$
Domínio 1	8.08
Domínio 2	9.04
Domínio 3	13.00
Domínio 4	12.99

Fonte: o autor.

A análise dos valores de entropia proporciona insights diretos sobre as variações estruturais entre os domínios.

### 3.2.2. Transformada de Hough

A transformada de Hough é uma técnica utilizada para detecção de formas geométricas, comumente linhas, em imagens (DUDA; HART, 1972). Em vez de representar linhas na forma cartesiana, ela utiliza uma representação polar para evitar problemas com linhas verticais, onde o gradiente tende ao infinito (VAN DER WALT et al., 2014).

A representação cartesiana de uma linha é dada por:

$$y = mx + c \quad (3.4)$$

onde  $m$  é o gradiente e  $c$  é a interseção com o eixo  $y$ .

Na representação polar utilizada pela transformada de Hough, uma linha é descrita pelo raio  $r$  e o ângulo  $\theta$ , onde  $r$  é a distância da origem até a linha e  $\theta$  é o ângulo formado pela linha perpendicular que conecta a origem à linha. Esta representação pode ser expressa como:

$$r = x \cos \theta + y \sin \theta \quad (3.5)$$

Na prática, a transformada de Hough acumula votos em um espaço de parâmetros representado por uma matriz  $R \times \Theta$ , onde  $R$  é o número de possíveis valores para  $r$  e  $\Theta$  é o número de possíveis valores para  $\theta$  (VAN DER WALT et al., 2014). Para cada pixel não-nulo na imagem de entrada, consideramos todas as possíveis linhas (valores de  $r$  e  $\theta$ ) que passariam por esse pixel e incrementamos o contador na célula correspondente da matriz de parâmetros. As células com maior número de votos indicam a presença de uma linha na imagem original com os parâmetros  $r$  e  $\theta$  correspondentes.

Sendo assim, pode-se gerar um histograma de alinhamento para um domínio a partir dos ângulos da transformada. Os gráficos serão apresentados na seção de resultados.

### 3.3. Escolha do Modelo Numérico de Lattice Boltzmann

O modelo numérico de Lattice Boltzmann é escolhido em conjunto com o operador de colisão Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) e com o esquema de discretização D2Q9 devido a comprovada eficiência em problemas de natureza porosa (MENG et al., 2020).

Tais escolhas alinham-se com as tendências atuais em computação científica, aproveitando os avanços recentes em hardware de GPU, que são cada vez mais impulsionados por inovações em Inteligência Artificial (IA), para realizar simulações de fluidos com maior eficiência e precisão.

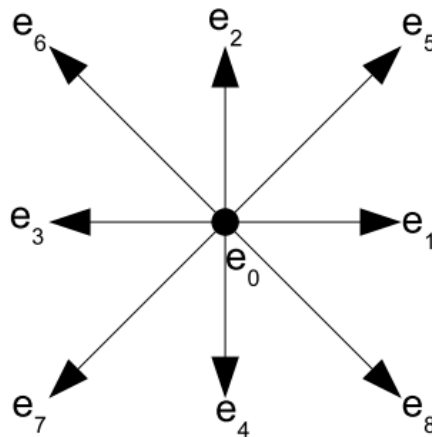
O LBM é altamente paralelizável, tornando-o adequado para implementação em GPUs. Estes dispositivos são capazes de realizar cálculos paralelos de forma eficiente. A capacidade de processamento paralelo das GPUs é utilizada para melhorar a eficiência e a velocidade das simulações LBM.

Para maximizar o desempenho da GPU, a biblioteca JAX NumPy é utilizada. Esta extensão do NumPy é projetada para execução em aceleradores de hardware, permitindo a execução automática de operações NumPy em GPUs. Além disso, o JAX oferece diferenciação automática, facilitando otimizações e análises numéricas avançadas nas simulações.

### 3.4. Descrição Matemática do Modelo Escolhido

O modelo é formulado sobre um reticulado discreto com uma distribuição de funções de densidade de partículas,  $f_i(\mathbf{x}, t)$ , onde  $i$  representa as direções discretas no reticulado, e  $\mathbf{x}$  e  $t$  denotam a posição e o tempo, respectivamente. No esquema D2Q9, cada nó do reticulado possui nove direções de velocidade, incluindo o repouso, conforme demonstra a Figura 2 abaixo.

Figura 2 – Os 9 vetores de velocidades  $e_i$  do modelo D2Q9



Fonte: Bresolin e Fiorot (2019).

Ao utilizar operador de colisão BGK, a função de distribuição evolui de acordo com a seguinte equação:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (3.6)$$

onde  $\mathbf{e}_i$  é o vetor de velocidade na direção  $i$ ,  $\Delta t$  é o passo de tempo,  $\tau$  é o tempo de relaxamento relacionado à viscosidade do fluido, e  $f_i^{eq}$  é a função de distribuição de equilíbrio (KRUEGER et al., 2016).

