

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
COORDENAÇÃO DE ENGENHARIA MECÂNICA
CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA

FELIPE NASCIMENTO DE ANDRADE

**SISTEMÁTICA DE OBTENÇÃO DE MÉTODOS DE LATTICE
BOLTZMANN PELO MÉTODO DAS ABCISSAS PRESCRITAS**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

GUARAPUAVA

2016

FELIPE NASCIMENTO DE ANDRADE

**SISTEMÁTICA DE OBTENÇÃO DE MÉTODOS DE LATTICE
BOLTZMANN PELO MÉTODO DAS ABCISSAS PRESCRITAS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à disciplina Trabalho de Conclusão de Curso II do Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Tecnológica Federal do Paraná como requisito parcial para aprovação.

Orientador: Prof. Dr. Christian Naaktgeboren

Co-orientador: Profa. Dra. Raquel da Cunha Ribeiro da Silva

GUARAPUAVA

2016



TERMO DE APROVAÇÃO

SISTEMÁTICA DE OBTENÇÃO DE MÉTODOS DE LATTICE
BOLTZMANN PELO MÉTODO DAS ABCISSAS PRESCRITAS

por

FELIPE NASCIMENTO DE ANDRADE

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi apresentado em 22 de junho de 2016 como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica. O candidato foi arguido pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

Dr. Christian Naaktgeboren
Prof. Orientador

Dr.^a Raquel da Cunha Ribeiro da Silva
Membro Titular

Dr. Antonio Carlos A. F. Jr.
Membro titular

Dr.^a Raquel da Cunha Ribeiro da Silva
Coordenadora do curso de Engenharia Mecânica

- O Termo de Aprovação assinado encontra-se na Coordenação do Curso -

Dedico este trabalho à minha avó dona Almerinda Alves do Nascimento. Minha querida avó, uma Santa na terra, um pilar onde posso me apoiar, uma montanha onde posso me resguardar, um coração enorme de onde posso retirar todo amor do mundo. Minha linda avó, não só este trabalho mas sim toda a minha vida eu dedico à ti.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus pela força, determinação, perseverança e discernimento concedidos em cada etapa da minha formação. Em segundo lugar, agradeço à minha mãe pelos ensinamentos que ela me forneceu, de forma direta ou indireta, ao longo da minha jovem vida. Foram tantas experiências, adaptações, desafios e alegrias que vivi com ela, as quais foram fundamentais para a contínua construção da minha personalidade e psicológico. Este último, que tanto me ajudou durante todos estes anos de estudo e me ajudará nos que virão.

Também gostaria de deixar aqui o agradecimento a outras duas pessoas que merecem todo o meu reconhecimento e admiração que são minha avó Almerinda, e minha tia Josy. As duas comportaram-se como combustível para o motor do meu pensamento, motivação para cada noite de estudo. Todas as pessoas que citei acima, me ajudaram financeira e moralmente durante todo o meu caminho.

Por último, dentre muitas pessoas as quais foram fundamentais para minha formação, agradeço ao meu orientador Christian por tanto conhecimento passado e paciência com minhas dúvidas, aos meus amigos da minha cidade natal, Mirante do Paranapanema, e a toda a minha família. À todos o meu muito obrigado, e este trabalho, como se fala na Espanha, vá por vocês!

RESUMO

NASCIMENTO, Felipe. Sistemática de obtenção de métodos de lattice Boltzmann pelo método das abcissas prescritas. 84 f. Trabalho de Conclusão de Curso – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Guarapuava, 2016.

Os métodos de lattice Boltzmann, LBM, são um conjunto de métodos numéricos para simulação de fenômenos de transporte que podem ser baseados na discretização da equação de Boltzmann, a qual governa a evolução da função de distribuição de probabilidades de partícula única, em termos de velocidade microscópica e posição no tempo. Os métodos de lattice Boltzmann utilizam retículos espaciais cujos nós $\{\vec{x}_j\}$ representam o conjunto de posições discretas associadas a um conjunto finito de velocidades microscópicas $\{\vec{\xi}_j\}$ discretas e suas respectivas probabilidades $f(\vec{x}_j, \vec{\xi}_j)$. Em geral, quanto maior o número j de velocidades microscópicas discretas para cada localização \vec{x}_j , maior é a ordem de aproximação de $f(\vec{x}_j, \vec{\xi}_j)$. Visto que quantidades macroscópicas primárias e suas respectivas derivadas são obtidas por momentos de f de ordem crescente no espaço de velocidades, nos métodos de lattice Boltzmann, refinamentos do conjunto de velocidades microscópicas discretas levam à solução de mais físicas pelo esquema numérico. Esta característica, sem equivalente nos métodos baseados em formulações macroscópicas dos fenômenos de transporte motiva a obtenção e exploração de diversos métodos de lattice Boltzmann baseados em retículos de diferentes configurações. A presente proposta de pesquisa tem por objetivo a investigação da sistemática de Philippi et al. (2006) para derivação de *stencils* de lattice Boltzmann para um dado retículo espacial e conjunto de velocidades associado, através da discretização da equação de Boltzmann usando projeções em bases de Hermite. Esses *stencils* são conjuntos de pesos de quadratura, velocidade do som, escala de velocidade e as velocidades do próprio retículo de lattice Boltzmann e usa-se o mesmo como parâmetro de entrada nos métodos de lattice Boltzmann. Como requisito de exatidão na advecção, o qual objetiva evitar difusão numérica nos resultados da simulação, as velocidades devem se encaixar exatamente em uma rede de Bravais de dimensão n com b velocidades, ou seja, todas as velocidades devem ser uma combinação linear de coeficientes inteiros de outras. Uma vez validada, almeja-se com a sistemática derivar métodos de alta ordem de lattice Boltzmann. A validação da sistemática ocorrerá por meio de comparações com métodos de baixa e média ordem encontrados na literatura.

Palavras-chave: Métodos de lattice Boltzmann. *Stencil*. Abcissas prescritas. Tensores de Hermite. Equação de Boltzmann.

ABSTRACT

NASCIMENTO, Felipe. Systematics of obtaining methods of lattice Boltzmann method for the prescribed abscissae. 84 f. Trabalho de Conclusão de Curso – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Guarapuava, 2016.

The lattice Boltzmann methods, LBM, are a set of numerical methods for simulation of transport phenomena which may be based in the discretization of Boltzmann equation, which governs evolution of probability distribution function of single particle, in terms of microscopic velocities and position in the time. Lattice Boltzmann methods uses spacial lattices whose nodes $\{\vec{x}_i\}$ represents the set of discrete positions associate to a finite set of microscopic discrete velocities $\{\vec{\xi}_i\}$ and their respective probabilities $f(\vec{x}_i, \vec{\xi}_i)$. In general, the greater the number j of microscopic discrete velocities for each localization \vec{x}_i , the higher the order of approximation of $f(\vec{x}_i, \vec{\xi}_i)$. Since primary macroscopic quantities and their respective derivatives are obtained by crescent order moments of f in the velocities space, in the lattice Boltzmann methods, microscopic discrete velocities assembly refinements lead to solution of more physics by numerical scheme. This feature, without equivalent in methods based on macroscopic formulations of transport phenomena motivates the acquisition and exploration of various methods of lattice Boltzmann based on lattices of different configurations. The proposed research aims to investigate the systematic Philippi et al. (2006) to bypass *stencils* lattice Boltzmann for a given space reticulum and its associated speeds through the discretization of the Boltzmann equation using Hermite projections bases. These *stencils* are sets of quadrature weights, speed of sound, speed scale and speed of the lattice lattice Boltzmann own and uses it as an input parameter in the methods of lattice Boltzmann. As accuracy requirement in the advection, which aims avoid numerical diffusion in the simulation results, the velocities should exactly fit in a lattice n dimensional with b velocities, so, all velocities should be a linear combination of integer coefficients other. Once validated, aims with the systematic derive higher order lattice Boltzmann methods. The systematic validation It occurred through comparisions with low and medium order methods found in the literature.

Keywords: Lattice Boltzmann methods. *Stencil*. Prescribed Abscisae. Hermite's Tensors. Boltzmann Equation.

LISTA DE SIGLAS

BBGKY	Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon
BGK	Bhatnagar-Gross-Krook
LBE	Lattice Boltzmann Equation
LBM	Lattice Boltzmann Methods
LGA	Lattice Gas Automata
MDF	Método das diferenças finitas
MVF	Método dos volumes finitos

LISTA DE SÍMBOLOS

P_{ij} Tensor P de segunda ordem

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	DINÂMICA MOLECULAR	19
3	TEORIA CINÉTICA	28
4	TEORIA DE LATTICE BOLTZMANN	42
4.1	EXEMPLO D2Q9	50
5	CONCLUSÃO	61
	REFERÊNCIAS	63
	Apêndice A – TENSORES	66
	Apêndice B – APLICAÇÕES DE HERMITE	72
B.1	INTERPOLAÇÃO DE HERMITE	72
B.2	POLINÔMIOS DE HERMITE	73
B.2.1	UNIDIMENSIONAIS	73
B.2.2	MULTIDIMENSIONAIS	76
	Anexo A – ALGORITMO PARA OBTENÇÃO DE POLINÔMIOS DE HERMITE	
	TENSORIAIS	78
A.1	FÍSICOS	78
A.2	PROBABILÍSTICOS	81

1 INTRODUÇÃO

O entendimento do comportamento físico do mundo ao nosso redor sempre foi de interesse para a humanidade. As pessoas, desde a antiguidade, já estavam conscientes da regularidade da natureza. Desde Ptolomeu e suas primeiras observações de padrões no universo, óptica e musica; passando por Isaac Newton, o cálculo e a dinâmica dos movimentos; C. F. Gauss e sua contribuição formidável na análise matemática; L. Boltzmann e seus estudos em termodinâmica estatística; até A. Einstein e a teoria da relatividade, o conhecimento vem evoluindo de modo a atender as necessidades da humanidade.

Na difícil tarefa do desenvolvimento humano vários desafios aparecem, dentre eles a descrição e modelagem de problemas de engenharia que envolvem fenômenos da natureza. Nesse contexto, a matemática computacional apareceu como uma grande ferramenta no auxílio de resolução de tais problemas por meio de simulação numérica. Atualmente a maior parte de simulações numéricas de fenômenos de transporte de engenharia é feita por meio de softwares de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) os quais tradicionalmente implementam métodos baseados em formulações macroscópicas dos fenômenos de interesse, a exemplo de volumes finitos, e que são baseados em equações escritas em termos de quantidades macroscópicas.

Os métodos de Lattice Boltzmann fornecem uma alternativa às tradicionais análises CFD. Métodos de Lattice Boltzmann implementam equações cinéticas que descrevem o nível mesoscópico de um sistema de partículas e, a partir de uma média provável de quantidades microscópicas, consegue-se recuperar quantidades macroscópicas do fenômeno de interesse. O nível mesoscópico de um sistema é o nível intermediário entre o microscópico e o macroscópico.

Os alicerces dos métodos de LBM estão no limite da mecânica clássica. Para a correta aplicação do método é fundamental entender o conteúdo físico da equação de Boltzmann e com isso fazer a ligação de quantidades macroscópicas com as equações micro dinâmicas do movimento (MOORE, 2010).

A compreensão da equação de Boltzmann envolve conhecimentos de dinâmica mo-

lecular e teoria cinética. Estas últimas, por sua vez, estudam o comportamento microscópico de um sistema de partículas. Desta forma métodos de lattice Boltzmann unificam análises macroscópicas e microscópicas em um nível de modelagem intermediário, também chamado mesoscópico, que trata sobre a mecânica estatística do não equilíbrio. De acordo com Shan et al. (2006) a principal tarefa da mecânica estatística do não equilíbrio é deduzir a evolução de um estado macroscópico de um sistema físico a partir do conhecimento e entendimento da dinâmica microscópica.

O precursor do LBM é o modelo chamado retículo de gases autômatos, LGA (*Lattice Gas Automata*), no qual o fluido é tratado como um conjunto de partículas residindo em um retículo regular com algumas propriedades simétricas (GUO; SHU, 2013).

O primeiro modelo LGA, formulado em 1973, é atribuído aos cientistas franceses Hardy Pomeau e de Pazzis que revolucionaram a comunidade na época utilizando um modelo sobre um retículo quadrado bidimensional no qual cada partícula interage com seus vizinhos mais próximos. Em 1986, um segundo modelo descoberto por Frisch, Hasslacher e Pomeau foi proposto onde um retículo hexagonal se aplicaria na modelagem inicial de 1973.

A partir de modelos LGA, em 1988 McNamara e Zanetti foram os pioneiros em propor um método computacional para resolução da equação de Boltzmann. A ideia inicial foi a substituição do termo booleano n_i , utilizado anteriormente pela comunidade científica e que representa apenas dois estados, por uma função distribuição de probabilidades discreta f_i a qual reduziria o ruído estatístico, porém, tornava o operador de colisão C_i ainda mais complexo (GUO; SHU, 2013).

Em 1989, Higuero e Jimenez, propuseram um modelo que relacionava a função distribuição de probabilidades discretas f_i com uma expansão da função distribuição de equilíbrio de Fermi-Dirac discreta.

Depois de inúmeros estudos, foi em 1991, que Chen, Koelman e Qian desenvolveram um modelo que facilitava a abordagem da colisão do LGA que posteriormente foi aperfeiçoado por Bhatnagar-Gross-Krook e acoplado ao modelo MZ e que fornece, nos dias de hoje, o modelo de lattice Boltzmann (GUO; SHU, 2013):

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau_c} [f_i - f_i^{eq}]. \quad (1)$$

O modelo de lattice Boltzmann é usado para aproximar a solução da equação de Boltzmann, f que é uma função distribuição de probabilidades, através da função distribuição de probabilidades discretas f_i (GUO; SHU, 2013).

Os métodos de lattice Boltzmann citados acima foram derivados através de expansões em série de Taylor e posterior quadratura de Gauss-Hermite afim de obter momentos de velocidades.

Apesar da relevância das derivações, já que estão fundamentadas em um vasto histórico de estudos, Shan et al. (2006), Philippi et al. (2006) e Mattila et al. (2014) mostraram recentemente que métodos de lattice Boltzmann podem ser obtidos sistematicamente por meio da discretização da equação de Boltzmann em bases de Hermite.

Segundo Guo e Shu (2013), algumas vantagens interessantes dos métodos de lattice Boltzmann em relação ao CFD são: simulação mais clara e precisa de colisões de partículas fluidas, paralelismo natural na programação, fácil implementação de condições iniciais e de contorno e possibilidade de aplicação em fenômenos mais complexos, a exemplo de escoamentos fluidos imiscíveis e multifásicos.

Para resolver a equação de Boltzmann de forma numérica os métodos de lattice Boltzmann são utilizados (GUO; SHU, 2013). Esses métodos baseiam-se na expansão e posterior truncamento da função distribuição de equilíbrio de um sistema de n partículas. Na expansão os parâmetros necessários são os pesos w_i , o vetor velocidade de lattice $\vec{\xi}$ e a dimensão (SHAN et al., 2006). Além disso, para a aplicação de métodos de lattice Boltzmann é necessária a obtenção da velocidade do som c_s , ou velocidade referencial térmica c_T do método (MATTILA et al., 2014). O conjunto $W_i, \vec{\xi}, c_s$ e D denomina-se stencil de lattice Boltzmann.

Na figura (1) observa-se o stencil $DnQb$ onde $n = 2$ é a dimensão (bidimensional) e $b = 5$ número de velocidades (velocidade nula no centro). À i -ésima velocidade (flecha) é associada um peso de quadratura, W_i , utilizado na aproximação da integral dos momentos de velocidades a partir dos quais obtém-se a função distribuição de equilíbrio do método e, conseqüentemente, as variáveis macroscópicas presentes nas equações (2)-(9).

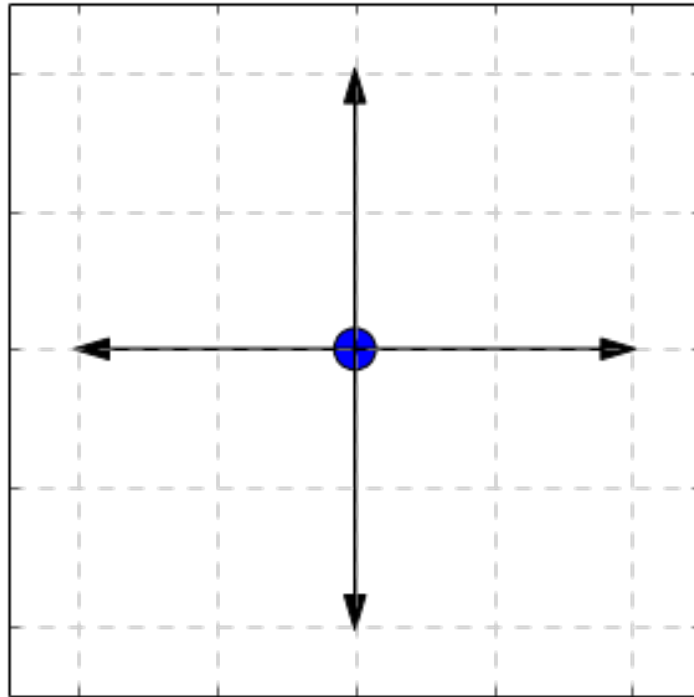


Figura 1: stencil D2Q5.

Fonte: autoria própria.

Uma vez resolvida a equação de Boltzmann, todas as variáveis macroscópicas do sistema podem ser obtidas a partir de f (GUO; SHU, 2013), computando-se os seus momentos no espaço de velocidades:

Densidade:

$$\rho = \int f d\vec{\xi}, \quad (2)$$

Quantidade de movimento:

$$\rho \vec{u} = \int \vec{\xi} f d\vec{\xi}, \quad (3)$$

onde, \vec{u} representa a velocidade do sistema fluido como um todo em relação à uma referencial fixo, $\vec{\xi}$ é a velocidade da partícula em relação à um referencial que se desloca com o fluido e com isso, podemos definir a velocidade do fluido em relação à uma referencial fixo, dada por:

$$\vec{c} = \vec{\xi} - \vec{u}. \quad (4)$$

Energia interna:

$$\rho e(\vec{x}, t) = \int \frac{c^2}{2} f d\vec{\xi}. \quad (5)$$

Tomando $\vec{x} = \vec{q}$ e $c = |\vec{c}|$ representando o módulo do vetor velocidade da partícula. O termo e na equação (5) refere-se à energia específica, ou seja, energia por unidade de massa do fluido.

Tensor tensão:

$$P_{ij} = \int c_i c_j f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}, \quad (6)$$

onde, P_{ij} é o tensor tensão e representa todas as configurações possíveis de tensão que um elemento fluido sofre durante o seu transporte (TOSCANO, 2015). O Tensor tensão inclui em suas componentes as tensões ortogonais às faces do elemento fluido, também chamadas de pressões, e as tensões tangentes às faces, também chamadas de tensões de cisalhamento (MCGINTY, 2012).

Fluxo de calor:

$$\vec{q} = \int \frac{c^2}{2} \vec{c} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}. \quad (7)$$

Não há distinção explícita entre condução e convecção. $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ fornece um vetor que representa todo o fluxo de calor no sistema, englobando os 2 (dois) mecanismos citados anteriormente.

Shan et al. (2006) traz à tona mais uma quantidade física que ainda não possui designação. Ela é dada pela seguinte expressão:

$$Q_{ijk} = m \int f c_i c_j c_k d\vec{c}. \quad (8)$$

A contração dupla deste tensor recupera o vetor fluxo de calor dado na equação (7).

Outra quantidade macroscópica que pode ser obtida de forma implícita pela solução da equação de Boltzmann e os respectivos momentos de velocidades é o número de Mach. Fox et al. (2010) define o número de Mach de um escoamento como uma grandeza adimensional obtida a partir da razão entre a velocidade do escoamento, no caso de Lattice Boltzmann \vec{u} , e a velocidade do som no meio em que o escoamento ocorre, ou seja, $Ma = u/c_s$.