Sendo assim, a função de distribuição de equilíbrio no modelo é dada por:

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left( 1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right) \quad (3.7)$$

onde  $w_i$  são os pesos associados a cada uma das direções de discretização no esquema D2Q9,  $\rho$  é a massa específica local do fluido,  $\mathbf{u}$  é a velocidade macroscópica do fluido, e  $c_s$  é a velocidade do som no meio, que é escolhida como  $1/\sqrt{3}$ .

No esquema D2Q9, a partir de  $c_s$ , os pesos são definidos da seguinte maneira:

- Para a direção de repouso ( $i = 0$ ):  $w_0 = \frac{4}{9}$ .
- Para as direções ortogonais ( $i = 1, 2, 3, 4$ ):  $w_{1,2,3,4} = \frac{1}{9}$ .
- Para as direções diagonais ( $i = 5, 6, 7, 8$ ):  $w_{5,6,7,8} = \frac{1}{36}$ .

Esses pesos são escolhidos para manter a isotropia no reticulado e assegurar a correta simulação da dinâmica dos fluidos no modelo LBM.

### 3.5. Cálculo da Densidade e Velocidade Macroscópica

A massa específica do fluido  $\rho$  em cada nó do reticulado é calculada como a soma das funções de distribuição em todas as direções:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.8)$$

A velocidade macroscópica  $\mathbf{u}$  é calculada a partir das funções de distribuição e da massa específica do fluido:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_i \quad (3.9)$$

### 3.6. Cálculo de Forças em Elementos

No método Lattice Boltzmann, o cálculo de forças em elementos é realizado através da análise da diferença de quantidade de movimento das partículas interagindo com a parede, levando em conta a massa específica do fluido.

Consideramos as populações de partículas  $f_i$  no reticulado, onde cada  $f_i$  tem uma direção e magnitude associadas. Ao interagir com uma superfície, como uma parede, as partículas são refletidas ou absorvidas, alterando o estado do sistema. A força exercida pela parede pode ser calculada pela diferença de quantidade de movimento antes e depois da interação, multiplicada pela massa específica do fluido,  $\rho$ .

A diferença de quantidade de movimento,  $\Delta \mathbf{p}$ , é calculada como:

$$\Delta \mathbf{p} = \rho \sum_i (f_i^{out} - f_i^{in}) \mathbf{e}_i \quad (3.10)$$

onde  $f_i^{out}$  e  $f_i^{in}$  representam as funções de distribuição de partículas saindo e entrando na parede, respectivamente, e  $\mathbf{e}_i$  são os vetores de velocidade associados a cada direção no modelo de reticulado.

A força resultante sobre a parede é então dada por:

$$\mathbf{F} = \frac{\Delta \mathbf{p}}{\Delta t} \quad (3.11)$$

onde  $\Delta t$  é o intervalo de tempo considerado na simulação.

Esta abordagem, ao incluir a massa específica do fluido, permite o cálculo preciso das forças exercidas em superfícies sólidas em simulações de fluidos, sendo essencial para a análise de fenômenos como pressão e resistência de fluidos em objetos.

### 3.7. Implementação Numérica

A implementação numérica do modelo LBM com o operador BGK e o esquema D2Q9 envolve as seguintes etapas:

1. Inicialização das funções de distribuição,  $f_i(\mathbf{x}, t)$ , em todo o domínio computacional.
2. Cálculo da massa específica,  $\rho$ , e da velocidade macroscópica,  $\mathbf{u}$ , em cada nó do reticulado.
3. Atualização das funções de distribuição utilizando a equação de colisão BGK.
4. Aplicação de condições de contorno de *no-slip* nas paredes, utilizando o método de *bounce-back*.
5. Um campo de aceleração constante, na direção  $x$ , denominado  $\mathbf{a}_x$  é somado à velocidade macroscópica,  $\mathbf{u}$ , em cada nó, atualizando a velocidade para  $\mathbf{u}_{novo} = \mathbf{u} + \mathbf{a}_x$ . Isso simula uma diferença de pressão constante ao longo do domínio.
6. Avanço no tempo e repetição dos passos 2 a 5 até alcançar o estado estacionário ou o tempo final de simulação.

A convergência do modelo é verificada através do monitoramento de grandezas físicas relevantes, como a velocidade e pressão, ao longo das iterações.

## 4. RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados e discussões das simulações dos domínios descritos no capítulo anterior. Tem como objeto de estudo principal a distribuição de forças nos domínios e a análise do perfil de velocidades apresentado em cada um deles.