De acordo com MSPC (), $c_s = \sqrt{k/\rho}$ onde k é o módulo de compressibilidade. De Guo e Shu (2013) sabe-se $k/\rho = RT = (c_s)^2$. Com isso, a equação do número de Mach para Lattice

Boltzmann é dada por:

$$Ma = \frac{u}{\sqrt{RT}}. \quad (9)$$

Com a mudança de stencil, tem-se um novo método de lattice Boltzmann e, consequentemente, soluções da equação de Boltzmann de diferentes ordens podem ser encontradas. Com as soluções da equação de Boltzmann em termos de f , campos de variáveis macroscópicas citados acima podem ser recuperadas e vários problemas de engenharia podem ser resolvidos (GUO; SHU, 2013). Todas estas possibilidades geram um leque de aplicações descritas a seguir.

De acordo com Xiaoyi e Li-Shi (1997), o método LBE tem demonstrado a sua potencialidade em simular sistemas hidrodinâmicos, magneto-hidrodinâmicos, multifásicos e de componentes múltiplos, incluindo suspensões e emulsões, fluxos químicos reativos, e com múltiplos componentes fluírem através de meios porosos. Na modelagem de meios porosos, Scholz et al. (2012) aplicou métodos de lattice Boltzmann para simular a permeabilidade de estruturas porosas quase duas dimensões de grãos circulares e elípticos monodispersos e descobriu que o fator que mais afeta na permeabilidade é a probabilidade de sobreposição dos grãos na estrutura e não a sua forma, enquanto que Pazmino et al. (2009) estudou a aplicabilidade de filtração coloidal em tamanho distribuído, porosidade reduzida, meio granular e ausência de barreiras energéticas com o intuito de simular a retenção colóide no meio sólido. Le et al. (2015) modelou a transferência de massa e calor em interfaces conjugadas através de extrapolações ao longo da direção normal de transporte e concluiu a aplicabilidade do método de lattice Boltzmann em qualquer orientação relativa da interface real. Tal fato, ilustra que certos modelos de LBM não dependem da orientação do retículo em relação à geometria do fenômeno, ao contrário de simulações CFD tradicionais, a exemplo de método dos volumes finitos, MVF, ou método de diferenças finitas, MDF. No campo da hidrodinâmica de micro escala, Colosqui et al. (2013) simulou através de métodos de lattice Boltzmann deslizamento, histerese estática e dinâmica de ângulos de contato como fenômenos de interface. O estudo sobre dinâmica de molhagem mostrou a adsorção fraca de um fluido sobre substrato sólido.

Um *Bobsled* de 4(quatro) pessoas foi simulado por um software comercial (Power-Flow, EXA corporation) usando lattice Boltzmann e conseguiu atingir resultados extremamente satisfatórios em aerodinâmica consagrando-se campeã em diversos certames dos quais a equipe participou (MURPHY, 2009).

Na área de acústica, Feng et al. (2012) simularam numericamente por métodos de lattice Boltzmann o movimento de um fluxo contínuo acústico em um cilindro devido a ação de um

pistão com o intuito de analisar o fluxo acústico não linear em um ressonador. Além disto, Lew et al. (2013) realizaram a simulação numérica de um jato com imposição de micro jatos de supressão de ruído com o objetivo de prever a radiação sonora no sistema. No estudo optou-se por usar LBM devido a facilidade que o método possui em tratar geometrias complexas. A limitação ficou por conta do número de Mach ter que ser pequeno para o retículo empregado, entorno de 0,5. Em escoamentos incompressíveis Guo et al. (2000) trazem um novo modelo para o operador de colisões BGK(Bhatnagar-Gross-Krook) que consegue modelar tais regimes.

No estudo mesoscópico de precipitados em superfícies, Chen et al. (2012) simularam por métodos de lattice Boltzmann efeitos de concentrações de gelo e material em formações de padrões de precipitação *Liesegang*. O modelo de LBM foi usado pois conseguiu simular de forma eficiente o transporte de um soluto em uma solução. O fato que todos os estudos apresentados acima comprovam é a grande aplicabilidade de métodos de lattice Boltzmann em modelar sistemas de diversa complexidade que contenham os estados da matéria condensada mais comumente empregados em engenharia.

Em algumas aplicações de métodos de lattice Boltzmann expansões em bases de Hermite truncadas são utilizadas na dedução do método a ser usado. Essas bases são escolhidas pois fornecem condições suficientes para requisitos de Navier-Stokes térmica e isotérmica como sendo boas aproximações de alta ordem das equações hidrodinâmicas. Além disso os coeficientes da expansão retornam quantidades macroscópicas do sistema fluido (SHAN et al., 2006). Alguns estudos sobre LBM expandido em bases de Hermite são apresentados a seguir.

Na modelagem de escoamento de gases rarefeitos em não equilíbrio, Meng et al. (2011) utilizaram quadraturas de Gauss-Hermite para aumentar a precisão na simulação do fenômeno. A ordem das quadraturas determinam a capacidade que o método de LBM tem de captura de efeitos rarefeitos de ondas estacionárias de cisalhamento em interações entre gás e superfícies. No estudo concluí-se que quanto maior a ordem da quadratura, maior a precisão de captura de características do fluxo da camada de Knudsen. Coelho et al. (2014) derivaram a aplicação de LBM para bósons e fermions para fluido quântico através da expansão de quarta ordem dos polinômios de Hermite. Zhuo et al. (2012) utilizaram expansão em bases de Hermite para incluir modelagem de escoamentos térmicos incompressíveis. Colosqui (2010) utiliza o fechamento da hierarquia de Boltzmann-BGK através da projeção da função distribuição de probabilidades de partícula única em um espaço de Hilbert N dimensional gerado por polinômios de Hermite para produzir uma hierarquia de equações diferenciais parciais de ordem N que aproxima a exata descrição analítica da hidrodinâmica coberta pela equação de Boltzmann-BGK.

No estudo da função distribuição de equilíbrio, Shim e Gatignol (2013) mostra uma

expansão de Hermite de alta ordem multivariável da função de equilíbrio usando expansão em Taylor em torno da velocidade $\vec{\xi}$, da partícula com o intuito de encontrar mais facilmente modelos de alta ordem de teorias discretas cinéticas como o próprio LBM. Machado (2014) fornece em seu estudo uma construção de uma base generalizada de Hermite para LBM, conjuntos lattice, pesos, momentos, funções distribuição e modelos de alta ordem, o chamado stencil, Shan et al. (2006) representa sistemas clássicos gasosos com teoria cinética propondo expandir a função distribuição de partícula única em bases de Hermite no espaço de velocidades com o intuito de obter uma descrição de mais alta ordem que consiga ser aplicada em escoamentos mais complexos.

Aprofundando-se um pouco mais de derivação de métodos de lattice Boltzmann, He e Luo (1997) propõe em seu estudo uma discretização no tempo e no espaço da equação de Boltzmann através de quadraturas de Gauss-Hermite. No mesmo ano Xiaoyi e Li-Shi (1997) propôs aplicar quadratura de Radau-Gauss para aproximar a integral dos momentos de velocidades que, infelizmente, não gera lattices regulares e de espaçamento proporcional. Shan et al. (2006) apresenta a representação cinética da hidrodinâmica de um sistema fluido além das equações de Navier-Stokes por meio de aproximações de alta ordem da equação de Boltzmann utilizando quadraturas de Gauss-Hermite. Além disso, o próprio trabalho mostra como, através da imposição de um retículo com b velocidades e dimensão D , é possível obter stencils. Na mesma linha, Philippi et al. (2006) aborda o problema da discretização da equação de Boltzmann de modo a gerar modelos térmicos BGK. O procedimento utilizado parte da equação de Boltzmann contínua e a derivação de conjuntos de velocidades discretas é considerado como um problema de quadratura onde o objetivo é determinar um conjunto de velocidades discretas c_i e pesos W_i que conservem os momentos de velocidade da função distribuição de equilíbrio e garanta a isotropia de paridade par dos tensores. Em estudos mais recentes feitos por Mattila et al. (2014) mostra-se formas mais robustas de derivação de stencils.

Inspirado no trabalho de Philippi et al. (2006), o presente trabalho objetiva obter uma sistemática que consiga produzir stencils de lattice Boltzmann através da expansão da equação de Boltzmann em bases de Hermite para aplicar nos momentos de velocidades e, consequentemente, recuperar campos de variáveis macroscópicas.

Cabe destacar que a produção de stencils será feita a partir a imposição de abcissas a priori, de modo que as abcissas das quadraturas que aproximam a solução da equação de Boltzmann coincidam com as abcissas das coordenadas cartesianas. Com isso, as velocidades se encaixam perfeitamente em um retículo, o transporte de qualquer quantidade física com o movimento das partículas torna-se exato e, consequentemente, a advecção torna-se exata. Com

a advecção modelada de forma correta, elimina-se a difusão numérica na simulação numérica por métodos lattice Boltzmann e com isso atingi-se um maior grau de fidelidade em simulações de fenômenos reais.

A possibilidade de geração de métodos de lattice Boltzmann para um dado retículo de interesse torna-se uma ferramenta útil para o estudo de fenômenos físicos na academia, fornecendo versatilidade na modelagem de sistemas físicos abordados na aprendizagem e ensino de qualquer engenharia.

O estudo justifica-se também através da possibilidade de obter métodos de lattice Boltzmann de alta de ordem, para futura aplicação desses esquemas em sistemas físicos de grande complexidade estendendo o uso atual dos métodos de lattice Boltzmann além das equações de Navier-Stokes, como sugere (SHAN et al., 2006).

2 DINÂMICA MOLECULAR

O método de lattice Boltzmann recupera as variáveis macroscópicas de um fenômeno de transporte a partir de uma função distribuição de equilíbrio dada. Essa função varia de acordo com o stencil utilizado e possui um significado derivado da dinâmica molecular.

Em dinâmica molecular, um gás é tratado como um grande número de partículas sub-microscópicas as quais estão em constante movimento aleatório. As partículas que se movem rapidamente colidem, de forma constante, umas com as outras e com as paredes do recipiente que estão contidas.

Para a modelagem do movimento aleatório e a influência das colisões sobre este movimento utiliza-se funções distribuição de probabilidades.

De acordo com Liboff (2003) estas funções representam a densidade de pontos do sistema em um espaço de fases que descreve a forma geral da evolução de um sistema no tempo.

Segundo Tao (2013), um espaço de fases é um espaço que unifica análises de Hamiltonianos em mecânica clássica e mecânica quântica no qual conceitos de escalas mesoscópicas podem ser aplicados.

Em física clássica, o espaço de fases é aquele onde todos os possíveis estados de um sistema físico estão designados por apenas um ponto. Matematicamente o espaço de fases é uma configuração onde para cada posição \vec{q} contida no espaço, o momento \vec{p} tomaria valores na imagem do espaço. A função que faria essa transformação seria o Hamiltoniano do sistema (BURSZTYN; MACARINI, 2006).

De acordo com Tao (2013), a unificação de análises Galileana com análises Hamiltonianas em um espaço de fases é dada pelo seguinte procedimento.

Tome a segunda Lei de Newton:

$$\vec{F} = m \frac{d^2 \vec{q}}{dt^2} = -\nabla V(q(\vec{t})). \quad (10)$$

Na equação (10) , entende-se que a direção da força resultante sobre uma partícula é contrária à um potencial de interação que varia com o tempo.

Da equação (10) pode-se retirar as seguintes igualdades:

$$\vec{p} = m\dot{\vec{q}} \Rightarrow \dot{\vec{q}} = \frac{\vec{p}}{m}. \quad (11)$$

$$m\frac{d^2\vec{q}}{dt^2} = \dot{\vec{p}} = -\nabla V \Rightarrow \dot{\vec{p}} = -\nabla V. \quad (12)$$

A energia total da partícula é descrita, segundo o operador Hamiltoniano, por:

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = \sum_{i=1}^3 \frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{q}), \quad (13)$$

onde, o primeiro termo do lado direito da equação (13) representa a soma de todas as energias cinéticas da partícula e o segundo termo representa a energia potencial da partícula dada pelo próprio potencial de interação.

Derivando-se a equação (13) parcialmente em relação ao vetor posição \vec{q} e ao vetor quantidade de movimento \vec{p} obtém-se as equações de Hamilton que unificam o espaço de fases com sistemas físicos comuns.

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} = \dot{q}_i. \quad (14)$$

$$-\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\nabla V = \dot{p}_i. \quad (15)$$

As equações de Hamilton dadas por (14) e (15) serão usadas posteriormente para obtenção da evolução de um sistema de N partículas.

Com o objetivo de deduzir a função distribuição de probabilidades de N partículas, considere um sistema com N graus de liberdade cujo Hamiltoniano seja dado por:

$$H(\{q\}, \{p\}) = E = \text{constante}, \quad (16)$$

onde, $\{q\}$ representa o conjunto de todas as posições das N partículas do sistema nos 3 (três) eixos cartesianos, $\{p\}$ representa o conjunto de todas as quantidades de movimento das N partículas do sistemas nos 3 (três) eixos cartesianos e E é a energia do sistema que, de acordo com as leis de conservação, é constate.

De acordo com Bursztyn e Macarini (2006) o Hamiltoniano é um função no espaço de fases. Tome uma função de Hamilton com energia maior que a função dada pela equação (16) tal que:

$$H(\{q\}, \{p\}) = E + \delta E = \text{constante}, \quad (17)$$

logo, tomando pontos entre as duas faixas de energia constante representadas pelos Hamiltonianos obtém-se todos os estados possíveis de um sistema de N partículas em um determinado volume Ω do espaço de fases.

O número total de estados na faixa energética é dado por:

$$\mathcal{N} = \int_{\Omega} Ddqd p, \quad (18)$$

onde, D é a função distribuição de probabilidades do sistema possuir um estado com velocidades $\{v\}$, posições $\{x\}$ em um tempo t no volume do espaço de fases Ω .

O volume diferencial dado por $\Delta\Omega$ na faixa de energia entre os dois Hamiltonianos está contido em Ω . Sendo assim, o numero total de estados em um pedaço da faixa energética é dado por:

$$\Delta\mathcal{N} = \int_{\Delta\Omega} Ddqd p. \quad (19)$$

Dividindo a equação (18) pela equação (19) obtém-se a probabilidade de qualquer um estado estar em $\Delta\Omega$:

$$\frac{\Delta\mathcal{N}}{\mathcal{N}} = r = \frac{\int_{\Delta\Omega} Ddqd p}{\int_{\Omega} Ddqd p}. \quad (20)$$

Definindo r em termos de uma função distribuição de probabilidade f_N onde cada estado é composto por N partículas obtém-se a seguinte relação:

$$r = \int_{\Delta\Omega} f_N d q d p, \quad (21)$$

onde, f_N é a função de densidade de probabilidade de um estado encontrar-se com posição $\{q\}$, momentum $\{p\}$ no tempo t em um volume do espaço de fases $\Delta\Omega$.

Substituindo a equação (21) na equação (20) e sabendo que $\Delta\Omega$ é um volume infinitesimal, tem-se:

$$f_N(\{q\}, \{p\}, t) = \frac{D(\{q\}, \{p\}, t)}{\mathcal{N}}. \quad (22)$$

f_N é uma função distribuição de probabilidades que rege o comportamento de N corpos de um sistema físico que satisfaz a equação de Liouville (LIBOFF, 2003).

A equação de Liouville está definida no espaço de fase e é parte de um ramo de estudo da mecânica estatística denominado mecânica estatística do não equilíbrio o qual é definido por:

A mecânica estatística do não equilíbrio, intrinsecada à equação de Liouville, tem por objetivo deduzir a evolução de um sistema macro a partir da dinâmica de microestados, ou seja, gás com N partículas modelado por Hamilton usando um conjunto de Gibbs 6- N dimensional com uma função de distribuição de probabilidades de N corpos (SHAN et al., 2006).

De acordo com o objetivo da mecânica estatística do não equilíbrio, a equação de Liouville deve ser função de N partículas de um sistema físico e terá 6- N coordenadas pois para cada partícula a informação correspondente ao seu vetor posição e seu vetor momento, ambos 3D, torna-se necessária para descrever todo o sistema.

A seguir, uma dedução de acordo com Moore (2010) da equação de Liouville a partir da dinâmica molecular de um conjunto de N partículas.

Tome o Hamiltoniano de um sistema clássico gerado pela posição e momento de cada uma das N partículas:

$$H = T + V = \text{Energia Cinética} + \text{Energia Potencial}. \quad (23)$$

Para um única partícula:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2}. \quad (24)$$

A equação (24) representa uma elipse no espaço de fases.

Considere a evolução de uma região retangular do espaço de fases de um tempo t para um tempo $t + \delta t$.

Inicialmente os pontos possuem as seguintes coordenadas: $P_1 = (\vec{q}_i, \vec{p}_i)$, $P_2 = (\vec{q}_i, \vec{p}_i + d\vec{p}_i)$, $P_3 = (\vec{q}_i + d\vec{q}_i, \vec{p}_i + d\vec{p}_i)$ e $P_4 = (\vec{q}_i + d\vec{q}_i, \vec{p}_i)$.

O volume do espaço de fases é obtido por meio de cálculo da área do retângulo dado

pelos 4 (quatro) pontos. Seguindo o procedimento adotado em Leite (2005), a área inicial e evoluida são dadas por:

$$dV(t) = Area_{(t)} = \det |P_1 P_2 \ P_1 P_4| \Rightarrow dV(t) = dp_i dq_i. \quad (25)$$

$$dV(t + \delta t) = Area_{(t+\delta t)} = \det |P'_1 P'_2 \ P'_1 P'_4|. \quad (26)$$

A evolução do volume no espaço de fases se dá de tal forma que:

P_1 evolui para $P'_1 = (\vec{q}_i + d\vec{q}'_i, \vec{p}_i + d\vec{p}'_i)$, onde $d\vec{q}'_i$ é a taxa de variação de P_1 em relação ao tempo. Aplicando a regra da cadeia para o obter a taxa de variação temporal e estando conscientes das propriedades das equações de Hamilton, equações (15) e (14), do Apêndice A tem-se:

$$d\vec{q}'_i = \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial t} dt = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} dt. \quad (27)$$

$$d\vec{p}'_i = \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} dt = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} dt. \quad (28)$$

Portanto:

$$P'_1 = \left(\vec{p}_i - dt \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i}, \vec{q}_i + dt \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right) \equiv (p'_i, q'_i). \quad (29)$$

P_2 evolui para $P'_2 = (\vec{q}_i + d\vec{q}''_i, \vec{p}_i + d\vec{p}_i + d\vec{p}''_i)$, onde $d\vec{q}''_i$ é a taxa de variação de P_1 em relação ao tempo e em relação a mudança de posição do diferencial de posições devido à uma alteração no diferencial de momentos. Também tem-se que, $d\vec{p}''_i$ é a taxa de variação de P_1 em relação ao tempo e em relação a mudança de momento do diferencial de momento devido à uma alteração no próprio diferencial de momentos. Aplicando o mesmo raciocínio que o ponto P_1 :

$$d\vec{q}''_i = \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial t} dt \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} d\vec{p}_i + d\vec{q}_i = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} dt \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} d\vec{p}_i + d\vec{q}_i. \quad (30)$$

$$d\vec{p}''_i = \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} dt \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} d\vec{p}_i + d\vec{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} dt \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} d\vec{p}_i + d\vec{p}_i. \quad (31)$$

Com isso:

$$P'_2 = \left(\vec{p}_i + d\vec{p}_i - dt d\vec{p}_i \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i}, \vec{q}_i + dt d\vec{p}_i \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right). \quad (32)$$

O último termo que necessita-se para o cálculo da equação (26) é o ponto P'_4 o qual é dado pela evolução de P_4 para $P'_4 = (\vec{q}'_i + d\vec{q}'''_i, \vec{p}'_i + d\vec{p}'''_i)$, onde $d\vec{q}'''_i$ é a taxa de variação de P_4 em relação ao tempo e em relação a mudança de posição do diferencial de posições devido à uma alteração no diferencial de posições. Também tem-se que, $d\vec{p}'''_i$ é a taxa de variação de P_4 em relação ao tempo e em relação a mudança de momentos do diferencial de momentos devido à uma alteração no diferencial de posições. Aplicando o mesmo raciocínio que para o ponto P_1 e o ponto P_2 , tem-se:

$$P'_4 = \left(\vec{p}'_i - dt d\vec{q}_i \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i}, \vec{q}'_i + d\vec{q}_i + dt d\vec{q}_i \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right). \quad (33)$$

Substituindo as equações (29), (32) e (33) na equação (26) tem-se:

$$\begin{aligned} dV(t + \delta t) &= \left(d\vec{p}_i - dt d\vec{p}_i \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} \right) \left(d\vec{q}_i + dt d\vec{q}_i \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right) \\ &+ \left(dt d\vec{p}_i \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right) \left(dt d\vec{q}_i \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} \right) \\ &= d\vec{p}_i d\vec{p}_i + d\vec{p}_i dt d\vec{q}_i \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} - d\vec{q}_i dt d\vec{p}_i \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} \\ &- dt d\vec{p}_i \frac{\partial}{\partial d\vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} dt d\vec{q}_i \frac{\partial}{\partial d\vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} \\ &+ dt d\vec{p}_i \frac{\partial}{\partial d\vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} dt d\vec{q}_i \frac{\partial}{\partial d\vec{q}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i}. \end{aligned} \quad (34)$$

Trocando a ordem das derivadas parciais de acordo com propriedades ortogonais de derivadas de ordem 2 (dois):

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \vec{q}_i \partial \vec{p}_i} = \frac{\partial^2 H}{\partial \vec{p}_i \partial \vec{q}_i} = A. \quad (35)$$

Tem-se

$$dV(t + \delta t) = d\vec{p}_i d\vec{q}_i + dt d\vec{p}_i d\vec{q}_i A - dt d\vec{q}_i d\vec{p}_i A - dt d\vec{q}_i dt d\vec{p}_i A^2 + dt d\vec{p}_i dt d\vec{q}_i A^2. \quad (36)$$

Mas, a equação (36) é igual à equação (25). Sendo assim, pode-se concluir que a taxa de variação de um volume do espaço de fases é nula, pois o mesmo permanece inalterado em qualquer evolução no tempo.

Tendo em mente a afirmação acima, pode-se deduzir a equação de Liouville a partir do seu significado físico.

Se a taxa de variação em um volume do espaço de fases é nula, logo:

$$dV^*(dt) = dV(t + \delta t) - dV(t) = dt \vec{d}\vec{p}_i \vec{d}\vec{q}_i (A - A) = 0. \quad (37)$$

Com isso, para o todo o sistema:

$$\begin{aligned} dV^*(dt) &= dt \sum_{i=1}^N \vec{d}\vec{p}_i \vec{d}\vec{q}_i (A - A) \\ &= dt \sum_{i=1}^N \vec{d}\vec{p}_i \vec{d}\vec{q}_i \left(\frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} \right). \end{aligned} \quad (38)$$

Aplicando as equações (15) e (14) na equação (38) tem-se:

$$\frac{dV^*(dt)}{dt} = \sum_{i=1}^N \vec{d}\vec{p}_i \vec{d}\vec{q}_i \left(\frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} \right) = 0. \quad (39)$$

Considere um volume do sistema no espaço de fases e objetiva-se saber a densidade de probabilidades que rege a evolução do sistema. Então:

$$P = f_N V, \quad (40)$$

onde, f_N é a densidade de probabilidades de N corpos e V é o volume ocupado pelo sistema no espaço de fases.

Derivando a equação (40) em relação ao tempo:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\partial P}{\partial t} + f_N dV(dt). \quad (41)$$

Dividindo a equação (41) por todo o volume do espaço de fases:

$$\frac{df_N}{dt} = \frac{\partial f_N}{\partial t} + f_N \frac{\sum_{i=1}^N \vec{d}\vec{p}_i \vec{d}\vec{q}_i \left(\frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} \right)}{\sum_{i=1}^N \vec{d}\vec{p}_i \vec{d}\vec{q}_i}. \quad (42)$$

Portanto, a equação de Liouville é dada por:

$$\frac{df_N}{dt} = \frac{\partial f_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\vec{q}_i \frac{\partial f_N}{\partial \vec{q}_i} + \vec{p}_i \frac{\partial f_N}{\partial \vec{p}_i} \right) = 0. \quad (43)$$

onde, f_N é a distribuição de probabilidades de N partículas existirem em um conjunto de \vec{q}_j posições com \vec{p}_j momentos em um tempo t para $j = \{1, 2, \dots, N\}$, \vec{p}_j é a força resultante sobre a partícula, \vec{q}_j é a sua velocidade, \vec{p}_j é o momento e \vec{q}_j é a posição.

A equação de Liouville representa a taxa de variação da densidade de probabilidades de um sistema com o tempo somado com a mudança no fluxo de densidade de probabilidades em um volume do espaço de fases quando sujeito à uma velocidade de mudança de pontos de uma região do espaço de fases para outra região do espaço de fases, de um tempo t para um tempo $t + \delta t$. Ou seja, a forma do volume do espaço de fases varia assim como sua posição, porém, o volume total da região permanece inalterado.

Devido a propriedade de volume constante durante qualquer evolução, o teorema de Liouville implica:

- Conservação de probabilidades;
- Conservação do volume no espaço de fases;
- Uma distribuição de probabilidades f que começa em um valor a para um volume V_1 e 0 para o resto do espaço de fases, sempre terá o valor a para um volume com mesmo tamanho de V_1 e 0 para o resto do espaço de fases;
- A integral de f retorna $V_1 a$ que o valor da função em V_1 e que representa a probabilidade do estado encontrar-se no volume V_1 .

Também pode-se constatar que a equação de Liouville governa qualquer evolução de um sistema de N partículas, ou seja, toda a informação referente ao estado do sistema em um tempo t está contida na solução da equação de Liouville. A partir dessa informação, Guo e Shu (2013) define a probabilidade que um determinado estado exista como sendo:

A probabilidade que o estado dado por uma configuração qualquer de um conjunto de \vec{q} posições, \vec{p} momentos em um tempo t esteja em um volume infinitesimal do espaço de fases $[\vec{q}, \vec{q} + \vec{d}q] \times [\vec{p}, \vec{p} + \vec{d}p]$ é dada por $f_N \vec{d}p \vec{d}q$ (GUO; SHU, 2013).

Portanto, a equação de Liouville descreve todo o comportamento do sistema com N partículas, porém, a resolução da equação torna-se complexa quando o foco está na modelagem de todas as N partículas. Pode-se fixar a observação do sistema em um número n de partículas menor do que as N partículas do sistema e com isso obter uma resolução menos complexa da equação (43). Com tal simplificação obtém-se uma redução da estatística de N partículas para um grupo de n partículas as quais, sem perda de generalidade, também conseguem descrever um estado de sistema inteiro. Tal procedimento é denominado redução de estatística. No capítulo seguinte, pode ser observado o procedimento da redução da estatística da

equação de Liouville que resultará em uma hierarquia de equações denominada BBGKY (Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon).

3 TEORIA CINÉTICA

Em teoria cinética as análises de concentram na equação de Liouville pois a mesmo rege o comportamento cinético de todo um sistema físico.

De acordo com Moore (2010) a equação de Liouville pode ser usada para derivar um conjunto mais geral de equações do que a equação de Boltzmann.

O conjunto que Moore (2010) informa é uma hierarquia chamada de hierarquia BBGKY (Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon) que descreve a dinâmica de um conjunto muito grande de partículas.

Partindo da equação de Liouville aplicada em um sistema Hamiltoniano e fazendo uma redução da estatística onde olha-se apenas para um subconjunto n de partículas do sistema em vez de todas as N que o compõe consegue-se obter a Hierarquia BBGKY. Esse famoso conjunto de equações é uma hierarquia pois a evolução da distribuição de probabilidade, f_n , de n partículas de modo que $n \leq N$ é definida em termos da própria f_n e também de f_{n+1} (MOORE, 2010).

Este fato decorre da hipótese de que somente colisões binárias ocorrem entre as partículas do sistema e de que uma partícula do sistema é indistinguível em relação à outra (MOORE, 2010).

A seguir, uma breve dedução da hierarquia BBGKY a partir da equação de Liouville com redução da estatística.

Considerando um sistema de N partículas movendo-se na curva Hamiltoniana no espaço de fases de tal forma que:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + U_i + \sum_{i < j} v_{ij}, \quad (44)$$

onde, $-\nabla U_i = F$ representa um força externa e $-\nabla_{r_i} v_{ij} = \vec{K}_{ij}$ representa a interação binária entre duas moléculas do sistema.

Do teorema de Liouville, $dg/dt = \partial g/\partial t + A = 0$ onde g é a distribuição de probabilidades de N corpos e A é o segundo termo da equação (43). Com isso:

$$\begin{aligned}
 -A &= -\sum_{i=1}^N \left[\vec{p}_i \frac{\partial g}{\partial \vec{p}_i} + \vec{q}_i \frac{\partial g}{\partial \vec{q}_i} \right] \\
 &= -\sum_{i=1}^N \left[(\text{Forças}) \cdot \nabla_{p_i} g + \vec{\xi}_i \cdot \nabla_{r_i} g \right] \\
 &= -\sum_{i=1}^N \left[\left(\vec{F}_i + \sum_{j=1, j \neq i}^N \vec{K}_{ij} \right) \cdot \nabla_{p_i} g + \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \nabla_{r_i} g \right]. \tag{45}
 \end{aligned}$$

Substituindo a equação (45) na equação de Liouville, tem-se:

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \left[\left(-\vec{F}_i - \sum_{j=1, j \neq i}^N \vec{K}_{ij} \right) \cdot \nabla_{p_i} g - \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \nabla_{r_i} g \right]. \tag{46}$$

Segundo Moore (2010) o teorema de Liouville pode ser representado como sendo um operador diferencial total aplicado na função distribuição de probabilidade do sistema como um todo:

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial t} + h_N(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_N) \right] g = 0, \tag{47}$$

onde, h_N é um operador diferencial obtido através de propriedades de simetria do termo de interação \vec{K}_{ij} dado por:

$$h_N(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \nabla_{r_i} + \vec{F}_i \cdot \nabla_{p_i} \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \vec{K}_{ij} \cdot (\nabla_{p_i} - \nabla_{p_j}). \tag{48}$$

Representando o operador diferencial como o operador diferencial das n primeiras partículas de modo que $n \leq N$, somado ao operador diferencial da partícula $n+1$ até a partícula N junto com a representação da interação entre as n primeiras partículas com as $N-n$ partículas tem-se que:

$$h_N = h_n + h_{N-n} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^N \vec{K}_{ij} \cdot (\nabla_{p_i} - \nabla_{p_j}). \tag{49}$$

Algumas simplificações podem ser feitas na equação (49) considerando as seguintes hipóteses:

- h_k , com $k = \{n, N, N-n\}$, representa um gradiente no espaço de fases quando aplicado à g ;

- A integral do gradiente de g avalia g na fronteira do volume do espaço de fases, ou seja, avalia a função no lugar na qual existe variação máxima em relação ao espaço de fases;
- Para um sistema limitado, com normalização de g constante, a integral em $\partial g/\partial t$ sobre todas as posições e momentos retorna 0, ou seja, $\partial g/\partial t = 0$.

Sendo assim, aplicando g na equação (49), tomando $z = (r, p)$ como sendo a representação de ambas as coordenadas do espaço de fases, posições e momentos, somando $\partial/\partial t$ de ambos os lados da equação e integrando o resultado em termos de dz_{n+1}, \dots, dz_N tem-se:

$$\int \left(\frac{\partial}{\partial t} + h_n(\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_n) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^N \vec{K}_{ij} \cdot (\nabla_{p_i} - \nabla_{p_j}) \right) g dz_{n+1} \cdots dz_N = 0. \quad (50)$$

Separando em 2 (duas) integrais:

$$\int \left(\frac{\partial}{\partial t} + h_n(\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_n) \right) g dz_{n+1} \cdots dz_N = - \int \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^N \vec{K}_{ij} \cdot (\nabla_{p_i} - \nabla_{p_j}) g \right) dz_{n+1} \cdots dz_N. \quad (51)$$

Multiplicando a equação (51) por $N!/(N-n)!$ e assumindo que o arranjo da função probabilidade de n partículas em um sistema de N partículas seja a função distribuição de probabilidades de qualquer uma das n partículas possuírem velocidades e posições em um tempo t , ou seja:

$$\frac{N!}{(N-n)!} \int g dz_{n+1} \cdots dz_N = f_n(z_1, \dots, z_n). \quad (52)$$

Então, tem-se que:

$$\int \left(\frac{\partial}{\partial t} + h_n(z_1, \dots, z_n) \right) f_n = - \frac{N!}{(N-(n+1))!} \int \sum_{i=1}^n K_{i,n+1}^{\vec{}} \cdot \nabla_{p_i} g dz_{n+1} \cdots dz_N. \quad (53)$$

O termo $\nabla_{p_j} \Rightarrow 0$ devido ao fato de que seu coeficiente independe do momento da própria partícula.

Mas, aplicando, de forma hierárquica, o mesmo raciocínio que na equação (52) ao termo de evolução, tem-se:

$$\frac{N!}{(N-(n+1))!} \int g dz_{n+2} \cdots dz_N = f_{n+1}(z_1, \dots, z_n). \quad (54)$$

Substituindo a equação (54) na equação (53), obtém-se a famosa hierarquia BBGKY, que descreve a evolução de uma função distribuição de probabilidades de quaisquer n partículas em termos de $n + 1$ partículas.:

$$\int \left(\frac{\partial}{\partial t} + h_n(z_1, \dots, z_n) \right) f_n = - \int \sum_{i=1}^n K_{i,n+1}^{\vec{z}} \cdot \nabla_{p_i} f_{n+1} dz_{n+1}, \quad (55)$$

onde, $\nabla_{p_i} = (\partial/\partial p_i \vec{u}_x + \partial/\partial p_i \vec{u}_y + \partial/\partial p_i \vec{u}_z)$ é o vetor gradiente em relação às coordenadas de momentos no espaço de fases, $\vec{z}_i = (\vec{p}_i, \vec{q}_i)$ é a notação utilizada para simplificar momentos e posições, h_n é um operador diferencial e a função f_n é chamada de função reduzida pois representa uma redução na estatística de N corpos (LIBOFF, 2003).

Tal redução auxilia na manipulação da função distribuição e possibilita a obtenção da equação de Boltzmann.

A hierarquia BBGKY é a equação cinética que governa a evolução de uma função distribuição de probabilidades de uma única partícula 6-dimensional (SHAN et al., 2006).

A hierarquia BBGKY completa é idêntica a equação de Liouville (GUO; SHU, 2013).

Como pode ser observado a hierarquia BBGKY é um conjunto de equações que rege a dinâmica de n partículas em um sistema com $N \geq n$ partículas. Ou seja, com a obtenção da função distribuição de probabilidades de $n = N$ partículas consegue-se descrever de forma completa o comportamento do sistema.

Porém, a difícil tarefa de obtenção da função f_n reside no número n de partículas que, por ser demasiadamente grande em sistemas físicos, torna inviável o cálculo analítico. Tendo em mente tal deficiência, L. Boltzmann propôs focar em apenas uma partícula do sistema, no entanto, esta partícula poderia se comportar como qualquer uma do sistema, ou seja, sabendo do comportamento dessa partícula qualquer e determinando a função distribuição de probabilidades da mesma conseguiria-se descrever todo o sistema de N partículas.

A proposição de Boltzmann pode ser executada pela simples substituição de $n = 1$ na hierarquia BBGKY. Com tudo, algumas hipóteses devem ser feitas.

De acordo com Kremer (2005), a determinação da equação de Boltzmann é feita com base nas seguintes hipóteses:

- Colisões binárias: para um gás rarefeito, somente as interações entre os pares de partículas são levadas em consideração. Ou seja, a passagem de BBGKY para equação de Boltz-

mann implicada na hipótese de se restringir ao estado da matéria como sendo um gás;

- Forças externas: o efeito das forças externas sobre as partículas durante a colisão é pequeno em comparação com as forças que agem entre as partículas;
- Caos molecular: em qualquer posição \vec{x} e tempo t as velocidades de 2 (duas) partículas não estão correlacionadas;
- Tempo de relaxação: a variação da função de distribuição de f não é muito grande ao longo de um intervalo de tempo τ^* , que é suficientemente grande em comparação com o tempo de duração de uma colisão τ_c , porém suficientemente pequeno em comparação com o tempo médio entre 2 (duas) colisões τ , isto é, $\tau_c \leq \tau^* \leq \tau$. Logo, a função de distribuição f é constante ao longo de uma distância comparável ao tamanho das partículas, porém variável ao longo de uma distância comparável ao livre caminho médio. De acordo com (ARUMUGA; K., 2015) o parâmetro tempo de relaxação singular é o parâmetro que controla a taxa de aproximação da função distribuição de probabilidades para o equilíbrio.

O equilíbrio é regido pela função distribuição de probabilidades de Maxwell-Boltzmann.

A seguir apresenta-se uma revisão de conceitos de distribuição de Maxwell-Boltzmann ou, como é comumente chamada, distribuição de equilíbrio, ou seja, qual a probabilidade com que uma partícula se desloca com uma velocidade entre \vec{c}_1 e $\vec{c}_1 + d\vec{c}_1$ segundo o eixo x_1 , com uma velocidade entre \vec{c}_2 e $\vec{c}_2 + d\vec{c}_2$ segundo o eixo x_2 e com uma velocidade entre \vec{c}_3 e $\vec{c}_3 + d\vec{c}_3$ segundo o eixo x_3 (KREMER, 2005).

Segundo Kremer (2005), as seguintes hipóteses são válidas:

- O número de velocidades que pode-se encontrar entre \vec{c}_i e $\vec{c}_i + d\vec{c}_i$ é proporcional à $d\vec{c}_i$ com $i = \{1, 2, 3\}$;
- Os 3 (três) acontecimentos nas 3 (três) direções são mutuamente exclusivos;
- Isotropia: para processos em equilíbrio e sem influências externas não existe distinção entre direções.

Considere a velocidade típica de uma partícula de massa m em equilíbrio térmico como sendo $v = c$ e cuja energia cinética é dada por:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_B T, \quad (56)$$

onde, k_B é a constante de Boltzmann e a fração $3/2$ se aplica pois a análise é realizada nas 3 (três) dimensões do espaço. Como em cada direção a energia cinética de uma partícula é dada por $1/2k_B T$, portanto nas 3 (três) direções tem-se $3/2k_B T$.

Temos a equação (56) em termos da velocidade:

$$v \approx \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}. \quad (57)$$

Guarde este valor pois será utilizado nas passagens à seguir.

De acordo com Parsons (2013), a probabilidade de um estado de energia Ψ_i à uma temperatura T existir para uma partícula é dada por:

$$P(\Psi_i) = \frac{\exp(-\Psi_i/k_B T)}{\sum_j \exp(-\Psi_j/k_B T)}, \quad (58)$$

onde, $\exp(-\Psi_i/k_B T)$ é o evento de um estado específico existir para uma partícula e $\sum_j \exp(-\Psi_j/k_B T)$ é o universo de todos os estados possíveis para a partícula. Em probabilidades, a probabilidade de um evento existir em um universo é dada pela razão entre o número de eventos e o próprio universo de eventos possíveis.

Tomando o estado de energia como sendo a energia cinética de uma partícula:

$$\Psi_i = \frac{mv^2}{2}. \quad (59)$$

Tem-se que a função distribuição de probabilidade de uma partícula possuir uma velocidade \vec{v} é dada por:

$$f(\vec{v}) = C \exp\left[\frac{-mv^2}{2k_B T}\right] = C \exp\left[\frac{-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T}\right]. \quad (60)$$

Para obter C necessita-se somar todas as possíveis velocidades, de tal forma que:

$$\frac{1}{C} = \sum_i \exp\left[\frac{-mv_i^2}{2}\right], \quad (61)$$

onde, $i = \{1, \dots, N\}$ é o número de partículas do sistema.