### 4.1. Análise do Perfil de Velocidades nos Domínios

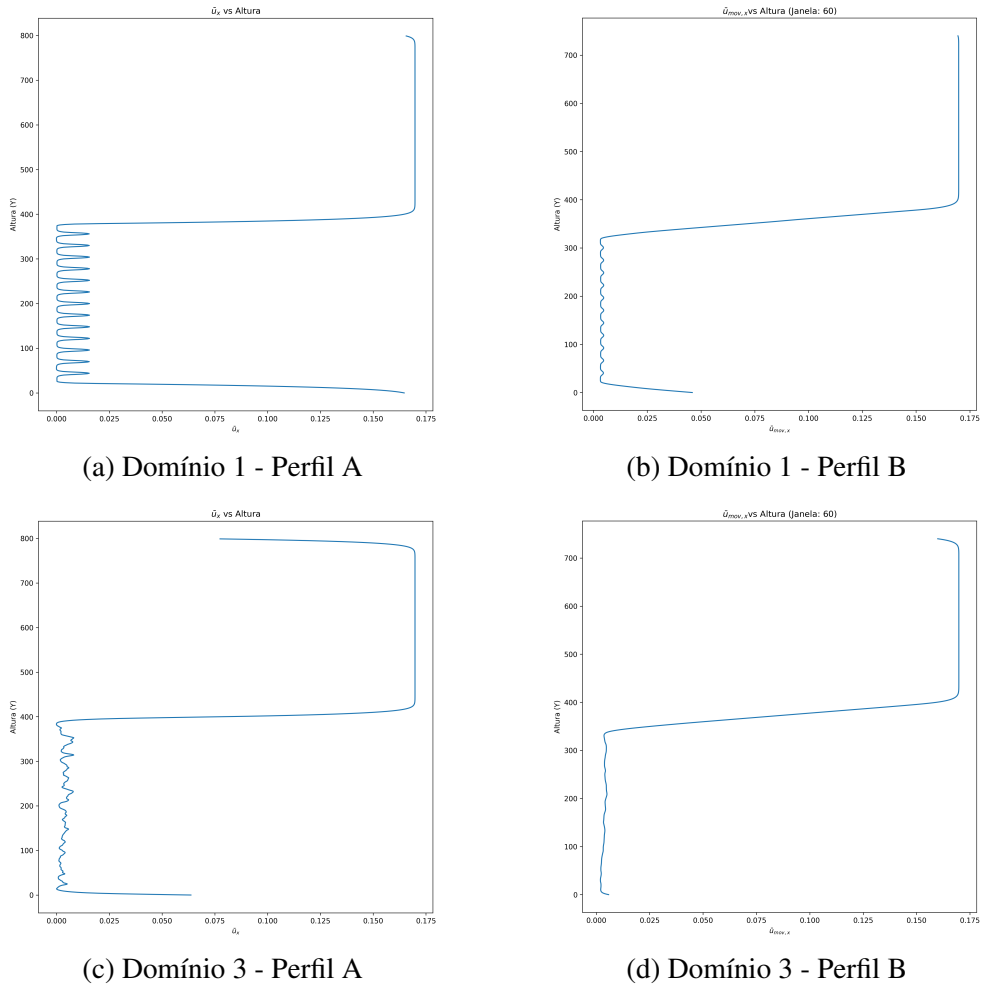
Nos domínios simulados, foram traçados perfis de velocidade utilizando a média da velocidade na direção  $x$ . Isso é dado pela seguinte equação:

$$\bar{u}_x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_{x,i} \quad (4.1)$$

onde  $\bar{u}_x$  é a média da componente da velocidade macroscópica na direção  $x$ ,  $N$  é o número de colunas na matriz, e  $u_{x,i}$  é a componente da velocidade em  $x$  na coluna  $i$ .

Além disso, uma média móvel<sup>1</sup> com uma janela de tamanho equivalente a 3 vezes o diâmetro dos elementos componentes do domínio poroso foi aplicada. A Figura 3 ilustra esses resultados para os domínios 1 e 3.

Figura 3 – Gráficos de perfil de velocidade. Os perfis denominados com A utilizam a média, os denominados com B utilizam média móvel com janela de 60 unidades latticianas.



Fonte: o autor.

Nas Figuras 3a e 3c, observa-se o perfil de velocidades, no eixo horizontal é possível visualizar a média das velocidades na direção  $x$  em função da coordenada  $y$ , que está disposta no eixo vertical. Identifica-se uma redução da velocidade próxima à interface. Os resultados são coerentes com soluções típicas encontradas para este tipo de escoamento (BRESOLIN; FIOROT; MINUSSI, 2022; STROHBECK; EGGENWEILER; RYBAK, 2023).