Transformando a equação (61), que é uma soma de Riemann, em integral, tem-se:

$$\frac{1}{C} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T}\right] dv_x dv_y dv_z. \quad (62)$$

Separando em integrais Gaussianas (pois são função de $e^{(-x^2)}$):

$$\frac{1}{C} = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-mv_x^2}{2k_B T}\right) dv_x \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-mv_y^2}{2k_B T}\right) dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-mv_z^2}{2k_B T}\right) dv_z. \quad (63)$$

Na equação (63) pode-se aplicar as seguintes substituições na primeira integral:

$$b = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \Rightarrow b^2 = \frac{2k_B T}{m} \Rightarrow \frac{1}{b^2} = \frac{m}{2k_B T}. \quad (64)$$

$$y = v_x \Rightarrow y^2 = v_x^2 \Rightarrow dy = dx. \quad (65)$$

$$z = \frac{y}{|c|} \Rightarrow dy = |c| dz \quad (66)$$

Substituindo as equações (64), (65) e (66) na primeira integral da equação (63):

$$I = |c| \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-z^2) dz. \quad (67)$$

Pela identidade Gaussiana:

$$G = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-z^2) dz. \quad (68)$$

$$\begin{aligned} G^2 &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-z^2) dz \right)^2 \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) dx \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-y^2) dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp-(x^2 + y^2) dx dy. \end{aligned} \quad (69)$$

Em coordenadas polares:

$$dx dy = dA = r dr d\theta. \quad (70)$$

$$x^2 + y^2 = r^2. \quad (71)$$

Substituindo as equações (70) e (71) na equação (69):

$$\begin{aligned} G^2 &= \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \exp-(r^2) r dr d\theta \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} r \exp(-r^2) dr \end{aligned} \quad (72)$$

Realizando a substituição a variável,

$$-r^2 = s \Rightarrow ds = -2rdr \Rightarrow dr = -\frac{ds}{2r}, \quad (73)$$

A equação (72) fica:

$$\begin{aligned} G^2 &= 2\pi \int_{-\infty}^0 \frac{1}{2} \exp(s) ds \\ &= \pi \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(s) ds \\ &= \pi. \end{aligned} \quad (74)$$

Logo:

$$G = \sqrt{\pi} \Rightarrow I = |c| \sqrt{\pi} \Rightarrow \frac{1}{C} = (|c| \sqrt{\pi})^3. \quad (75)$$

Voltando na substituição de variáveis nas equações (64), (65) e (66) e substituindo a equação (75) de acordo com a equação (60), obtém-se:

$$f(\vec{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[\frac{-mv^2}{2k_B T} \right]. \quad (76)$$

Tomando $R = k/m$ e multiplicando a equação (76) pela densidade de partículas, obtém-se a densidade de probabilidades de Maxwell-Boltzmann, também chamada de função distribuição de equilíbrio:

$$f^{eq} = \frac{p}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} \exp \left[\frac{-c^2}{2RT} \right] \quad (77)$$

A função distribuição de equilíbrio é fundamental para métodos de lattice Boltzmann pois todas as função em não equilíbrio do método convergem para f^{eq} de acordo com regras de colisão. A mais usada regra de colisão é dada pelo operador BGK onde existe uma correlação entre a função distribuição de probabilidades à cada instante com a função distribuição de equilíbrio respeitando um tempo de relaxação tal como mostrado na equação (81).

Sabendo que a função distribuição de equilíbrio é parte da equação de Boltzmann pode-se obter a mesma substituindo $n = 1$ na hierarquia BBGKY:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + h_1 \right) f_1 = - \int \vec{K}_{12} \cdot \nabla_{p_1} f_2 dz_2, \quad (78)$$

onde, h_1 é o operador colisão de apenas uma partícula.

E fazendo $n = 1$ na equação (48)

$$h_1 = \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \nabla_{r_1} + F_1 \cdot \nabla_{p_1} + \frac{1}{2} \vec{K}_{11} (\nabla_{p_1} - \nabla_{p_1}). \quad (79)$$

Portanto, substituindo a equação (79) na equação (78) obtém-se a equação de Boltzmann:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \nabla_{r_1} + F_1 \cdot \nabla_{p_1} \right) f_1 = - \int \vec{K}_{12} \cdot \nabla_{p_1} f_2 dz_2. \quad (80)$$

O termo a direita da equação de Boltzmann representa uma colisão e pode ser modelado de diversas formas. Guo e Shu (2013) o calcula como sendo função da distribuição de equilíbrio em um modelo chamado BGK (Bhatnagar-Gross-Kroos) que representa uma mudança no fluxo de probabilidades futuras devido à interação entre duas partículas e a troca de momentos entre elas. Todas estas mudanças são devidas à colisões. O operador de colisão BGK(Bhatnagar-Gross-Krook) é dado por:

$$\Omega_{BGK} = -\frac{1}{\tau_c} [f - f^{eq}], \quad (81)$$

onde τ_c é o tempo de relaxação utilizado na simulação computacional dos métodos de Lattice Boltzmann o qual governa a rapidez da simulação. Uma abordagem mais profunda de tempos de relaxação encontra-se disponível no capítulo (1) de (GUO; SHU, 2013).

Também na equação de Boltzmann o termo $\partial f / \partial t$ representa a taxa de variação da função em relação ao tempo. Onde a função é uma distribuição de probabilidades de uma partícula qualquer estar com posição \vec{q} , momento \vec{p} no tempo t .

Além do operador de colisão e de $\partial f / \partial t$, todos os outros termos da equação de Boltzmann possuem significado físico e o mesmo está explicado à seguir:

- $\vec{K}_{12} \cdot \nabla_{p_1} f_2$ representa a mudança no fluxo de probabilidades futuras devido à interação entre as partículas 1 (um) e 2 (dois) e a troca de momentos entre elas. Todas estas mudanças são devidas à colisões;
- $\int \vec{K}_{12} \cdot \nabla_{p_1} f_2 dz_2$ representa o fluxo de probabilidades futuras passando pela posição \vec{q}_2 com quantidade de movimento \vec{p}_2 em um tempo t ;
- $\partial / \partial t$ é a taxa temporal de variação da função distribuição de probabilidades de 1 (uma) partícula estar com posição \vec{q}_1 , quantidade de movimento \vec{p}_1 em um tempo t .

- $\vec{p}_1/m \cdot \nabla_{r_1} f_1$ é a mudança no fluxo de probabilidades presentes devido à uma velocidade de mudança nos pontos de uma região do espaço de fases e a troca de posições que esses pontos sofrerão. A função distribuição de probabilidades retorna a probabilidade de uma partícula estar com \vec{p}_1, \vec{q}_1 em t ;
- $\vec{F}_1 \cdot \nabla_{p_1} f_1$ representa a mudança no fluxo da função distribuição de probabilidades presente devido à uma força externa agindo sobre os pontos de uma região do espaço de fases e conseqüentemente existirá variação do momento dessa partícula. Conforme Moore (2010), alguns estudos sobre lattice Boltzmann incluem um termo a mais na equação de Boltzmann representando forças externas sobre o sistema. Tais forças podem ser a gravidade, um campo elétrico ou até mesmo uma pressão externa atuando sobre uma área.
- A equação de Boltzmann é uma equação diferencial 6 dimensional que governa qualquer evolução de um sistema de partículas, o qual cumpre as hipóteses citadas acima, de um tempo t para um tempo $t + \delta t$ generalizando o comportamento de apenas 1 (uma) partícula.

A solução da equação de Boltzmann é o objetivo dos métodos de lattice Boltzmann e sua dedução e interpretação são fundamentais para o melhor entendimento do poderio da aplicação desses métodos.

Na equação de Boltzmann, a transição entre o espaço de fase, cujas coordenadas são q e p , e o sistema Euclidiano, cujas coordenadas são q e ξ , é dada por:

$$f(t, \vec{q}, \vec{\xi}) = N f_1(t, \vec{q}, \vec{\xi}) = m N f_1(t, \vec{q}_1, \vec{p}_1), \quad (82)$$

onde, f_1 é a função distribuição de probabilidades de qualquer uma partícula com posição \vec{q} , velocidade $\vec{\xi}$, no tempo t , m é massa molecular do gás e N é o número de moléculas no sistema físico.

Segundo MEFT (2010), f só satisfaz a equação de Boltzmann quando a hipótese do caos molecular é válida. A equação de Boltzmann representa a evolução da função de distribuição de probabilidades de um sistema com N partículas no espaço e no tempo.

MEFT (2010) também afirma que uma quantidade H , proporcional a entropia em um sistema e que faz parte do Teorema H é constante no tempo durante um processo se e somente se o sistema obedecer uma distribuição de probabilidades chamada de distribuição de equilíbrio

de Maxwell-Boltzmann, ou seja: se estiver em equilíbrio termodinâmico. A seguir, uma breve abordagem do teorema H:

A ponte entre descrições microscópicas e macroscópicas para os gases perfeitos é dada pelas seguintes equações que representam, respectivamente, a primeira e segunda Lei da termodinâmica pela análise mesoscópica (MEFT, 2010).

$$dQ = dU + dW. \quad (83)$$

Sendo $dW = PdV$ o trabalho exercido sobre o sistema.

$$dS = dQ/T. \quad (84)$$

Definindo a entropia em termos de uma quantidade H que cresce ou mantém-se constante no tempo, tem-se:

$$S = -HV_k. \quad (85)$$

Como a entropia S é proporcional ao negativo de H , então, de acordo com a segunda Lei da termodinâmica, S deve sempre crescer com o tempo ou manter-se constante. Sendo assim, se num dado instante t o gás satisfaz a hipótese do caos molecular (Apêndice D), então para um tempo $t + \delta t$ com $t \Rightarrow 0$, tem-se:

Se o sistema encontra-se em não equilíbrio:

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \quad (86)$$

Se o sistema encontra-se em equilíbrio:

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad (87)$$

O teorema H é um teorema da mecânica estatística que faz previsões razoáveis sobre o comportamento futuro de um sistema que está num estado não completamente especificado (MEFT, 2010).

Não possuir uma previsão exata do comportamento futuro de um sistema decorre do fato da probabilidade do sistema existir é descrita por:

$$f(\vec{q}, \vec{p})d^3q d^3p, \quad (88)$$

onde, $d^3q d^3p$ representa um diferencial finito de volume do espaço de fases.

Se a probabilidade é descrita conforme a equação (88), então não é especificado de forma exata as posições e velocidades das moléculas em uma dada região do espaço de fases, apenas a probabilidade do sistema existir naquela região.

A relação entre H e a função distribuição de probabilidades é dada por:

$$H = \int d^3p f(\vec{p}, t) \log f(\vec{p}, t). \quad (89)$$

Com isso, a evolução temporal de H é determinada a partir da evolução temporal de f (MEFT, 2010). Tal afirmação implica que para que a equação (87) seja satisfeita, tem-se que $f = f^{eq}$ na equação (89). Para o restante das configurações, f será uma distribuição em não equilíbrio termodinâmico.

Como H varia de acordo com a configuração da função distribuição de probabilidade f , conseqüentemente H depende das colisões entre moléculas. Sendo assim, dH/dt não é necessariamente uma função contínua do tempo pois pode mudar abruptamente devido às colisões (MEFT, 2010).

O comportamento não contínuo da função H implica em um comportamento discreto, porém, se num dado instante H tem um valor bastante acima do nível de ruído, para todos os efeitos práticos H diminui para o nível de ruído devido a algumas colisões. Deste modo, o teorema de recorrência de Poincaré se aplica e implica que H seja uma função quase-periódica do tempo.

Na ausência de colisões, o sistema encontra-se em equilíbrio. De acordo com MEFT (2010), o teorema H descreve este comportamento de acordo com as seguintes afirmações:

- H está num mínimo quando a função é uma distribuição de Maxwell-Boltzmann (equilíbrio);
- As colisões moleculares são aleatórias, ou seja, a sequência temporal de estados do gás corresponde a uma sequência aleatória de estados compatíveis com as condições macroscópicas.

As colisões assim como restrições de comportamento macroscópico são os parâmetros que ditam como H ira evoluir, inevitavelmente, para o equilíbrio.

Para perceber a evolução para o equilíbrio a partir de um estado inicial improvável, MEFT (2010) traz uma breve dedução:

Suponha um instante inicial t_1 de modo que $H(t_1)$ está muito acima de um mínimo.

Formando um conjunto estatístico equiprobabilístico e compatível com as restrições macroscópicas onde cada elemento do conjunto corresponde à condição $H(t_1)$ a fim de calcular o valor médio (mais provável) de dH/dt para os membros do conjunto tem-se:

$$\frac{dH}{dt} < 0. \quad (90)$$

Evoluindo o sistema um passo, de tal forma que $t_2 = t_1 + \Delta t$:

$$H(t_2) = H(t_1) + \left(\frac{dH}{dt} \right) \Delta t. \quad (91)$$

Como a equação (90) é satisfeita, logo $H(t_2) < H(t_1)$, supondo Δt muito pequeno.

Sendo assim, a cada evolução H diminui, tendendo para 0, de tal forma que:

$$\frac{dH}{dt} \Rightarrow 0. \quad (92)$$

Portanto, em qualquer evolução de um sistema termodinâmico, o mesmo sempre irá tender para o equilíbrio.. Ou seja, a única solução da equação de Boltzmann que mantém a entropia constante é a função distribuição de equilíbrio Maxwelliana.

Resumindo: na descrição mesoscópica abordada em teoria cinética um sistema composto por N partículas é modelado por meio de uma função distribuição de probabilidades de N corpos governada pela equação de Liouville. Quando aplica-se uma descrição reduzida da estatística na equação de Liouville obtém-se a hierarquia BBGKY. Se a hipótese do caos molecular em um sistema gasoso é assumida, a primeira equação da hierarquia BBGKY resulta na equação de Boltzmann, que governa a função distribuição de probabilidades de partícula única e tende para o equilíbrio. O equilíbrio é governado pela função distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann. Solucionando a equação de Boltzmann obtém-se muitas possibilidades para a física fundamental (SHAN et al., 2006).

Tendo em mente as muitas possibilidades que a solução da equação de Boltzmann fornece para física fundamental,, o presente trabalho objetiva desenvolver e validar uma sistemática de derivação de métodos lattice Boltzmann por meio de stencils através da discretização da equação de Boltzmann em bases de Hermite tensoriais, dado um conjunto finito de velocidades microscópicas pré-estabelecido (abscissas).

Para isso, deve-se resolver o problema da quadratura de Gauss na conservação dos momentos de velocidades.

Com isso o produto gerado pela resolução do problema será uma sistemática que produza os pesos w_i e velocidade do som c_s . Este conjunto denomina-se stencils e os mesmos são utilizados nos métodos de lattice Boltzmann afim de obter momentos de velocidades e, conseqüentemente, campos de variáveis macroscópicas.

4 TEORIA DE LATTICE BOLTZMANN

Métodos de lattice Boltzmann nada mais são do que discretizações de equações diferenciais parciais que modelam sistemas por meio de teoria cinética. He e Luo (1997) enuncia que métodos de lattice Boltzmann podem ser obtidos através da discretização no espaço de fases e no tempo da equação de Boltzmann, porém a discretização proposta pelo autor não gera lattices regulares os quais carregam consigo difusão numérica nas simulações. Seguindo a mesma linha que He e Luo (1997), Philippi et al. (2006) propõe uma resolução para o problema da regularidade de stencils afirmando que resolver o problema da discretização é equivalente a achar o produto interno no espaço discreto induzido pelo produto interno no espaço contínuo que preservam norma e ortogonalidade. Toda a discretização da equação de Boltzmann é feita por polinômios de Hermite tensoriais e segue uma regra principal na qual se o produto interno e a norma induzida são substituídos por somas discretas então a preservação da estrutura funcional do espaço de Hilbert, espaço onde estão inseridos os polinômios de Hermite tensoriais, é garantida. Mais conteúdo sobre tensores e polinômios de Hermite, inclusive os tensoriais, podem ser vistos nos apêndices (A) e (B).

Na figura (2) pode ser observado o processo de discretização no espaço de Hilbert. A discretização de velocidade significa substituir todo o espaço de velocidades C^D por alguns vetores velocidade (PHILIPPI et al., 2006).

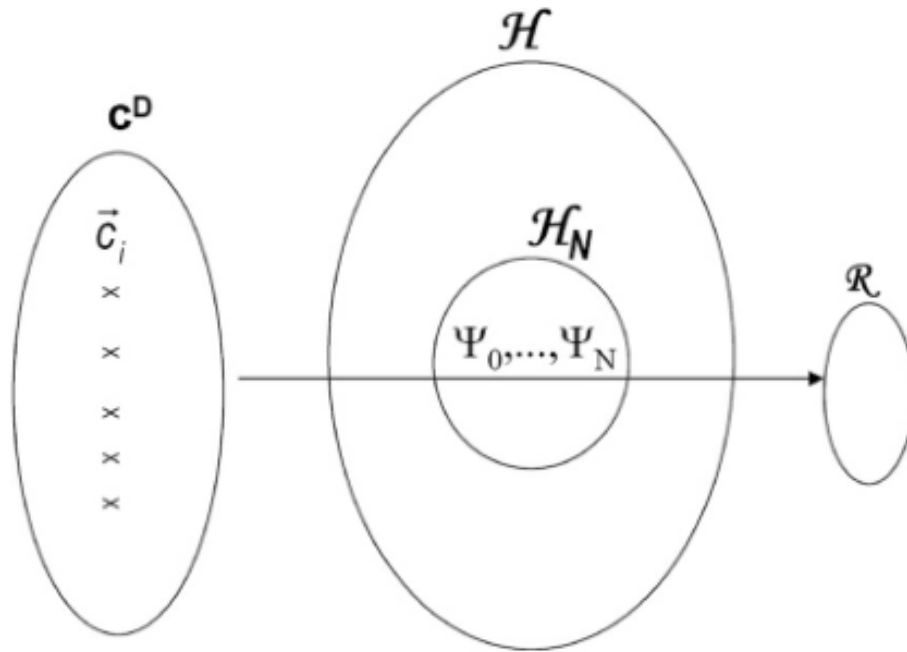


Figura 2: Discretização no espaço de Hilbert.

Fonte: (PHILIPPI et al., 2006).

De acordo com Wan e Gatignol (2011) a discretização possui outro objetivo intrínseco à obtenção do método de lattice Boltzmann que é a obtenção da função distribuição de equilíbrio do sistema discretizada. A mesma forma parte da equação de lattice Boltzmann. Além da função distribuição de equilíbrio, de acordo com He e Luo (1997), a equação de lattice Boltzmann é composta de uma equação de evolução com tempo discretizado, espaço de fases onde a configuração do espaço corresponde à estrutura do lattice e a configuração do momento corresponde ao conjunto de velocidades discretas, restrições de conservação de quantidades e distribuição de equilíbrio.

A equação de evolução com o tempo discretizado citada acima nada mais é do que a forma matemática discretizada da equação de lattice Boltzmann. De acordo com Xiaoyi e Li-Shi (1997) a mesma pode ser obtida por uma discretização da equação de Boltzmann no tempo de acordo com o que segue:

Partindo da equação de Boltzmann:

$$\frac{df}{dt} + \frac{1}{\lambda}f = \frac{1}{\lambda}g, \quad (93)$$

onde $f = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ é a função distribuição de probabilidades de partícula única, g é a distribuição de equilíbrio, λ é o tempo de relaxação e $d/dt = \partial/\partial t + \vec{\xi} \cdot \nabla$ é a diferencial total.

Integrando a equação (93) sobre passo de tempo δt da simulação, tem-se:

$$f(\vec{x} + \vec{\xi}\delta t, \vec{\xi}, t + \delta t) = \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} \int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\lambda}} g(\vec{x} + \vec{\xi}t', u\vec{p}xi, t + t') dt'. \quad (94)$$

Assumindo-se:

- δt é pequeno suficiente;
- g é suficientemente suave localmente.