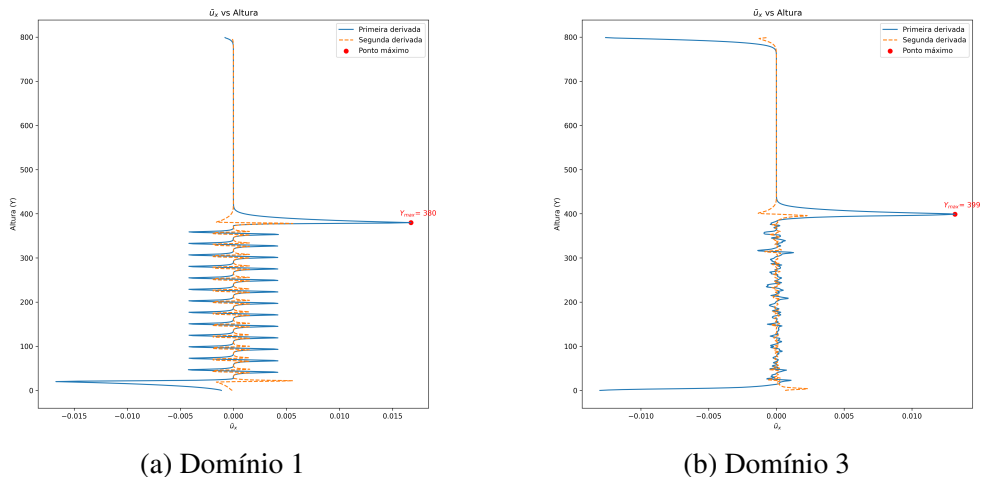
Pode-se evidenciar ainda as variações existentes no perfil na zona porosa. Estas variações são irregulares no domínio aleatório, conforme mostram as Figuras 3c e 3d. Já no domínio ordenado, essas variações são regulares, de forma que é possível recuperar os valores das distâncias entre os elementos componentes do meio poroso. Essa regularidade mostra caminhos preferenciais existentes.

<sup>1</sup> Dada por  $\bar{u}_x(m) = \frac{1}{3D} \sum_{k=-1.5D}^{1.5D} u_{x,m+k}$ , onde  $D$  é o diâmetro dos elementos do meio poroso.



A redução de velocidade é uma característica notável, pois demonstra a existência de uma interface clara entre a região porosa e a submetida ao escoamento livre. Essa interface demarca a transição nas condições de escoamento, refletindo o impacto da estrutura porosa no comportamento fluidodinâmico do sistema. Esse fato pode ser melhor observado pelos gráficos das derivadas dos perfis, conforme mostra a Figura 4.

Figura 4 – Derivadas do perfil de velocidades dos domínios 1 e 3, primeira derivada em azul e segunda derivada em laranja.



Fonte: o autor.

Na Figura 3, observa-se as derivadas dos perfis de velocidade. Nestes gráficos destaca-se os pontos de inflexão (onde ocorre a mudança de sinal de uma função) que ocorre próximo a interface entre o meio poroso e o escoamento livre. percebe-se que esse ponto de inflexão corresponde ao máximo da primeira derivada. Essa coordenada, em todos os casos, fica dentro do limite definido para o domínio poroso, ou seja, abaixo de 400 unidades latticianas.

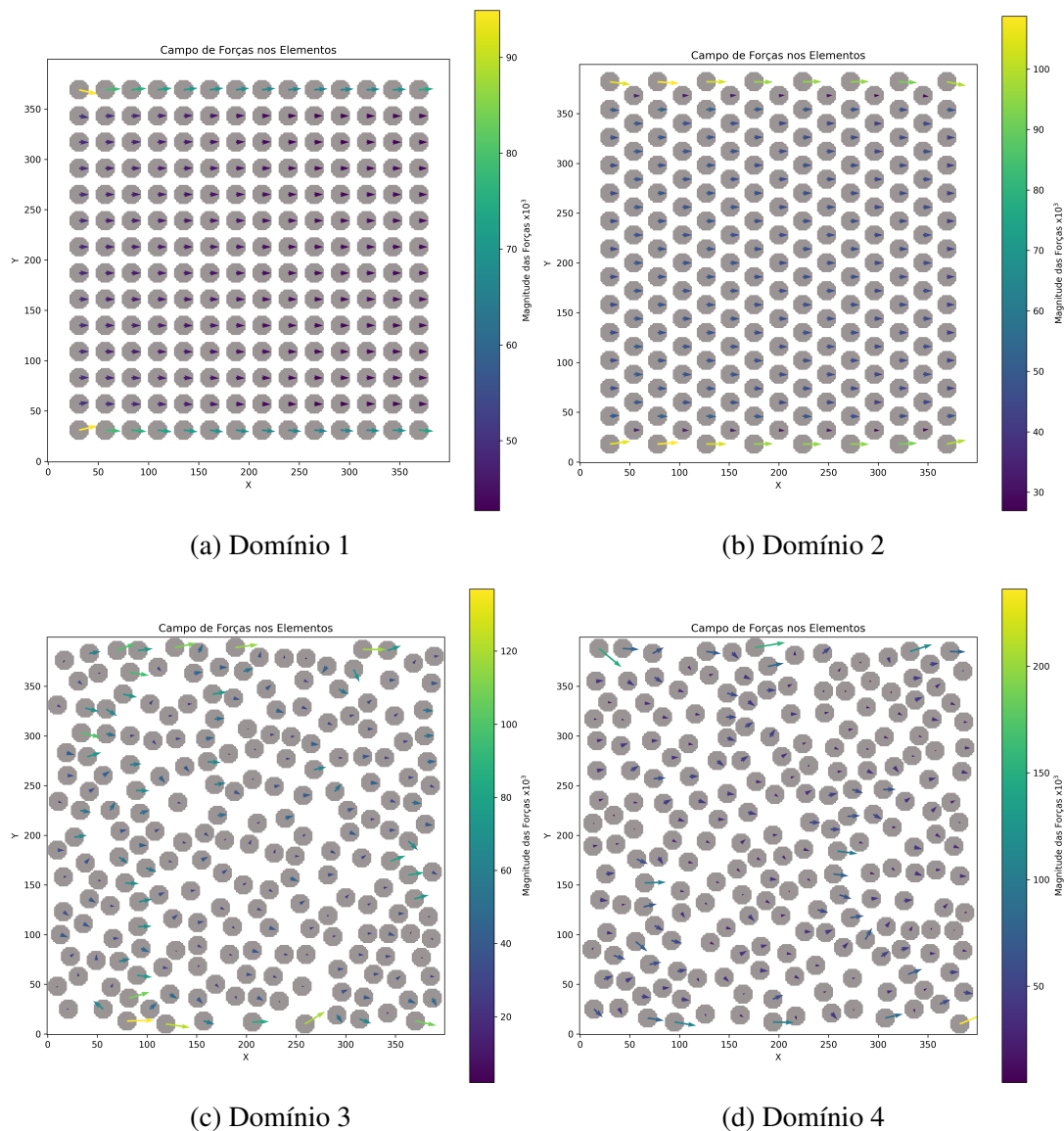
Devido a tais características, deve existir uma correlação entre como se distribuem as forças no domínio, tanto em relação à distância dessa interface delimitada pela transição de comportamento do perfil de velocidade quanto pela medida de desordem do domínio, seja por distâncias definidas ou medidas de entropia, por exemplo. Destaca-se especialmente a zona de transição dos perfis. As forças atuantes sobre estes elementos particulares do empacotamento podem apresentar comportamentos distintos nesta região em comparação com o restante do domínio.