Realiza-se a seguinte aproximação com expansão em séries de Taylor:

$$g(\vec{x} + \vec{\xi}t, u\vec{p}xi, t + t') = \left(1 - \frac{t'}{\delta t}\right) g(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \left(\frac{t'}{\delta t}\right) g(\vec{x} + \vec{\xi}t, u\vec{p}xi, t + \delta t) + O(t'^2); 0 \leq t' \leq \delta t. \quad (95)$$

Substituindo a equação (95) na equação (94):

$$f(\vec{x} + \vec{\xi}\delta t, \vec{\xi}, t + \delta t) - f = \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} \left(g(\vec{x}, u\vec{p}xi, t) \int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\lambda}} \left(1 - \frac{t'}{\delta t}\right) dt' + g(\vec{x} + \vec{\xi}t, u\vec{p}xi, t + \delta t) \int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\lambda}} \frac{t'}{\delta t} dt' \right) \quad (96)$$

Separando em 2 (duas) integrais, tem-se:

$$\int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\lambda}} dt' - \int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\lambda}} \frac{t'}{\delta t} dt' = \frac{\lambda^2}{\delta t} e^{\frac{\delta t}{\lambda}} - \frac{\lambda^2}{\delta t} - \lambda. \quad (97)$$

$$\int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\lambda}} \frac{t'}{\delta t} dt' = \lambda e^{\frac{\delta t}{\lambda}} - \frac{\lambda^2}{\delta t} e^{\frac{\delta t}{\lambda}} - \frac{\lambda^2}{\delta t}. \quad (98)$$

Substituindo as equações (97) e (98) na equação (96), tem-se:

$$\begin{aligned} f(\vec{x} + \vec{\xi}\delta t, \vec{\xi}, t + \delta t) - f &= e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} e^{\frac{\delta t}{\lambda}} \frac{1}{\lambda} g \frac{\lambda}{\delta t} - e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} \frac{1}{\lambda} g \frac{\lambda}{\delta t} - e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} \frac{1}{\lambda} g \lambda \\ &+ e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} e^{\frac{\delta t}{\lambda}} \frac{1}{\lambda} g \lambda - e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} e^{\frac{\delta t}{\lambda}} \frac{1}{\lambda} g \frac{\lambda}{\delta t} + e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} \frac{1}{\lambda} g \frac{\lambda}{\delta t} \\ &= g \frac{\lambda}{\delta t} - e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} g \frac{\lambda}{\delta t} + e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} g + g' - g' \frac{\lambda}{\delta t} + e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} g' \frac{\lambda}{\delta t} \\ &= \frac{\lambda}{\delta t} (g - g') + g' + e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} \left(g' \frac{\lambda}{\delta t} - g \frac{\lambda}{\delta t} - g \right) \\ &= \left(\frac{\lambda}{\delta t} (g - g') + g' \right) + e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} \left(\frac{\lambda}{\delta t} (g' - g) - g \right) \\ &= (g' - g) \left(\frac{\lambda}{\delta t} (e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} - 1) + 1 \right) + (f - g) (e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} - 1). \quad (99) \end{aligned}$$

Expandindo $e^{-\frac{\delta t}{\lambda}}$ em séries de Taylor de segunda ordem, a equação (A) fica:

$$f(\vec{x} + \vec{\xi}\delta t, \vec{\xi}, t + \delta t) - f = \frac{1}{\tau}(g - f) = \Omega(g, f), \quad (100)$$

onde $\tau = \frac{\lambda}{\delta t}$ é o tempo de relaxação e o termo a direita denomina-se termo de colisão BGK.

A equação (100) é a equação de lattice Boltzmann-BGK a qual governa, discretamente, qualquer movimento de partículas contidas em um retículo. De acordo com Philippi et al. (2006) a mesma pode ser interpretada da seguinte forma: a cada passo de tempo, partículas propagam-se para posições intermediárias entre os locais vizinhos mais próximos. A velocidade de deslocamento é proporcional ao tempo de relaxação. O tempo de relaxação nos diz o quanto uma partícula é afetada pela colisão com as outras em sua vizinhança e quanto tempo ela se recupera dessa colisão. Todo o movimento é controlado por f que representa a densidade de probabilidade de uma partícula ocupar um sítio \vec{x} com velocidade $\vec{\xi}$ em um tempo t . A tendência é que f se aproxime do equilíbrio g conforme o tempo passa.

O processo envolvendo a equação de lattice boltzmann ocorre de acordo com o que segue: a função distribuição de probabilidades uma posição e tempo adiante depende da função distribuição de probabilidades na posição e tempo presente, do tempo de relaxação e da função distribuição de equilíbrio do método. A função distribuição de probabilidades no tempo presente é um dado assim como o tempo de relaxação. Para obtenção da função distribuição de equilíbrio, trunca-se a expansão em séries de Taylor da distribuição de Maxwell-Boltzmann em uma ordem N , aplica-se a conservação dos momentos de velocidades, aproxima-se as integrais de cada nível de energia por meio de quadraturas de acordo com o retículo $DnQb$ escolhido, obtém-se os pesos da quadratura e a escala de velocidades de lattice e recupera-se a distribuição de equilíbrio do instante seguinte e, conseqüentemente, a seguinte distribuição de probabilidades de partícula única do método (HE; LUO, 1997).

A variável f obtida nos métodos de lattice Boltzmann é a principal variável do método pois é a partir dela que se recuperam os campos macroscópicos de quantidades físicas. Conforme Mattila et al. (2014) f é uma função distribuição de massa onde \vec{x} é o espaço espacial microscópico, $\vec{\xi}$ é o espaço de velocidades microscópico e t é o espaço temporal microscópico.

O primeiro passo na derivação de um método de lattice Boltzmann é discretizar o espaço de velocidades microscópico de tal forma que $\vec{c} = c_T \vec{v}$, onde \vec{v} é uma velocidade adimensional que depende do lattice e $c_T = \sqrt{\frac{k_b T_0}{m}}$ é a velocidade do som na temperatura de referência T_0 de um gás com massa molecular m , k_b é a constante de Boltzmann. A relevância dos polinômios de Hermite tensoriais se dá na discretização no espaço de velocidades microscópicas.

Após isso, o seguinte passo da derivação é a imposição de dois parâmetros fundamentais computacionalmente. Um deles, δt , é o passo de tempo e o outro, δx , é o passo espacial que depende do tamanho da aplicação. A razão entre ambos é denominada, de acordo com Mattila et al. (2014), velocidade de referência do lattice c . A velocidade adimensional discreta é dada por $\vec{c}_i = c\vec{c}_i^* = c_T\vec{v}_i$. A escala de velocidades do lattice é dada por $a = c/c_T$. O triplete c_i , w_i e a é chamado de lattice Boltzmann stencil.

Calculados todos os parâmetros, os mesmos são utilizados nos métodos de lattice Boltzmann afim de monitorar o movimentos de um sistema de partículas onde mudanças de posições entre as partículas devem ser governadas por regras de alocação que preservem massa, momento e energia do empacotamento (PHILIPPI et al., 2006).

A conservação dessas quantidades é garantida pelos momentos de velocidades. Momentos de ordem 1 (um), 2 (dois) e 3 (três) podem ser visualizados nas equações (2), (3) e (5). De acordo com Philippi et al. (2006), uma forma genérica de representar esses momentos de velocidades é dada pela seguinte equação:

$$\langle \varphi \rangle^{eq} = \frac{1}{n_d} \int f^{eq}(\vec{\xi}) \varphi_p(\vec{c}) \vec{d}c = \frac{1}{n} \sum_i f_i^{eq} \varepsilon_p(\vec{c}_i). \quad (101)$$

Do lado direito da equação (101) tem-se uma regra de quadratura. Para um dado retículo $DnQb$ cujas abcissas são prescritas a quadratura retorna os pesos w_i que aproximam a integral do lado esquerdo da equação (101) e, também, a escala de velocidades do lattice a . Esses dois parâmetros são fundamentais para obtenção da função distribuição de equilíbrio. Esta última torna-se necessária para aplicação do método de lattice Boltzmann.

A seguir, uma breve dedução de como obter stencils a partir da conservação dos momentos de velocidades conforme Philippi et al. (2006):

A partir de agora o termo central da equação (101) será a parte esquerda da própria equação, ou seja, focamos apenas em trabalhar com o lado direito a triplica igualdade.

Do lado esquerdo da equação (101) a aproximação da função de equilíbrio é dada por:

$$f^{eq} = n_d \frac{e^{-\vec{c}^2}}{\pi} \left(\frac{m}{2k_b T} \right)^{\frac{D}{2}} \sum_{\theta} a_{\theta, (r_{\theta})}^{eq}(\vec{u}) \Psi_{\theta, (r_{\theta})}(\vec{c}), \quad (102)$$

onde n_d é a densidade numérica, ou seja, quantas partículas existem por unidade de volume; $\vec{c} = \vec{\xi}$ é a velocidade de uma partícula em relação a um referencial estático; D é a dimensão avaliada; m é a massa molecular do gás; k_b é a constante de Boltzmann; T é a temperatura avaliada no equilíbrio; θ é o conjunto de índices do tensor $a_{\theta, (r_{\theta})}^{eq}(\vec{u})$; \vec{u} é a velocidade do

fluido onde as partículas estão inseridas e $\Psi_{\theta, (r_\theta)}$ é outro tensor que multiplicado ao primeiro mantém a preservação da norma e ortogonalidade do produto interno dos polinômios de Hermite tensoriais, que é uma das hipóteses da derivação de métodos pela metodologia adotada.

Deseja-se focar na expansão do termo $e^{-\vec{c}^2}$, para isso devemos realizar a seguinte substituição de variável:

$$e^{-((\vec{c}-\vec{u})^2/2k_bT/m)} = e^{(-\vec{c}f_0^2)(T_0/T)}. \quad (103)$$

Então:

$$\frac{(\vec{c}-\vec{u})^2}{2k_bT/m} = \vec{c}f_0^2 \frac{T_0}{T}. \quad (104)$$

Com isso:

$$\vec{c}f_0^2 = \left(\frac{m}{2k_bT}\right)^{1/2}(\vec{c}-\vec{u}). \quad (105)$$

Como pode ser observado na equação (105), tem-se independência de temperatura, cumprindo uma das restrições da metodologia.

Tomando:

$$\Theta = \frac{T}{T_0} - 1. \quad (106)$$

Como sendo o desvio de temperatura do método.

Logo, o lado direito da equação (103) fica:

$$\begin{aligned} e^{(-\vec{c}f_0^2)(T_0/T)} &= e^{(-\vec{c}f_0^2)(\Theta+1)} \\ &= e^{-\vec{c}f_0^2\Theta} e^{-\vec{c}f_0^2} \\ &= e^{-\vec{c}f_0^2} \left(1 - \vec{c}f_0^2\Theta + \left(\frac{\vec{c}f_0^2\Theta}{2}\right)^2 + \dots \right) \\ &= e^{-\vec{c}f_0^2} \left(1 + \vec{c}f_0^2\Theta + \frac{\vec{c}f_0^4\Theta^2 - 2\vec{c}f_0^2\Theta^2}{2} + \dots \right) \\ &= e^{-\vec{c}f_0^2} \left(1 + \vec{c}f_0^2\Theta + \frac{1}{2}\vec{c}f_0^2(\vec{c}f_0^2 - 2)\Theta^2 + \dots \right). \end{aligned} \quad (107)$$

Sabendo que:

$$\vec{c}f_0 = \vec{c}_0 - \vec{u}_0 = \vec{c}/(\frac{2k_bT_0}{m})^{1/2} - \vec{u}/(\frac{2k_bT_0}{m})^{1/2} \quad (108)$$

Então, a equação (102), que é a aproximação da função distribuição de equilíbrio fica:

$$f^{eq} = \frac{n_d}{\pi^{D/2}} e^{-\vec{c}_0^2} \left(1 + \vec{c}f_0^2 \Theta + \frac{1}{2} \vec{c}f_0^2 (\vec{c}f_0^2 - 2) \Theta^2 + \dots \right) (m/2k_bT_0)^{D/2} (T_0/T)^{D/2} \sum_{\theta} a_{\theta,(r_{\theta})}^{eq}(\vec{u}) \Psi_{\theta,(r_{\theta})}(\vec{c}). \quad (109)$$

Reagrupando a equação (109), tem-se:

$$f^{eq} = \frac{1}{\pi^{D/2}} (m/2k_bT_0)^{D/2} e^{-\vec{c}_0^2} \sum_{\theta} a_{\theta,(r_{\theta})}^{eq}(n_d, \vec{u}_0, \Theta) \Psi_{\theta,(r_{\theta})}(\vec{c}_0) \quad (110)$$

onde $a_{\theta,(r_{\theta})}^{eq}(n_d, \vec{u}_0, \Theta)$ é o tensor que engloba todas as propriedades macroscópicas no equilíbrio. Os 3 (três) primeiros são, respectivamente, a densidade numérica, o momento local e o fluxo de momentos:

$$a_0^{eq} = n_d, \quad (111)$$

$$a_{1,\alpha}^{eq} = n_d u_{0,\alpha}, \quad (112)$$

$$a_{2,\alpha\beta}^{eq} = n_d u_{0,\alpha} u_{0,\beta} + 1/2 n_d \Theta \delta_{\alpha\beta}. \quad (113)$$

O símbolo $\delta_{\alpha\beta}$ é o tensor delta de Kronecker melhor explicado no apêndice (A).

Comparando a equação (101) com a equação (110) pode-se notar uma ligação entre propriedades macroscópicas dadas pelo tensor a e propriedades microscópicas dadas pelo tensor φ . A ligação entre ambos é feita, de forma mesoscópica, pelo tensor Ψ de tal forma que:

$$\Psi_{\theta,(r_{\theta})} = \sum_{\eta=0}^{\theta} a_{\eta}^{\theta}(s_{\eta}) \varphi_{\eta} \quad (114)$$

Reescrevendo a quadratura dos momentos de velocidades em termos de equações de quadratura para cada Ψ , em uma base ortogonal de Hilbert, tem-se:

$$\int \frac{f^{eq}(\vec{c})}{n_d} \Psi_{\theta,(r_{\theta})}(\vec{c}) \vec{c} d\vec{c} = \sum_i w_i (2k_bT/m)^{D/2} \frac{f^{eq}(\vec{c}_i)}{n_d} \Psi_{\theta,(r_{\theta})}(\vec{c}_i) \quad (115)$$

Substituindo a equação (110) na equação (115):

$$\begin{aligned}
\langle \Psi \rangle &= \int \frac{1}{\pi^{D/2} n_d} (m/2k_b T_0)^{D/2} e^{-\vec{c}_0^2} \sum_{\theta} a_{\eta, (s_{\eta})}^{eq} (n_d, \vec{u}_0, \Theta) \Psi_{\eta, (r_{\eta})}(\vec{c}_0) \Psi_{\theta, (r_{\theta})}(\vec{c}_0) \vec{d}c_0 \\
&= \sum_i w_i (2k_b T/m)^{D/2} \frac{1}{\pi^{D/2}} (m/2k_b T_0)^{D/2} e^{-\vec{c}_0^2} \sum_{\theta} a_{\eta, (s_{\eta})}^{eq} \Psi_{\eta, (r_{\eta})}(\vec{c}_{0,i}) \Psi_{\theta, (r_{\theta})}(\vec{c}_{0,i}) \\
&= \sum_{\eta} a_{\eta, (s_{\eta})}^{eq} \sum_i W_i \Psi_{\eta, (r_{\eta})}(\vec{c}_{0,i}) \Psi_{\theta, (r_{\theta})}(\vec{c}_{0,i}), \tag{116}
\end{aligned}$$

onde $W_i = w_i \frac{1}{\pi^{D/2}} e^{-\vec{c}_0^2}$ é o peso da quadratura.

Portanto, a equação de quadratura que conserva os momentos de velocidades fica:

$$\frac{1}{\pi^{D/2}} \int e^{-\vec{c}_0^2} \Psi_{\eta, (r_{\eta})}(\vec{c}_0) \Psi_{\theta, (r_{\theta})}(\vec{c}_0) \vec{d}c_0 = \sum_i^b W_i \Psi_{\theta, (r_{\theta})}(\vec{c}_{0,i}) \Psi_{\eta, (r_{\eta})}(\vec{c}_{0,i}). \tag{117}$$

Onde os tensores Psi são proporcionais aos polinômios de Hermite tensoriais (Apêndice (B)) e, de acordo com Philippi et al. (2006), os 5 (cinco) primeiros possuem a seguinte forma:

$$\Psi_0 = 1, \tag{118}$$

$$\Psi_{1,\alpha} = 2C_{\alpha}, \tag{119}$$

$$\Psi_{2,\alpha\beta} = 2(C_{\alpha}C_{\beta} - 1/2\delta_{\alpha\beta}), \tag{120}$$

$$\Psi_{3,\alpha\beta\gamma} = 4/3(C_{\alpha}C_{\beta}C_{\gamma} - 1/2(C_{\alpha}\delta_{\beta\gamma} + C_{\beta}\delta_{\alpha\gamma} + C_{\gamma}\delta_{\alpha\beta})), \tag{121}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_{4,\alpha\beta\gamma\delta} &= 2/3(C_{\alpha}C_{\beta}C_{\gamma}C_{\delta} - 1/2(C_{\alpha}C_{\beta}\delta_{\gamma\delta} + C_{\alpha}C_{\gamma}\delta_{\beta\delta} + C_{\alpha}C_{\delta}\delta_{\beta\gamma} \\
&\quad + C_{\beta}C_{\gamma}\delta_{\alpha\delta} + C_{\beta}C_{\delta}\delta_{\alpha\gamma} + C_{\gamma}C_{\delta}\delta_{\alpha\beta})) + 1/4\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}, \tag{122}
\end{aligned}$$

onde $\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}$.

Propondo lattices $DnQb$ com abscissas prescritas, resolvendo a equação (117) e substituindo os devidos tensores dados pelas equações (118), (119), (120), (121), (122) e, se necessário, de ordens maiores; um sistema de equação não lineares é formado em função dos pesos das quadraturas W_i e da escala de velocidades do lattice a . Determinando-se a solução do sistema é possível a obtenção de stencils (W_i - c_i - a), que são os parâmetros utilizados nos métodos de lattice Boltzmann, ou seja, derivam-se o métodos de lattice Boltzmann.

4.1 EXEMPLO D2Q9

O lattice proposto é o $D2Q9$ cuja configuração pode ser vista na figura (3):

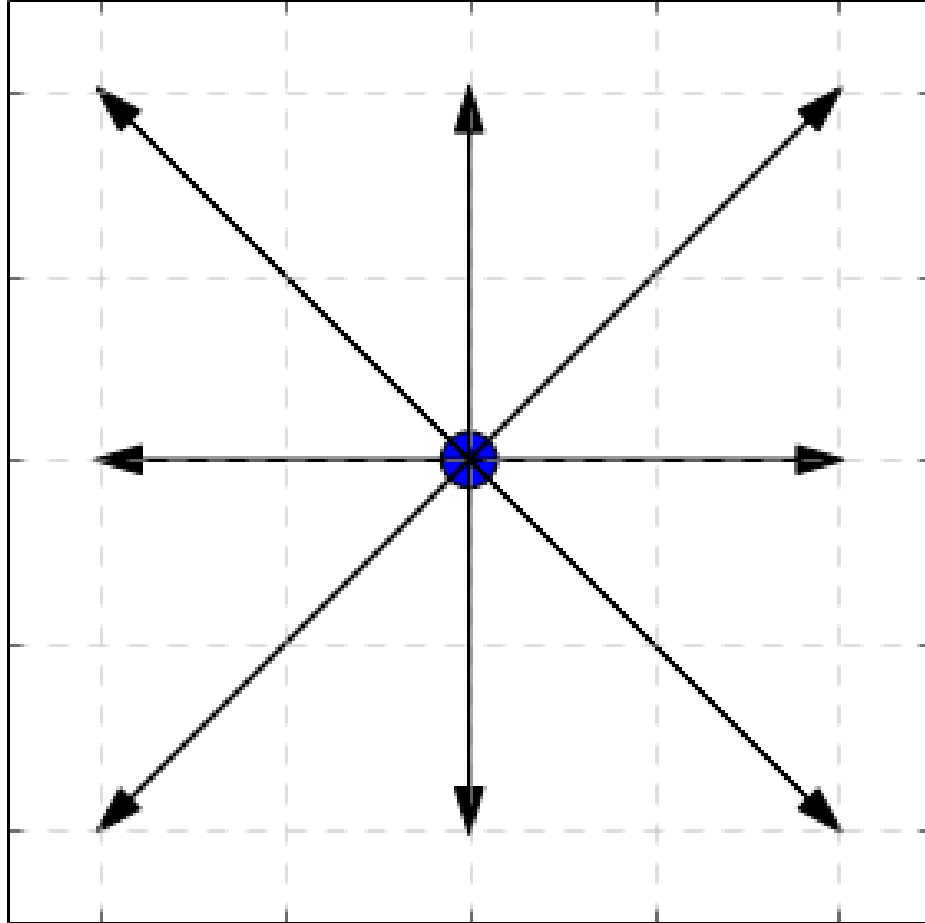


Figura 3: stencil D2Q9.