#### 4.2. Análise das Forças nos Elementos do Empacotamento

Nesta seção, detalha-se a análise das forças atuantes nos domínios porosos estudados. Foca-se na distribuição das forças calculadas nos domínios, buscando uma relação entre seus valores, a distância da interface e a organização do domínio.

Conforme revelado pelos gráficos da Figura 3, a distribuição das forças atuantes nos elementos constituintes do meio poroso próximos a região onde existe escoamento livre, é diferente do resto do domínio conforme demonstra a Figura 5. Pode-se perceber em todos os domínios que os elementos mais próximos da interface apresentam uma distribuição diferente daqueles que se encontram distantes da interface. Esses elementos podem ser considerados como a camada mais ativa do meio poroso.

Figura 5 – Vetores de forças nos elementos constituintes do meio poroso.



Fonte: o autor.

Observa-se na Figura 5 um aumento na atividade dinâmica na camada mais superficial, possivelmente devido à influência direta do escoamento livre. Pode-se perceber que as partículas a esquerda nos domínios ordenados nas Figuras 5a e 5b, sofreram forças maiores, o que deve ser causado pela distribuição da parte porosa nos domínios. Como a condição de contorno é periódica, a existências dos espaços a direita e a esquerda das Figuras 5a e 5b permitem com que exista uma aceleração do fluido antes de seu contato com o início do domínio novamente, causando esse aumento da força observado.

Adicionalmente, ao analisar as Figuras 5a e 5b referentes aos dois domínios ordenados, e as Figuras 5c e 5d, oriundas dos domínios gerados aleatoriamente, constatou-se uma variação distinta ao comparar domínios ordenados com domínios aleatórios. Nos domínios ordenados, as forças na interface apresentam uma variação menos pronunciada, diferentemente dos padrões nos domínios aleatórios. Tal diferença pode estar relacionada à disposição estrutural regular nos domínios ordenados, alterando a distribuição e a experiência das forças pelas partículas. Por

outro lado, os domínios aleatórios parecem exibir um perfil de forças não uniforme ao longo da interface.