Fonte: autoria própria.

O mesmo é bidimensional e possui 9 (nove) velocidades, vide que a velocidade central também é considerada. Então:

$$D = 2. \quad (123)$$

Fazendo $\vec{c} = u\vec{p}xi$, prescrevem-se as abscissas de acordo com o que segue: $\vec{\xi}_0 = (0,0)$; $\vec{\xi}_1 = (a,0)$; $\vec{\xi}_2 = (0,a)$; $\vec{\xi}_3 = (-a,0)$; $\vec{\xi}_4 = (0,-a)$; $\vec{\xi}_5 = (a,a)$; $\vec{\xi}_6 = (-a,a)$; $\vec{\xi}_7 = (-a,-a)$ e $\vec{\xi}_9 = (a,-a)$. De forma genérica: $\vec{\xi}_i = (\xi_{x,i}, \xi_{y,i})$, onde $i = 0, \dots, b$ e b é o número de velocidades do lattice subtraído da unidade, logo:

$$b = 8. \quad (124)$$

Como pode ser observado na figura (3), existem 3 (três) grupos de velocidades simétricas entre si. Como a quadratura sempre retorna pesos positivos e independe de orientação de velocidades simétricas, utiliza-se a hipótese de que cada um desses grupos possuem um peso de quadratura em comum. Com isso, pode-se definir j como sendo o índice que indica o número de grupos com mesmo peso de quadratura. Logo, $j = 0, 1, 2$. No *D2Q9* a relação entre i e j está presente na tabela (1):

Tabela 1: Relação velocidades e agrupamento com pesos iguais

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
j	0	1	1	1	1	2	2	2	2

Então, existem 3 (três) pesos a serem determinados e a escala de velocidades do lattice totalizando:

$$m = 4, \quad (125)$$

incógnitas a serem determinadas pelo sistema de equações gerado por (117). Para que o mesmo possua solução, todas as equações devem ser linearmente independentes. Equações são extraídas da regra de quadratura conforme combinações dos tensores, (118), (119), (120), (121), (122) e ordens N superiores, forem sendo utilizadas. A proposta então é combinar os tensores de forma que gerem $l \geq (125)$ equações e testar se as mesmas são linearmente independentes entre si. Se forem, o sistema pode ser resolvido.

Para $N = 0$ tem-se:

$$\Psi_0 = \Psi_{0,x} = \Psi_{0,y} = 1. \quad (126)$$

$N = 1$:

$$\Psi_{1,x} = 2\xi_x, \quad (127)$$

$$\Psi_{1,y} = 2\xi_y, \quad (128)$$

Ainda não obteve-se o número mínimo necessário $l = 4$ de equações, portanto, deve-se subir uma ordem no tensor e recuperar mais equações:

$N = 2$:

$$\Psi_{2,xx} = 2(\xi_x^2 - 1/2) \quad (129)$$

$$\Psi_{2,yy} = 2(\xi_y^2 - 1/2) \quad (130)$$

$$\Psi_{2,xy} = 2\xi_x\xi_y \quad (131)$$

Por inspeção, tensor de segunda ordem xy é idêntico ao tensor de segunda ordem yx .

Os tensores devem ser substituídos na equação (117) modificada para o lattice proposto. Substituindo as equações (123) e (124) na equação (117), tomando $c = \xi$ tem-se:

$$\frac{1}{\pi} \int e^{-\vec{\xi}^2} \Psi_{\eta,(r_\eta)}(\vec{\xi}) \Psi_{\theta,(r_\theta)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \sum_{i=0}^8 W_i \Psi_{\theta,(r_\theta)}(\vec{\xi}_i) \Psi_{\eta,(r_\eta)}(\vec{\xi}_i). \quad (132)$$

As integrais do lado direito, tanto da equação (132), possuem a forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^n dx = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) ((-1)^n + 1), \quad (133)$$

onde Γ é a função Gamma da qual se utilizam as seguintes propriedades:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \quad (134)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} + n\right) = \frac{(2n)! \sqrt{\pi}}{4^n n!} \quad (135)$$

\Rightarrow Primeira combinação: $\Psi_{\theta,(r_\theta)} = (126)$ e $\Psi_{\eta,(r_\eta)} = (126)$. Tem-se:

$$\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} d\xi_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_y^2} d\xi_y \quad (136)$$

Então para $n = 0$, aplicando a equação (134) na equação (136), tem-se:

$$W_0 + 4W_1 + 4W_2 = \frac{\sqrt{\pi}\sqrt{\pi}}{\pi} = 1 \quad (137)$$

\Rightarrow Segunda combinação: $\Psi_{\theta,(r_\theta)} = (126)$ e $\Psi_{\eta,(r_\eta)} = (127)$. Tem-se:

$$\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 1(2\xi_{x,i}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_y^2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} 1(2\xi_x) d\xi_x \right) d\xi_y \quad (138)$$

Do lado esquerdo da equação (138):

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 1(2\xi_{x,i}) &= 2W_0\xi_0 + 2W_1(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + \xi_4) + 2W_2(\xi_5 + \xi_6 + \xi_7 + \xi_8) \\
&= 2W_1(a + 0 + (-a) + 0) + 2W_2(a + (-a) + (-a) + a) \\
&= 0 + 0,
\end{aligned} \tag{139}$$

que não possui solução, a não ser a trivial $W_0 = W_1 = W_2 = 0$, porém os pesos são sempre maiores que 0 pois se não, a quadratura perderia um nível de energia em sua abordagem. Portanto, a segunda combinação não gera equações.

⇒ Terceira combinação: $\Psi_{\theta,(r_\theta)} = (127)$ e $\Psi_{\eta,(r_\eta)} = (127)$. Tem-se:

$$\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 4\xi_{x,i}^2 = \frac{4}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_y^2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} \xi_x^2 d\xi_x \right) d\xi_y \tag{140}$$

Do lado esquerdo da equação (140):

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 4\xi_{x,i}^2 &= 4W_0\xi_0^2 + 4W_1(\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 + \xi_4^2) \\
&\quad + 4W_2(\xi_5^2 + \xi_6^2 + \xi_7^2 + \xi_8^2) \\
&= 4W_0 0^2 + 4W_1(a^2 + 0^2 + a^2 + 0^2) + 4W_2(a^2 + a^2 + a^2 + a^2) \\
&= 8W_1 a^2 + 16W_2 a^2.
\end{aligned} \tag{141}$$

Do lado direito da equação (140):

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} \xi_x^2 d\xi_x, \text{ na equacao (133)} \\
&= \Gamma(1/2 + 1), \text{ na equacao (135)} \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2}.
\end{aligned} \tag{142}$$

Substituindo as equações (141) e (142) na equação (140), obtém-se:

$$8W_1 a^2 + 16W_2 a^2 = 2. \tag{143}$$

⇒ Quarta combinação: $\Psi_{\theta,(r_\theta)} = (126)$ e $\Psi_{\eta,(r_\eta)} = (129)$. Tem-se:

$$\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 2(\xi_{x,i}^2 - 1/2) = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_y^2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} (\xi_x^2 - 1/2) d\xi_x \right) d\xi_y \tag{144}$$

Do lado esquerdo da equação (144):

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 4\xi_{x,i}^2 (\xi_{x,i}^2 - 1/2) &= 2W_0(\xi_{x,0}^2 - 1/2) + 2W_1((\xi_{x,1}^2 + \xi_{x,2}^2 + \xi_{x,3}^2 + \xi_{x,4}^2) - 4(1/2)) \\
&+ 2W_2((\xi_{x,5}^2 + \xi_{x,6}^2 + \xi_{x,7}^2 + \xi_{x,8}^2) - 4(1/2)) \\
&= 2W_0(0^2 - 1/2) + 2W_1((a^2 + 0^2 + a^2 + 0^2) - 4(1/2)) \\
&= 2W_2((a^2 + a^2 + a^2 + a^2) - 4(1/2)) \\
&= W_1(4a^2 - 4) - W_0 + W_2(8a^2 - 4). \tag{145}
\end{aligned}$$

Do lado direito da equação (144):

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} \xi_x^2 d\xi_x - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} d\xi_x, \text{ na equacao (133)} \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \\
&= 0. \tag{146}
\end{aligned}$$

Substituindo as equações (145) e (146) na equação (144), obtém-se:

$$W_1(4a^2 - 4) - W_0 + W_2(8a^2 - 4) = 0. \tag{147}$$

⇒ Quinta combinação: $\Psi_{\theta,(r_\theta)} = (129)$ e $\Psi_{\eta,(r_\eta)} = (130)$. Tem-se:

$$\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 4(\xi_{x,i}^2 - 1/2)(\xi_{y,i}^2 - 1/2) = \frac{4}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_y^2} (\xi_y^2 - 1/2) d\xi_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} (\xi_x^2 - 1/2) d\xi_x \tag{148}$$

Do lado esquerdo da equação (148):

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 4(\xi_{x,i}^2 - 1/2)(\xi_{y,i}^2 - 1/2) &= 4W_0(\xi_{x,0}^2 - 1/2)(\xi_{y,0}^2 - 1/2) \\
&+ 4W_1((\xi_{x,1}^2 - 1/2)(\xi_{y,1}^2 - 1/2) + (\xi_{x,2}^2 - 1/2)(\xi_{y,2}^2 - 1/2) \\
&+ (\xi_{x,3}^2 - 1/2)(\xi_{y,3}^2 - 1/2) + (\xi_{x,4}^2 - 1/2)(\xi_{y,4}^2 - 1/2)) \\
&+ 4W_2((\xi_{x,5}^2 - 1/2)(\xi_{y,5}^2 - 1/2) + (\xi_{x,6}^2 - 1/2)(\xi_{y,6}^2 - 1/2) \\
&+ (\xi_{x,7}^2 - 1/2)(\xi_{y,7}^2 - 1/2) + (\xi_{x,8}^2 - 1/2)(\xi_{y,8}^2 - 1/2)) \\
&= 4W_0(0^2 - 1/2)(0^2 - 1/2) \\
&+ 4W_1((a^2 - 1/2)(0^2 - 1/2) + (0^2 - 1/2)(a^2 - 1/2) \\
&+ (a^2 - 1/2)(0^2 - 1/2) + (0^2 - 1/2)(a^2 - 1/2)) \\
&+ 4W_2((a^2 - 1/2)(a^2 - 1/2) + (a^2 - 1/2)(a^2 - 1/2) \\
&+ (a^2 - 1/2)(a^2 - 1/2) + (a^2 - 1/2)(a^2 - 1/2)) \\
&= W_0 + W_1(4 - 8a^2) + 4W_2(2a^2 - 1)^2. \tag{149}
\end{aligned}$$

Do lado direito da equação (148), para $\xi_x = \xi_x = x$, tem-se:

$$\begin{aligned}
I &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} (x^2 - 1/2) dx \\
&= 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^2 dx - 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx, \text{ na equação (133)} \\
&= \sqrt{\pi} - \sqrt{\pi} \\
&= 0. \tag{150}
\end{aligned}$$

Substituindo as equações (149) e (150) na equação (148), obtém-se:

$$W_0 + W_1(4 - 8a^2) + 4W_2(2a^2 - 1)^2 = 0. \tag{151}$$

Agora, o número de equações é igual ao número de incógnitas dadas na equação (125). Porém, é requisito necessário para resolução do sistema que as 4 (quatro) equações sejam linearmente independentes.

Então, testando mais 2 (duas) combinações para achar a combinação de 4 (quatro) equações LI, tem-se:

⇒ Sexta combinação: $\Psi_{\theta, (r_\theta)} = (131)$ e $\Psi_{\eta, (r_\eta)} = (131)$. Tem-se:

$$\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 4(\xi_{x,i} \xi_{y,i})^2 = \frac{4}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_y^2} \xi_y^2 d\xi_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_x^2} \xi_x^2 d\xi_x \tag{152}$$

Do lado esquerdo da equação (152):

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^8 W_{j(i)} 4(\xi_{x,i} \xi_{y,i})^2 &= 4W_0 \xi_{x,0}^2 \xi_{y,0}^2 + 4W_1 (\xi_{x,1}^2 \xi_{y,1}^2 + \xi_{x,2}^2 \xi_{y,2}^2 + \xi_{x,3}^2 \xi_{y,3}^2 + \xi_{x,4}^2 \xi_{y,4}^2) \\
&+ 4W_2 (\xi_{x,5}^2 \xi_{y,5}^2 + \xi_{x,6}^2 \xi_{y,6}^2 + \xi_{x,7}^2 \xi_{y,7}^2 + \xi_{x,8}^2 \xi_{y,8}^2) \\
&= 4W_0 0^2 0^2 + 4W_1 (a^2 0^2 + 0^2 a^2 + a^2 0^2 + 0^2 a^2) \\
&+ 4W_2 (a^2 a^2 + a^2 a^2 + a^2 a^2 + a^2 a^2) \\
&= 16W_2 a^2
\end{aligned} \tag{153}$$

Do lado direito da equação (152):

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_y^2} \xi_y^2 d\xi_y, \text{ na equacao (133)} \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2}.
\end{aligned} \tag{154}$$

Pode-se aplicar o mesmo raciocínio quando a variável está função de x

Substituindo as equações (153) e (154) na equação (152), obtém-se:

$$16W_2 a^2 = 1. \tag{155}$$

⇒ Septima combinação: $\Psi_{\theta,(r_\theta)} = (131)$ e $\Psi_{\eta,(r_\eta)} = (131)$. Aplicando mesma metodologia que nas outras 6 (seis) combinações obtém-se a seguinte equação:

$$W_0 + 4W_2(2a^2 - 1)^2 + W_1(2(2a^2 - 1)^2 + 2) = 2 \tag{156}$$

As equações (137), (143), (147), (151), (155) e (156) foram obtidas através de procedimento presente no trabalho de Philippi et al. (2006) e estão validadas de acordo com mesmo.

Empoderados de um conjunto de 6 (seis) equações basta achar a combinação de 4 (quatro) delas que são linearmente independentes.

O conjunto de equações dado por (137), (143), (155) e (156) é LI. O sistema dado por esse conjunto é não linear. Para resolução do sistema necessita-se linearizá-lo através de um parâmetro. O parâmetro de linearização é a escala do lattice a .

Foi utilizado software livre Python versão 2.7 para resolução do sistema não linear. O algoritmo pode ser visualizado a seguir:

O sistema não linear gerado pelas equações LI (137), (143), (155) e (156) obtidas pela metodologia possui $m = 4$ (quatro) incógnitas: W_0, W_1, W_2 e a .

Utilizando módulo `sympy` do python pois o mesmo trabalha com equações literais, tem-se:

$$a = sp.Symbol('a'), \quad (157)$$

onde o vetor dos termos independente é:

$$B = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}. \quad (158)$$

Para linearizar o sistema, trata-se a como um parâmetro e resolve-se o sistema linear com as outras 3 (três) incógnitas em função de a .

A matriz M , a seguir, é a matriz dos coeficientes desse sistema onde cada linha corresponde a uma das equações escolhidas das 4 (quatro) geradas pela metodologia.

Escolhendo as equações (137), (143) e (155) tem-se a seguinte matriz dos coeficientes:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 4 \\ 0 & 8a^2 & 16a^2 \\ 0 & 0 & 16a^4 \end{pmatrix}, \quad (159)$$

Com o seguinte vetor dos termos independentes:

$$B_{linear} = \begin{pmatrix} B[0] \\ B[1] \\ B[2] \end{pmatrix}. \quad (160)$$

Para resolução do sistema, as 3 (três) equações devem ser linearmente independentes logo o $\det(M)$ deve ser diferente de 0 (zero).

Pelo teste de validação.

$$\det = M.det() = 128a^6, \quad (161)$$

que é diferente de 0 (zero), portanto o sistema é possível e determinado.

Para resolução do sistema linear optou-se pelo método da matriz inversa onde a solução do sistema é dada por:

$$W_a = M^{-1}B_{linear}, \quad (162)$$

onde W_a é o vetor solução contendo os valores W_0 , W_1 e W_2 .

A matriz inversa de M é dada por:

$$M_{inv} = M.inv() = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2a^2} & \frac{1}{4a^4} \\ 0 & \frac{1}{8a^2} & -\frac{1}{8a^4} \\ 0 & 0 & \frac{1}{16a^4} \end{pmatrix}. \quad (163)$$

Portanto, substituindo a equação (163) na equação (162), a solução do sistema linear em termos do parâmetro a é:

$$W_a = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{a^2} + \frac{1}{4a^4} \\ \frac{1}{4a^2} - \frac{1}{8a^4} \\ \frac{1}{16a^4} \end{pmatrix}. \quad (164)$$

Após a linearização do sistema de 4 (quatro) incógnitas, falta determinar o valor da quarta incógnita a . Para isso, substitui-se o vetor solução W_a na equação (156).

Em python, o algoritmo fica:

$$\begin{aligned} expr &= sp.Matrix([1, 2(2a^2 - 1)^2 + 2, 4(2a^2 - 1)^2]).transpose()W_a \\ &= \left(\frac{1}{4a^2} - \frac{1}{8a^4} \right) \left(2(2a^2 - 1)^2 + 2 \right) + 1 - \frac{1}{a^2} + \frac{(2a^2 - 1)^2}{4a^4} + \frac{1}{4a^4}. \end{aligned} \quad (165)$$

Logo, a solução em termos de a é:

$$a = SOL = sp.solve(sp.Eq(expr[0].simplify(), B[3]), a) = \left(-\frac{\sqrt{6}}{2}, \frac{\sqrt{6}}{2} \right) \quad (166)$$

Portanto a solução em termos dos pesos é:

$$W = tuple(W_a.subs('a': SOL[1])) = \left(\frac{4}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{36} \right) \quad (167)$$

Como visto, a solução do sistema linear retorna os pesos de quadratura e a escala de velocidades do lattice para $D2Q9$.

Obtida a escala de velocidades do lattice:

$$a = \sqrt{3/2}, \quad (168)$$

de acordo com Xiaoyi e Li-Shi (1997), a escala de velocidades do lattice se relaciona com a própria velocidade do lattice através da seguinte equação:

$$a = \frac{\xi}{\sqrt{2RT}} \quad (169)$$

Sabe-se que a velocidade do som de um gás é dada por:

$$c_s = \sqrt{RT} \quad (170)$$

Substituindo as equações (168) e (170) na equação (169), tem-se:

$$c_s = \frac{\xi}{\sqrt{2}a} \quad (171)$$

Discretizando ξ uniformemente em um lattice de modo que se acople a velocidade de referencia do lattice c citada anteriormente e substituindo o valor de a , então a equação (172), fica:

$$c_s = \frac{c}{\sqrt{3}} \quad (172)$$

Para passo de tempo de simulação igual a passo de espaço $c = 1$. Portanto, a velocidade do som do método de lattice Boltzman *D2Q9* fica:

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (173)$$

Com isso, apresenta-se na tabela (2) a seguir os resultados do stencil *D2Q9*:

Tabela 2: Resultados stencil $D2Q9$

i	j	W_i	a	c_s
0	0	$\frac{4}{9}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
1	1	$\frac{1}{9}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
2	1	$\frac{1}{9}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
3	1	$\frac{1}{9}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
4	1	$\frac{1}{9}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
5	2	$\frac{1}{36}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
6	2	$\frac{1}{36}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
7	2	$\frac{1}{36}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
8	2	$\frac{1}{36}$	$\sqrt{3/2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$

Os resultados da tabela (2) são idênticos ao stencil $D2Q9$ encontrado em (GUO; SHU, 2013), o que valida a sistemática de obtenção de métodos de lattice Boltzmann apresentada no presente trabalho.

5 CONCLUSÃO

A sistemática de derivação de métodos de lattice Boltzmann fornecida no presente trabalho segue metodologia usada em Philippi et al. (2006), onde aproxima-se momentos de velocidades por meio de quadraturas e, com as abcissas predefinidas em um lattice regular, obtém-se os stencils correspondentes.

Os resultados obtidos para o stencil $D2Q9$ são os parâmetros utilizados na aplicação de métodos de lattice Boltzmann para simular fenômenos físicos por meio de um retículo bidimensional e com 9 (nove) velocidades.

Com outros stencils sendo derivados, o método de lattice Boltzmann necessita de mais um parâmetro para poder ser aplicado em simulações numéricas: a função distribuição de equilíbrio, que varia com o retículo. A presente metodologia não a deriva e trata apenas de deduzir o conjunto de pesos, abcissas e velocidade do som, resumidamente denominado de stencil. Porém, seria de grande utilidade que trabalhos futuros pudessem dar continuidade ao presente derivando a função distribuição de equilíbrio de cada método cujo stencil é obtido pela sistemática.

Por se mostrar genérica, a sistemática se aplica a qualquer retículo D_nQ_b cujo stencil é desejado. Com isso, métodos de lattice Boltzmann de alta ordem podem ser derivados e novos podem ser criados variando as configurações espaciais e de velocidades. Com novos métodos de lattice Boltzmann, um universo mais amplo de físicas pode ser explorado. Além disso, a sistemática fornece possibilidades das mais diversas em simulação numérica para a aprendizagem e ensino de engenharia.

A sistemática se utiliza da imposição abcissas de quadraturas. Escolhendo abcissas de quadraturas coincidindo com abcissas de coordenadas cartesianas, o transporte de qualquer quantidade física é modelado de forma exata, o que torna a advecção exata eliminando-se a difusão numérica e, conseqüentemente, obtendo-se um maior grau de fidelidade na simulação numérica do fenômeno físico.

Portanto, métodos de lattice Boltzmann derivados pela presente sistemática serão mais

fidedignos a realidade.

REFERÊNCIAS

- ARUMUGA, P. D.; K., D. A. A review on the development of lattice boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer. **Alexandria Engineering Journal**, n. 54, July 2015.
- BURSZTYN, H.; MACARINI, L. **Introdução a Geometria Simplética**. Rio de Janeiro, Julho 2006.
- CHEN, L. et al. Mesoscopic study of the effects of gel concentration and materials on the formation of precipitation patterns. **The Journal of the American Chemical Society**, 2012.
- COELHO, R. C. V. et al. Lattice boltzmann method for bosons and fermions and the fourth-order hermite polynomial expansion. **Phys. Rev. E**, v. 89, n. 4, 2014.
- COLOSQUI, C. E. High order hydrodynamics via lattice boltzmann methods. **Phys. Rev. E**, v. 81, n. 2, Fevereiro 2010.
- COLOSQUI, C. E. et al. Mesoscopic model for microscale hydrodynamics and interfacial phenomena: Slip, films, and contact-angle hysteresis. **Phys. Rev. E**, v. 87, n. 1, Janeiro 2013.
- CRFM. **Hermite and Laguerre polynomials**. [S.l.], 2014. Disponível em: <<http://www.crfm.it/LinkClick.aspx?fileticket=rA4WwNehFxY=>>.
- DINIS, L. M. d. J. S. **Tensores**. Rua Dr Roberto Frias, 4200-465. Disponível em: <<https://web.fe.up.pt/ldinis/capitulo1.pdf>>.
- FENG, H. et al. Numerical simulation of nonlinear acoustic streaming in a resonator using gas-kinetic scheme. **Journal of applied physics**, v. 112, 2012.
- FOX; PRITCHARD; MCDONALD. **Introdução à mecânica dos fluidos**. [S.l.]: LTC, 2010.
- GUO, Z.; SHI, B.; WANG, N. Lattice BGK model for incompressible Navier Stokes equation. **Journal of Computational Physics**, n. 165, p. 288-306, 2000.
- GUO, Z.; SHU, C. **Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering**. [S.l.]: World Scientific, 2013.
- HE, X.; LUO, L.-S. A priori derivation of the lattice boltzmann. **Phys. Rev. E**, v. 55, n. 6, 1997.
- KREMER, G. M. **Uma Introdução á à Equação de Boltzmann**. [S.l.]: Edusp, 2005.
- KRIZ, R. D. January 1999.
- LE, G.; OULAIID, O.; ZHANG, J. Counter-extrapolation method for conjugate interfaces in computational heat and mass transfer. **Phys. Rev. E**, v. 91, n. 3, 2015.
- LEITE, O. R. V. **Geometria Analítica e Espacial**. [S.l.]: Loyola, 2005.

LEW, P. T.; YAZDI, A. N.; MONGEAU, L. Unsteady numerical simulation of a round jet with impinging microjets for noise suppression. **The Journal of the Acoustic Society of America**, p. 1982–1989, 2013.

LIBOFF. **Kinetic Theory. Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions**. [S.l.]: Springer, 2003.

MACHADO, R. On the generalized hermite-based lattice boltzmann construction, lattice sets, weights, moments, distribution function and high-order models. **Frontiers of Physics**, v. 9, n. 4, p. 490–510, 2014.

MATTILA, K. K.; HEGELE, L. A. J.; PHILIPPI, P. C. High-accuracy approximation of high-rank derivatives: isotropic finite differences based on lattice-boltzmann stencils. **The Scientific World Journal**, v. 2014, n. 142907, p. 16, 2014.

MCGINTY, B. **Continuum Mechanics**. Fevereiro 2012.

MEFT. **Discussion of H theorem**. [S.l.], 2010. Disponível em: <<https://fenix.tecnico.ulisboa.pt/downloadFile/3779576763279/Aula11.pdf>>.

MENG et al. Gausshermite quadratures and accuracy of lattice boltzmann models for nonequilibrium gas flows. **Phys. Rev. E**, v. 83, n. 3, 2011.

MOORE, G. **Physics 212 In 4: Statistical mechanics II**. [S.l.], October 2010. Disponível em: <http://socrates.berkeley.edu/~jemoore/Moore_group,_UC_Berkeley/Physics_212_files/phys212ln4.pdf>.

MSPC. **Fluidos 08-10 Escoamentos compressíveis**. [S.l.]. Disponível em: <http://www.mspc.eng.br/fldetc/fluid_0810.shtml>.

MURPHY, J. **Bobsled de 4 pessoas projetado com Lattice Boltzmann coloca EUA na via rápida**. 2009.

PARSONS, A. **Maxwellian velocity distribution**. 2013. Disponível em: <https://casper.berkeley.edu/astrobaki/index.php/Maxwellian_velocity_distribution>.

PAZMINO, E. F.; MA, H.; JHONSON, W. P. Applicability of colloid filtration theory in size-distributed, reduced porosity, granular media in the absence of energy barriers. **Environmental Science & Technology**, 2009.

PHILIPPI, P. et al. From the continuous to the lattice boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. **Phys. Rev. E**, v. 73, 2006.

SCHOLZ, C. et al. Permeability of porous materials determined from the euler characteristic. **Journal of American Physical Society**, v. 109, n. 26, Dezembro 2012.

SECCHI, A. R. **Interpolações polinomiais**. [S.l.], Novembro 2011. Disponível em: <<http://www2.peq.coppe.ufrj.br/Pessoal/Professores/Arge/COQ862/Interpolacoes%20Polinomiais.pdf>>.

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

SHIM, J. W.; GATIGNOL, R. How to obtain higher-order multivariate hermite expansion of maxwellboltzmann distribution by using taylor expansion? **Zeitschrift fur angewandte Mathematik und Physik**, v. 64, n. 3, p. 473–482, 2013.

TAO, T. **Phase Space**. [S.l.], 2013. Disponível em: <http://www.math.ucla.edu/tao/preprints/phase_space.pdf>.

TOSCANO. **Introdução aos Tensores**. Rua Miguel de Frias, 9- Icaraí, Niterói-Rj, 2015. Disponível em: <<http://www.professores.uff.br/rtoscano/>>.

WAN, J. S.; GATIGNOL, R. Thermal lattice boltzmann method based on a theoretically simple derivation of the taylor expansion. **Physical Review E**, May 2011.

XIAOYI, H.; LI-SHI, L. Theory of the lattice boltzmann method: From the boltzmann equation to the lattice boltzmann equation. **Phys. Rev. E**, v. 56, n. 6, 1997.

ZHUO et al. Filtermatrix lattice boltzmann model for incompressible thermal flows. **Phys. Rev. E**, v. 85, n. 4, 2012.

APÊNDICE A – TENSORES

O conteúdo apresentado no seguinte Apêndice é baseado nas referências Dinis () e Toscano (2015) e almeja introduzir uma ideia básica de tensores ao leitor.

Tensores são úteis na representação matemática de grandezas físicas, à exemplo de tensões e deformações que são representadas por tensores de segunda ordem. A figura (4) ilustra tal representação:

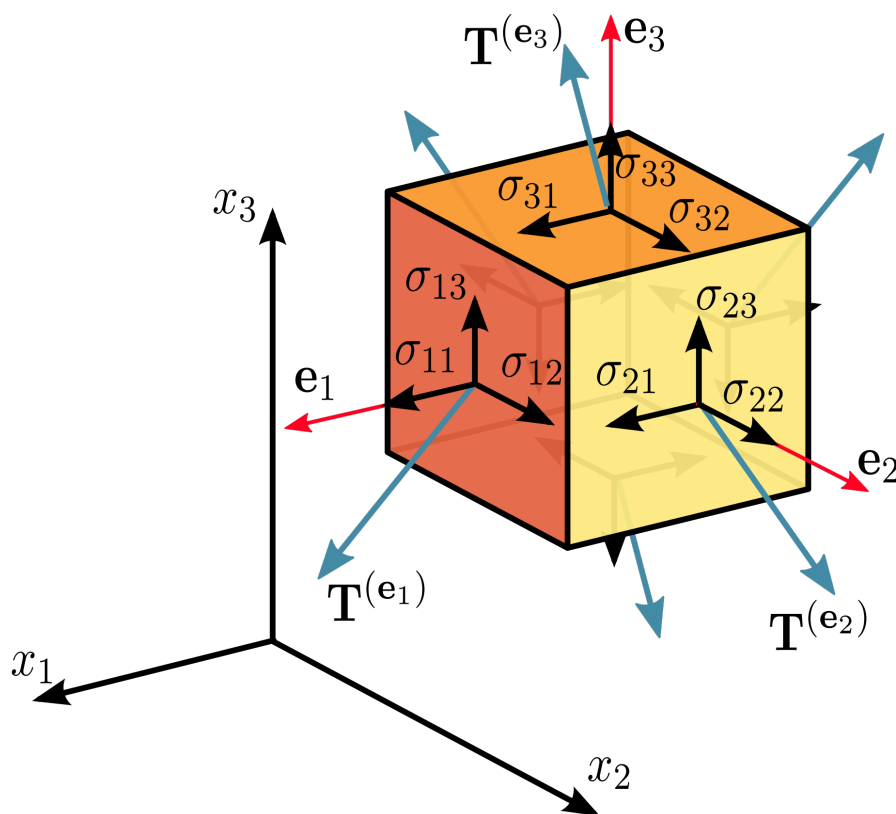


Figura 4: Tensor tensão aplicado nas componentes normais e de cisalhamento.

Fonte: (KRIZ, 1999).

Cada uma das tensões que atuam, seja cisalhando ou pressionando, no cubo é uma componente do tensor tensão que representa todo o estado de tensões do sistema.

Cabe enfatizar que o padrão de nomenclatura adotado no seguinte apêndice define que a ordem de um tensor é designada pelo número de sublinhados que a letra que representa a entidade matemática possui. O tensor de segunda ordem é uma matriz, primeira ordem é um vetor e de ordem 0 (zero) é um escalar. Por exemplo $\underline{\underline{A}}$ é tensor de segunda ordem representando a matriz A . Tensores de ordem maiores que 2 (dois) ainda não possui nome como entidade matemática.

Para começar a análise de tensores necessita-se lembrar alguns conceitos da geometria analítica.

O produto escalar entre dois vetores é dado por:

$$\underline{w} \cdot \underline{v} = |\underline{w}||\underline{v}|\cos\theta = \frac{1}{2}(|\underline{w}|^2 + |\underline{v}|^2 - |\underline{v} - \underline{w}|^2). \quad (174)$$

No espaço de dimensão n a notação indicial pode ser usada para representar este produto, de modo que:

$$\underline{w} \cdot \underline{v} = \sum_{i=1}^n w_i v_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i v_j \delta_{ij}, \quad (175)$$

onde, δ_{ij} é o operador delta de Kronecker bidimensional vide que estamos analisando apenas dois índices i e j . O mesmo é dado por:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (176)$$

O produto vetorial entre 2 (dois) vetores é dado, também, em função de um operador chamado permutador. Este símbolo permutador representa um tensor de terceira ordem para o produto vetorial entre dois vetores vide que nesta operação estão envolvidos 3 (três) índices: i de um dos vetores, j do outro vetor e k do vetor resultante do produto vetorial. O operador permutador de terceira ordem é dado por:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{se } i, j, k \text{ distintos em ordem ciclica} \\ 0, & \text{se } i = j \text{ ou } i = k \text{ ou } j = k \\ -1, & \text{se } i, j, k \text{ distintos em ordem nao ciclica} \end{cases} \quad (177)$$

Uma propriedade útil da multiplicação de operadores permutadores de terceira ordem que possuem um dos seus índices em comum é obtida a partir da supressão de um de seus índices e a conveniente expressão de todas as permutação possíveis que sobraram em termos do operador Delta de Kronecker:

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{pqk} = \delta_{ip}\delta_{jq} - \delta_{iq}\delta_{jp} \quad (178)$$

Como dito anteriormente, o operador permutador é usado no produto vetorial e aplica-se no mesmo da seguinte forma:

$$\underline{u} \times \underline{v} = \varepsilon_{ijk}u_i v_j \vec{e}_k, \quad (179)$$

onde, \underline{e}_k representa uma base ortogonal dada por:

$$\underline{e}_k = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix}$$

O produto escalar triplo também é dado em função do operador permutador, de tal forma que:

$$(\underline{u} \times \underline{v}) \cdot \underline{w} = u_i v_j w_k \varepsilon_{ijk} \quad (180)$$

O mesmo retorna um escalar visto que tem-se produto escalar entre o vetor $\underline{u} \times \underline{v}$ e \underline{w} , ou seja, não necessita-se de uma base ortogonal \underline{e}_k para representação.

Já o produto vetorial triplo em notação indicial é dado pela seguinte expressão onde utiliza-se a propriedade da equação (178) e a expressão para produto escalar indicial na equação (175):

$$\begin{aligned} \underline{e}_k \underline{u} \times (\underline{e}_k \underline{v} \times \underline{e}_k \underline{w}) &= \varepsilon_{ijk} u_i (\varepsilon_{mnj} v_m w_n) \underline{e}_k \underline{e}_k \\ &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{mnj} u_i v_m w_n \underline{e}_k \\ &= (\delta_{km} \delta_{in} - \delta_{kn} \delta_{im}) u_i v_m w_n \underline{e}_k \underline{e}_k \\ &= u_n v_k w_n \underline{e}_k - u_m v_m w_k \vec{e}_k \\ &= (\underline{e}_k \underline{u} \cdot \underline{e}_k \underline{w}) \underline{e}_k \underline{v} - (\underline{e}_k \underline{u} \cdot \underline{e}_k \underline{v}) \underline{e}_k \underline{w}. \end{aligned} \quad (181)$$

Sabendo das definições de produto escalar, produto vetorial, produto escalar triplo e produto vetorial triplo, pode-se definir então o produto tensorial de vetores:

$$[\underline{u} \otimes \underline{v}] \underline{w} = (\underline{v} \cdot \underline{w}) \underline{u}, \quad (182)$$

onde, o tensor $\underline{u} \otimes \underline{v}$ atua no vetor \underline{w} , sendo o resultado um vetor que tem a direção e o sentido do vetor \underline{u} e cujo comprimento é dado por $(\underline{v} \cdot \underline{w}) |\underline{u}|$.

As propriedades do produto tensorial entre dois vetores podem ser visualizadas a seguir:

- $\underline{u} \otimes (\underline{v}_1 + \underline{v}_2) = \underline{u} \otimes \underline{v}_1 + \underline{u} \otimes \underline{v}_2$;
- $(\underline{u}_1 + \underline{u}_2) \otimes \underline{v} = \underline{u}_1 \otimes \underline{v} + \underline{u}_2 \otimes \underline{v}$;
- $(\lambda \underline{u}) \otimes \underline{v} = \lambda(\underline{u} \otimes \underline{v}) = \underline{u} \otimes (\lambda \underline{v})$;
- Se $\{\underline{e}_1, \dots, \underline{e}_p\}$ for base de vetores do espaço vetorial E e $\{\underline{f}_1, \dots, \underline{f}_q\}$ for base de vetores do espaço vetorial F , os pq vetores $\underline{e}_i \otimes \underline{f}_\alpha$ formam base em $E \otimes F$ tem dimensão pq e assim $\underline{u} \otimes \underline{v} = (u_i \underline{e}_i) \otimes (v_\alpha \underline{f}_\alpha) = u_i v_\alpha (\underline{e}_i \otimes \underline{f}_\alpha)$ de modo que $i = \{1, \dots, p\}$ e $\alpha = \{1, \dots, q\}$.

Tendo em mente todas as propriedades citadas e provadas, pode-se definir tensor de ordem 2 (dois), dado por:

$$\underline{\underline{T}} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 T_{ij} [\underline{e}_i \otimes \underline{e}_j], \quad (183)$$

onde, $\underline{\underline{T}}$ é a notação para tensor de ordem 2 (dois), T_{ij} são as componentes do tensor de segunda ordem dadas por todas as permutações possíveis entre $i = \{1, 2, 3\}$ e $j = \{1, 2, 3\}$, ou seja, 9 (nove) componentes. Também tem-se que $\underline{e}_i \otimes \underline{e}_j$ representa uma base tensorial.