Para aprofundar a análise, selecionaram-se os 50 elementos mais próximos da interface. A Figura 6 demonstra os procedimentos descritos a seguir. Inicialmente calculou-se a força média atuante nos elementos ( $\bar{F}$ ). A média é calculada de acordo com a equação:

$$\bar{F} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n F_i \quad (4.2)$$

onde  $N$  representa o número total de elementos e  $F_i$  é a força atuante no  $i$ -ésimo elemento. Em seguida, calculou-se uma média móvel com janela de 5 elementos para suavizar variações e identificar tendências nas forças. A média móvel é calculada de acordo com a equação:

$$\bar{F}_{\text{mov},i} = \frac{1}{x} \sum_{j=i-4}^i F_j \quad (4.3)$$

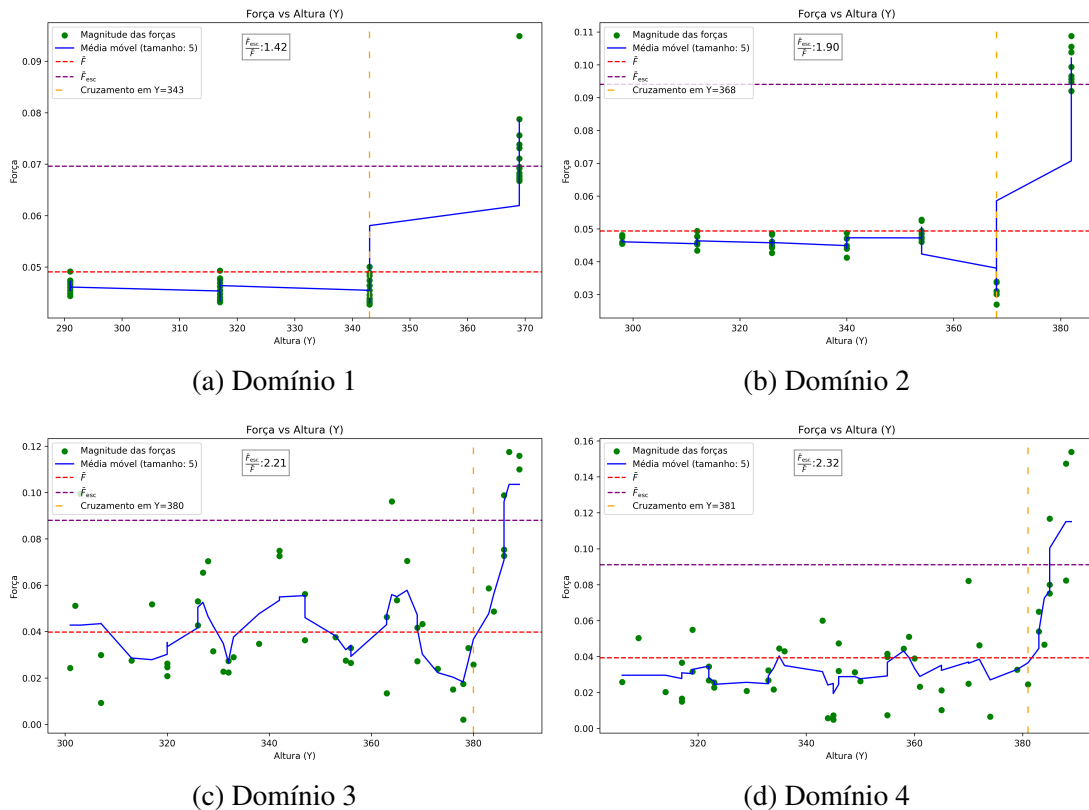
onde  $F_j$  representa a força no  $j$ -ésimo elemento, e  $i$  é o índice atual do elemento considerado.

O cruzamento entre  $\bar{F}_{\text{mov}}$  e  $\bar{F}$  (linhas azul e laranja, respectivamente), na Figura 6, indicou os elementos expostos diretamente ao escoamento livre. Tal identificação é crucial para compreender quais elementos são mais influenciados pelas dinâmicas do escoamento livre e desempenham um papel significativo na interação fluido-partícula. Com os elementos indicados, calculou-se a força média neles  $\bar{F}_{\text{esc}}$  e em seguida a razão descrita através da equação:

$$R = \frac{\bar{F}_{\text{esc}}}{\bar{F}} \quad (4.4)$$

Todos os passos descritos acima podem ser observados na Figura 6 a seguir.

Figura 6 – Análise dos elementos próximos à interface. No eixo das abscissas estão as coordenadas de altura  $y$ , no eixo das ordenadas se encontram as magnitudes das forças atuantes em cada elemento.



Fonte: o autor.

Com os elementos considerados expostos diretamente ao escoamento livre, posicionados a direita da linha amarela na Figura 6, a qual indica a posição  $y$  em que ocorre o cruzamento entre  $\bar{F}_{mov}$  e  $\bar{F}$ , calculou-se a média de de forças neles ( $\bar{F}_{esc}$ ), indicada pela linha roxa. Além disso, obteve-se a razão descrita pela equação 4.4, os dados são dispostos juntamente com a entropia ( $H$ ) dos domínios na Tabela 3.

Tabela 3 – Entropia Calculada para Cada Domínio

Domínio	$H \times 10^5$	$\bar{F} \times 10^2$	$\bar{F}_{esc} \times 10^2$	$R$
Domínio 1	8.07	4.90	6.96	1.42
Domínio 2	9.04	4.94	9.40	1.92
Domínio 3	13.00	3.98	8.80	2.21
Domínio 4	12.99	3.92	9.10	2.32

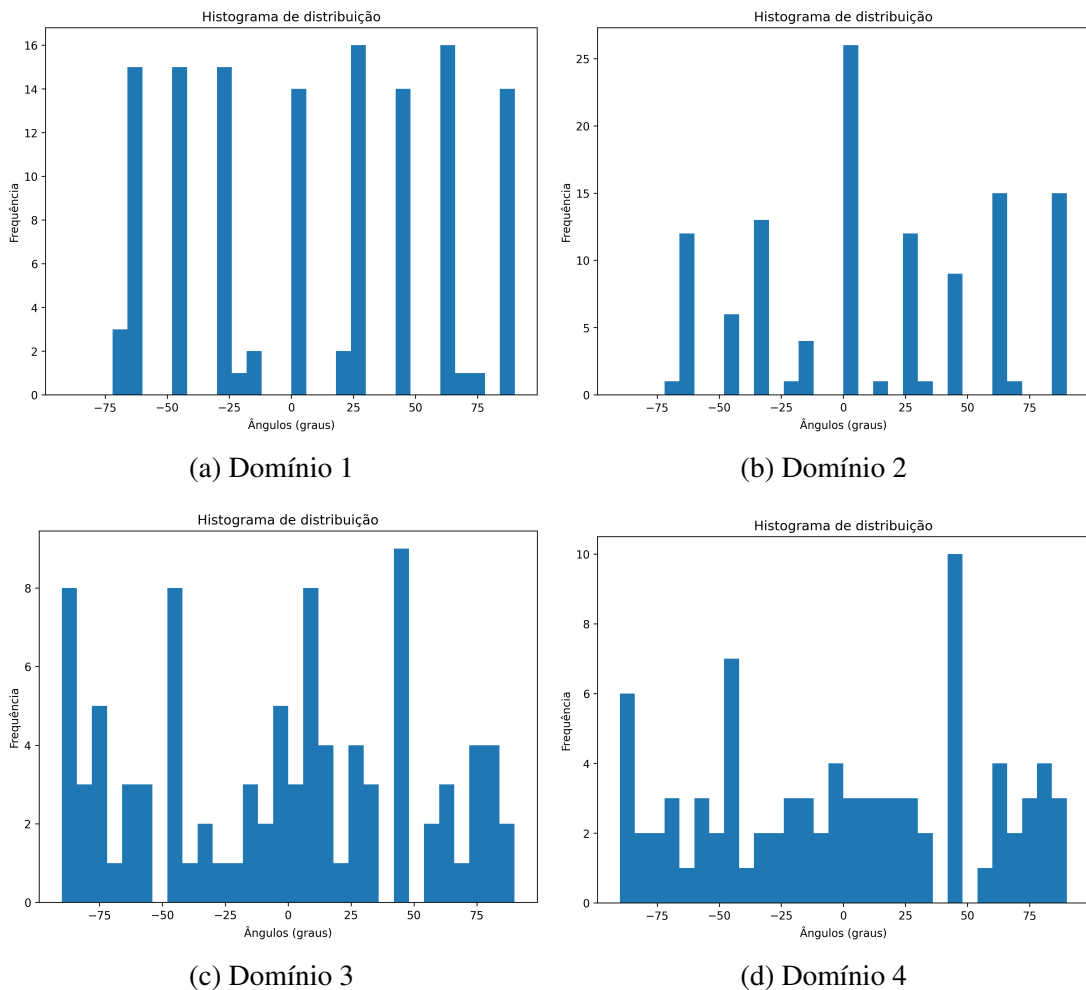
Fonte: o autor.

Na Tabela 3, apresentada acima, observa-se uma relação entre o aumento da entropia e a organização dos domínios. Conforme a entropia aumenta, a razão entre  $\bar{F}_{esc}$  e  $\bar{F}$  parece aumentar quando se considera somente domínios ordenados versus desordenados. Para traçar uma relação objetiva seriam necessários mais domínios com um aumento de entropia controlado.

Por fim, ainda podemos fazer uma análise qualitativa com os histogramas da Figura 7. Ao observar os picos dos ângulos, ou seja, verificando se existem caminhos preferenciais.

Com as transformadas de Hough aplicadas em cada domínio, pode-se gerar um histograma da angulação. Este histograma oferece uma visualização qualitativa das diferenças estruturais entre os domínios, com foco no alinhamento e orientação dos elementos constituintes do leito poroso. Utilizaram-se 30 buckets com valores de  $-90$  até  $90$  graus para gerar o histograma. A Figura 7 demonstra os resultados obtidos.

Figura 7 – Histogramas de frequências das angulações da transformadas de Hough. No eixo horizontal a angulação e no vertical frequência.



Fonte: o autor.

Na Figura 7 acima, pode-se perceber que existem alguns ângulos que possuem uma frequência maior em cada um dos domínios. Nos domínios ordenados, 1 e 2, essa preferência por alguns ângulos é bastante clara, o que reflete o alinhamento dos elementos constituintes do leito poroso. Já nos domínios gerados aleatoriamente, esse padrão não é observado. Podemos ver nas Figuras 7c e 7d que existem algumas angulações que possuem uma frequência mais elevada, mas não existe um espelhamento como ocorre nas Figuras 7a e 7b, além de haver uma distribuição maior nos outros ângulos.

Com isso pode-se dizer que parece haver relações entre a organização dos domínios quanto a caminhos preferenciais e como as forças se distribuem nele. Ao aumentar a quantidade destes caminhos preferenciais as forças parecem se distribuir melhor entre os elementos constituintes do meio poroso. Apesar disso, esta avaliação deve ser tomada como qualitativa, a metodologia utilizada não permite traçar relações diretas e objetivas.

## 5. CONCLUSÃO

Neste estudo foram definidos 4 domínios que simulam leitos porosos com diferentes configurações de ordenamento e entropia. Com eles definidos, um modelo LBM foi aplicado utilizando diferença de pressão constante e os resultados foram processados e analisados. Foram observadas características distintas no escoamento e na distribuição das forças dependendo da estrutura dos domínios porosos.

Foi utilizado um modelo bidimensional, que representa uma simplificação para permitir que a construção do modelo fosse realizada de forma mais ágil, pois desta forma ele reduz a solicitação do hardware utilizado. A tridimensionalização do modelo em trabalhos futuros pode contribuir na análise dos domínios propostos, juntamente com a adição de uma gama maior de domínios com variados valores de entropia.

As análises dos perfis de velocidade demonstraram uma redução significativa da velocidade próximo à interface entre a região porosa e o escoamento livre, indicando uma clara transição nas condições de escoamento. Esta observação é reforçada pelas derivadas dos perfis de velocidade, que destacam a demarcação desta interface.

Os elementos mais próximos da interface apresentaram interações dinâmicas acentuadas, diferenciando-se do resto do domínio. Nos domínios aleatórios, notou-se uma variação mais pronunciada nas forças na interface, em comparação com os domínios ordenados, sugerindo uma influência da regularidade estrutural na distribuição das forças.

Em suma, este estudo contribui para a compreensão da dinâmica de escoamento em meios porosos, destacando a influência da organização estrutural na distribuição de forças e na dinâmica fluido-partícula. Embora a relação entre entropia e distribuição de forças não seja linear ou direta, os resultados indicam que a estrutura dos domínios porosos afeta significativamente o comportamento do escoamento.

## REFERÊNCIAS

- BOON, J. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. **European Journal of Mechanics - B/Fluids**, v. 22, p. 101, jan. 2003.
- BRESOLIN, C. S.; FIOROT, G. H. Permeability correlations for non-Newtonian fluids in ordered porous media using the lattice Boltzmann Method. **COBEM, Uberlândia, Brasil**, 2019.
- BRESOLIN, C. S.; FIOROT, G. H.; MINUSSI, R. B. Power-law Fluid Flow Behavior on Porous Media Interface. **ENCIT, Bento Gonçalves, Brasil**, 2022.
- DUDA, R. O.; HART, P. E. Use of the Hough Transformation to Detect Lines and Curves in Pictures. **Commun. ACM**, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, v. 15, n. 1, p. 11–15, jan. 1972. ISSN 0001-0782. DOI: 10.1145/361237.361242. Disponível em: <<https://doi.org/10.1145/361237.361242>>.

- KRUEGER, T. et al. **The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice**. [S.l.]: Springer, 2016. (Graduate Texts in Physics). ISBN 978-3-319-44647-9.
- MAZUMDER, S. The Finite Difference Method. In: [s.l.]: Elsevier, 2016. P. 51–101. DOI: 10.1016/B978-0-12-849894-1.00002-0.
- \_\_\_\_\_. The Finite Volume Method (FVM). In: [s.l.]: Elsevier, 2016. P. 277–338. DOI: 10.1016/B978-0-12-849894-1.00006-8.
- MENG, X. et al. Simulating flow in porous media using the lattice Boltzmann method: Intercomparison of single-node boundary schemes from benchmarking to application. **Advances in Water Resources**, v. 141, p. 103583, jul. 2020. ISSN 03091708. DOI: 10.1016/j.advwatres.2020.103583.
- STROHBECK, P.; EGGENWEILER, E.; RYBAK, I. A Modification of the Beavers–Joseph Condition for Arbitrary Flows to the Fluid–porous Interface. **Transport in Porous Media**, v. 147, p. 605–628, 3 abr. 2023. ISSN 0169-3913. DOI: 10.1007/s11242-023-01919-3.
- THUM, C. Measurement of the Entropy of an Image with Application to Image Focusing. **Journal of Modern Optics**, v. 31, p. 203–211, 1984. Disponível em: <<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:121003970>>.
- VAN DER WALT, S. et al. scikit-image: image processing in Python. **PeerJ**, PeerJ Inc., v. 2, e453, 2014.