Uma propriedade interessante de tensores de segunda ordem é a projeção de suas componentes e sua própria base ortogonal de tal forma que:

$$A_{ij} = \underline{e}_i \cdot \underline{\underline{A}} \underline{e}_j. \quad (184)$$

Com o objetivo de reduzir notação a comunidade científica que utiliza tensores adota a convenção dos índices repetidos ou, como comumente é chamada, soma de Einstein, onde realiza-se a repetição do termo acrescido por um sinal de soma durante todas as permutações possíveis para os índices presentes na expressão. Sendo assim a definição de tensor de ordem 2 (dois) fica:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}} &= T_{ij} [\underline{e}_i \otimes \underline{e}_j] \\ &= T_{11} [\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1] + T_{12} [\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2] + T_{13} [\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_3] \\ &\quad + T_{21} [\underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1] + T_{22} [\underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2] + T_{23} [\underline{e}_2 \otimes \underline{e}_3] \\ &\quad + T_{31} [\underline{e}_3 \otimes \underline{e}_1] + T_{32} [\underline{e}_3 \otimes \underline{e}_2] + T_{33} [\underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3]. \end{aligned} \quad (185)$$

Seguindo a notação de Einstein pode-se definir a multiplicação entre tensor de segunda ordem e vetor, dada por:

$$\underline{T} \underline{v} = T_{ij} v_j \underline{e}_i. \quad (186)$$

Outras propriedades úteis de tensores são listadas a seguir:

- Adição:

$$\underline{T} \underline{v} + \underline{P} \underline{v} = [\underline{T} + \underline{P}] \underline{v} = [T_{ij} + P_{ij}] v_j;$$

- Multiplicação por escalar:

$$[\alpha \underline{T}] \underline{v} = \alpha [\underline{T} \underline{v}] \iff [\alpha T]_{ij} v_j = \alpha T_{ij} v_j;$$

- Comutatividade de produto escalar:

$$\underline{u} \cdot \underline{T} \underline{v} = \underline{v} \cdot (\underline{T})^T;$$

- Produto:

$$[\underline{P} \underline{T}] \underline{v} = P_{ik} T_{kj} v_j \underline{e}_i;$$

- Tensor identidade:

$$\underline{I} \underline{v} = \underline{v} \Rightarrow \underline{I} = \delta_{ij} [\underline{e}_i \otimes \underline{e}_j];$$

- Contração dupla: nesta operação reduz-se a ordem de um tensor de dois dígitos, ou seja, quando se contrai um tensor de segunda ordem a transformação o levará para um tensor de ordem 0 (zero), que é um escalar:

$$\underline{A} : \underline{B} = \text{traço}((A^T)^B) = \text{traço}((B^T)^A) = A_{ij} B_{ij} = B_{ji} A_{ji}.$$

A mudança de base é outra propriedade utilizada em tensores de segunda ordem. Esta propriedade mostra-se conveniente quando deseja-se mudar o referencial de um problema para outra referencial no qual as equações ficam mais fáceis. A transformação linear é feita em termos dos ângulos entre uma direção qualquer de um referencial e a direção do outro referencial.

A mudança de base em tensores de segunda ordem é dada por:

$$T_{mn} = Q_{mi} Q_{nj} T_{ij}, \quad (187)$$

onde, T_{mn} é a notação indicial para o tensor que deseja-se obter com a mudança de base, Q_{mi} é a matriz dos cossenos entre os ângulos de cada direção, Q_{nj} é a matriz transposta da matriz dos cossenos e T_{ij} é o tensor inicial o qual deseja-se mudar de base.

A definição de um tensor cartesiano de ordem n em um espaço cartesiano de 3^n componentes é dada por:

$$A_{i_1, i_2, \dots, i_n} \underline{e}_{i_1} \otimes \dots \otimes \vec{e}_{i_n} \quad (188)$$

Sendo assim, o tensor permutador fica:

$$\varepsilon_{i_1, i_2, \dots, i_n} = \begin{cases} 1, & \text{se } \{i_1, i_2, \dots, i_n\} \text{ distintos em ordem ciclica} \\ 0, & \text{se } i_1 = i_2 \text{ ou } i_1 = i_3 \text{ ou } i_{n-1} = i_n \\ -1, & \text{se } \{i_1, i_2, \dots, i_n\} \text{ distintos em ordem nao ciclica} \end{cases} \quad (189)$$

Um tensor de terceira ordem possui 27 componentes, ou seja, 3^3 componentes. Logo, um tensor de ordem n possui 3^n componentes.

APÊNDICE B – APLICAÇÕES DE HERMITE

Divide-se o apêndice em Interpolação de Hermite e Polinômios de Hermite. O primeiro assunto é interessante para a área de computação onde pode-se aplicar interpolações, através do algoritmo fornecido, mais precisas do que as mais conhecidas, à exemplo de linear, cúbica e spline. Já no segundo tópico deste apêndice polinômios de Hermite unidimensionais e multidimensionais são abordados.

B.1 INTERPOLAÇÃO DE HERMITE

Objetivando a preparação aos métodos de aproximação a serem aplicados à resolução numérica de equações diferenciais ordinárias com valores no contorno e de equações diferenciais parciais métodos de interpolações são utilizados (SECCHI, 2011).

Um dos métodos de aproximações de função utilizados é a interpolação de Hermite. Nessa interpolação necessitam-se de n pontos conhecidos para aproximar a função em $k = 2n$ pontos de Hermite. Construído o polinômios, aplica-se a função no ponto x_k onde deseja-se obter o valor da função.

Para aplicar a interpolação de Hermite tabela de diferenças finitas deve ser aplicada e as seguintes restrições devem ser cumpridas:

- z representa um ponto de interpolação em Hermite, enquanto que x representa pontos dados para interpolação, a primeira restrição é:

$$z_{2i} = z_{2i+1} = x_i;$$

- $f[z_i] = f(x_i);$
- $f[z_i, \dots, z_k] = \frac{f[z_{i+1}, \dots, z_k] - f[z_i, \dots, z_{k-1}]}{z_k - z_i}$

onde pode-se aplicar a seguinte relação de recursividade:

$$f[z_{i+1}, \dots, z_k] = \frac{f[z_{i+2}, \dots, z_k] - f[z_{i+1}, \dots, z_{k-1}]}{z_k - z_{i+1}},$$

- $z_i \leq z_{i+1} \leq z_k$;
- $f[z_{2i}, z_{2i+1}] = f'(x_i)$;
- $f[z_{2i+1}, z_{2i+2}] = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$.

A interpolação de Hermite possui vantagens em relação às outras pois conta com informação das derivadas da função e, conseqüentemente, consegue ser mais fidedigna ao comportamento da função.

B.2 POLINÔMIOS DE HERMITE

B.2.1 UNIDIMENSIONAIS

De acordo com a referência CRFM (2014) define-se polinômios de Hermite físicos via uma função geração dada por:

$$g(x, t) = \exp(-t^2 + 2tx) = \exp(-t^2)\exp(2tx) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}, \quad (190)$$

onde, $H_n(x)$ são os polinômios de Hermite.

Derivando a equação (190) em relação à t e rearranjando tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} &= (-2t + 2x)\exp(-t^2 + 2tx) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) n \frac{t^{n-1}}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H_n(x) n \frac{t^{n-1}}{n!} \rightarrow \\ &= (-2t + 2x) \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n-1}}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H_n(x) n \frac{t^{n-1}}{n!} \rightarrow \\ &= -2 \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} + 2x \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H_n(x) n \frac{t^{n-1}}{n!} \rightarrow \\ &= -2 \sum_{n=1}^{\infty} H_{n-1}(x) n \frac{t^n}{n!} + 2x \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x) \frac{t^n}{n!} \rightarrow \\ &= -2 \sum_{n=0}^{\infty} H_{n-1}(x) n \frac{t^n}{n!} + 2x \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x) \frac{t^n}{n!}. \end{aligned} \quad (191)$$

Agrupando os termos em t^n das somas, tem-se uma fórmula de recorrência dos $H_n(x)$:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \forall n \geq 0 \quad (192)$$

onde n é a ordem desejada dos polinômios de Hermite físicos.

De outro modo, pode-se diferenciar a equação (190) em relação à variável x . Realizando procedimento análogo à derivação em relação à t , obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial x} &= 2tg = 2t \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} \rightarrow \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dx} H_n(x) \frac{t^n}{n!} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} \\ &= 2 \sum_{n=1}^{\infty} H_{n-1}(x) \frac{t^n}{n!} n = 2 \sum_{n=0}^{\infty} H_{n-1}(x) n \frac{t^n}{n!}. \end{aligned} \quad (193)$$

Agrupando-se os termos em t^n das somas, tem-se a fórmula de recorrência das derivadas de $H_n(x)$:

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = 2nH_{n-1}(x), \text{ ou } H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x), \forall n \geq 1 \quad (194)$$

Portanto.

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x), \quad (195)$$

com isso:

$$\begin{aligned} H''_n(x) &= 2xH'_n(x) + 2H_n(x) - H'_{n+1}(x) \\ &= 2xH'_n(x) + 2H_n(x) - 2(n+1)H_n(x) \\ &= 2xH'_n(x) - 2nH_n(x), \end{aligned} \quad (196)$$

a última equação implica em:

$$H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0. \quad (197)$$

Logo, H_n é solução de:

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0 \quad (198)$$

Expandindo $g(x, t)$ em uma série de Taylor em x , tem-se:

$$\exp(-t^2 + 2tx) = 1 + \frac{(-t^2 + 2tx)^1}{1!} + O(t^2) = \sum_{n=0}^1 H_n \frac{t^n}{n!} + O(t^2), \quad (199)$$

logo:

$$1 + 2xt + O(t^2) = H_0(x) + H_1(x) + O(t^2), \quad (200)$$

sendo assim:

$$H_0(x) = 1 \quad (201)$$

$$H_1(x) = 2x \quad (202)$$

Aplicando as fórmulas de recorrência consegue-se todos os polinômios de Hermite físicos. Os 9 (nove) primeiros são dados por:

$$H_0(x) = 1 \quad (203)$$

$$H_1(x) = 2x \quad (204)$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2 \quad (205)$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \quad (206)$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12 \quad (207)$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x \quad (208)$$

$$H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120 \quad (209)$$

$$H_7(x) = 128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x \quad (210)$$

$$H_8(x) = 256x^8 - 3584x^6 + 13440x^4 - 13440x^2 + 1680. \quad (211)$$

Uma forma mais genérica de obtenção de polinômios de Hermite físicos é pela fórmula de Rodrigues física dada por:

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2) \quad (212)$$

Outro tipo de polinômio de Hermite é o probabilístico. Os 9 (nove) primeiros deste tipo são dados por:

$$He_0(x) = 1 \quad (213)$$

$$He_1(x) = x \quad (214)$$

$$He_2(x) = x^2 - 1 \quad (215)$$

$$He_3(x) = x^3 - 3x \quad (216)$$

$$He_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3 \quad (217)$$

$$He_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15x \quad (218)$$

$$He_6(x) = x^6 - 15x^4 + 45x^2 - 15 \quad (219)$$

$$He_7(x) = x^7 - 21x^5 + 105x^3 - 105x \quad (220)$$

$$He_8(x) = x^8 - 28x^6 + 210x^4 - 420x^2 + 105. \quad (221)$$

Uma forma mais genérica de obtenção de polinômios de Hermite probabilísticos é pela fórmula de Rodrigues probabilística dada por:

$$He_n(x) = (-1)^n \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^n}{dx^n} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right). \quad (222)$$

B.2.2 MULTIDIMENSIONAIS

Shan et al. (2006) traz em seu artigo um estudo sobre polinômios de Hermite multidimensionais que são função da velocidade de uma partícula em relação à um referencial móvel e que satisfazem a seguinte fórmula de recorrência:

$$\xi_i H_{i_1, i_2, \dots, i_n}^n = H_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{n+1} + \sum_{k=1}^n \delta_{ik} H_{i_1, i_2, \dots, i_{k-1}, i_k, i_{k+1}, \dots, i_n}^{n-1} \quad (223)$$

De acordo com Shan et al. (2006), os polinômios de Hermite probabilísticos multidimensionais são dados por:

$$H_0^0(\xi) = 1 \quad (224)$$

$$H_i^1(\xi) = \xi_i \quad (225)$$

$$H_{ij}^2(\xi) = \xi_i \xi_j - \delta_{ij}. \quad (226)$$

Divergindo um pouco da nomenclatura de Shan et al. (2006), tome cada polinômio de Hermite em uma ordem N como sendo um conjunto de equações que varia de acordo com a dimensão D do tensor. Sendo assim o polinômio H_D^N representa o polinômio tensorial de Hermite de dimensão D com ordem N .

Para $D = 2$ e $N \leq 3$ tem-se:

\Rightarrow *Probabilísticos* : (227)

$$H_2^0 = 1 \quad (228)$$

$$H_2^1 = [x, y] \quad (229)$$

$$H_2^2 = [[x^2 - 1, xy], [xy, y^2 - 1]] \quad (230)$$

$$H_2^3 = [[[x^3 - 3x, x^2y - y], [x^2y - y, xy^2 - x]], \quad (231)$$

$$[[x^2y - y, xy^2 - x], [xy^2 - x, y^3 - 3y]]] \quad (232)$$

\Rightarrow *Físicos* : (233)

$$H_2^0 = 1 \quad (234)$$

$$H_2^1 = [2x, 2y] \quad (235)$$

$$H_2^2 = [[4x^2 - 2, 4xy], [4xy, 4y^2 - 2]] \quad (236)$$

$$H_2^3 = [[[8x^3 - 12x, 8x^2y - 4y], [8x^2y - 4y, 8xy^2 - 4x]], \quad (237)$$

$$[[8x^2y - 4y, 8xy^2 - 4x], [8xy^2 - 4x, 8y^3 - 12y]]]. \quad (238)$$

Como pode ser observado no conjunto de equações acima, tensor de ordem 0 (zero) é um escalar, ordem 1 (um) é um vetor, 2 (dois) matriz e 3 (três) ainda não possui nomenclatura matemática. Esses tensores podem ser utilizados para derivação de stencils de lattice Boltzmann. Na tarefa de obtenção de stencils, Shan et al. (2006) utiliza tensores de Hermite probabilísticos enquanto Mattila et al. (2014) físicos. Philippi et al. (2006) usa de um conjunto de tensores proporcionais a tensores de Hermite físicos.

Cabe destacar que uma forma genérica de obtenção de tensores de Hermite, tanto físicos quanto probabilísticos, de dimensão e ordens mais altas consta em algoritmo desenvolvido em Python versão 2.7 no Anexo (A).

Polinômios de Hermite são polinômios ortonormais utilizados na expansão da função distribuição de probabilidades a fim de obter a solução da equação de Boltzmann. Devido à suas propriedades mostram-se bastante interessantes para diversas aplicações.

ANEXO A – ALGORITMO PARA OBTENÇÃO DE POLINÔMIOS DE HERMITE TENSORIAIS

A.1 FÍSICOS

Tensor Hermite Polynomials

```
In [1]: import sympy as sp
        from IPython.core.display import display
        sp.init_printing(use_latex=True)
```

Scalar Hermite Polynomials

```
In [2]: def Hn(theN, symb = 'x', stat=True):
        n = sp.Integer(theN)
        x = sp.Symbol(symb)
        one = sp.Integer(1)
        two = sp.Integer(2)
        if stat:
            exp = (-one) ** n * sp.exp(x ** 2 / two)
            der = sp.exp(-x ** 2 / two)
        else:
            exp = (-one) ** n * sp.exp(x ** 2)
            der = sp.exp(-x ** 2)
        return exp * sp.diff(der, x, n)
```

```
In [3]: sH = [ Hn(i, stat=False) for i in range(6) ]
        x = list(sH[1].free_symbols)[0]
        for i, j in enumerate(sH):
            display(sp.Eq(sp.Function('H%d(%s)' % (i, x)), j.expand()))
```

False

$$H1(x) = 2x$$

$$H2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

Tensor Hermite Polynomials

```
In [4]: def THn(theN, DIM = 3, stat=True, simb = 'x y z'):
        """def THn(theN, DIM = 3, stat=True, simb = 'x y z'):
        Returns the {theN}-th Hermite tensor polynomial in the
        variables {simb} for a {DIM}-dimensional Euclidean
        space, with 1 <= {DIM} <= 3.
        """
        # Gradient operator
        def grad(oper):
            RET = list()
            if isinstance(oper, list):
                for i in range(DIM):
                    RET.append(grad(oper[i]))
            else:
                for i in range(DIM):
                    RET.append(sp.diff(oper, BAS[i]))
            return RET
        # Recursive list multiplier
        def symbRecMul(symbFact, LST):
            for i, elem in enumerate(LST):
                if isinstance(elem, list):
                    LST[i] = symbRecMul(symbFact, elem)
                else:
                    LST[i] = (LST[i] * symbFact).simplify().expand()
            return LST
        # Constants and preparations
        n = sp.Integer(theN)
        if DIM < 1:
            DIM = 1
        if DIM > 3:
            DIM = 3
        DIM = sp.Integer(int(DIM))
        one = sp.Integer(1)
        two = sp.Integer(2)
        three = sp.Integer(3)
        # Spatial coordinates
        x, y, z = sp.symbols(simb)
        # Euclidean space dimensionality
        if DIM == one:
            xi = sp.sqrt(x**two)
            BAS = [x]
        elif DIM == two:
            xi = sp.sqrt(x**two + y**two)
            BAS = [x, y]
        elif DIM == three:
            xi = sp.sqrt(x**two + y**two + z**two)
            BAS = [x, y, z]
        # Weight function
```



```

# Weight function
if stat:
    omega = (two*sp.pi)**(-DIM/two) * sp.exp(-xi**two/two)
else:
    omega = (two*sp.pi)**(-DIM/two) * sp.exp(-xi**two/one)
# Return variable
ret = omega.copy()
for n in range(theN):
    ret = grad(ret)
# Return
if theN == 0:
    return ((-one)**theN / omega * ret).simplify()
else:
    return symbRecMul((-one)**theN / omega, ret)

```

Two-Dimensional Hermite Tensors — First Few Examples

In [5]: `H2 = list()`

In [6]: `H2.append(THn(0, DIM = 2, stat=False))`
`H2[0]`

Out[6]: `1`

In [7]: `H2.append(THn(1, DIM = 2, stat=False))`
`H2[1]`

Out[7]: `[2x, 2y]`

In [8]: `H2.append(THn(2, DIM = 2, stat=False))`
`H2[2]`

Out[8]: `[[4x2 - 2, 4xy], [4xy, 4y2 - 2]]`

In [10]: `H2.append(THn(3, DIM = 2, stat=False))`
`for i in H2[3]:`
`display(i)`

`[[8x3 - 12x, 8x2y - 4y], [8x2y - 4y, 8xy2 - 4x]]`

`[[8x2y - 4y, 8xy2 - 4x], [8xy2 - 4x, 8y3 - 12y]]`

In [12]: `H2.append(THn(5, DIM = 2, stat=False))`
`for i in H2[5]:`
`for j in i:`
`for k in j:`
`for l in k:`
`display(l)`

`[32x5 - 160x3 + 120x, 32x4y - 96x2y + 24y]`

`[32x4y - 96x2y + 24y, 32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x]`

`[32x4y - 96x2y + 24y, 32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x4y - 96x2y + 24y, 32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y, 32xy4 - 96xy2 + 24x]`

`[32x4y - 96x2y + 24y, 32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y, 32xy4 - 96xy2 + 24x]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y, 32xy4 - 96xy2 + 24x]`

`[32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y, 32xy4 - 96xy2 + 24x]`

`[32xy4 - 96xy2 + 24x, 32y5 - 160y3 + 120y]`

Three-Dimensional Hermite Tensors — First Few Examples

```
In [14]: H3 = list()

In [15]: H3.append(THn(0, DIM = 3, stat=False))
H3[0]

Out[15]: 1

In [16]: H3.append(THn(1, DIM = 3, stat=False))
H3[1]

Out[16]: [2x, 2y, 2z]

In [17]: H3.append(THn(2, DIM = 3, stat=False))
H3[2]

Out[17]: [[4x2 - 2, 4xy, 4xz], [4xy, 4y2 - 2, 4yz], [4xz, 4yz, 4z2 - 2]]

In [18]: H3.append(THn(3, DIM = 3, stat=False))
for i in H3[3]:
    for j in i:
        display(j)

[8x3 - 12x, 8x2y - 4y, 8x2z - 4z]
[8x2y - 4y, 8xy2 - 4x, 8xyz]
[8x2z - 4z, 8xyz, 8xz2 - 4x]
[8x2y - 4y, 8xy2 - 4x, 8xyz]
[8xy2 - 4x, 8y3 - 12y, 8y2z - 4z]
[8xyz, 8y2z - 4z, 8yz2 - 4y]
[8x2z - 4z, 8xyz, 8xz2 - 4x]
[8xyz, 8y2z - 4z, 8yz2 - 4y]
[8xz2 - 4x, 8yz2 - 4y, 8z3 - 12z]
```

A.2 PROBABILÍSTICOS

Tensor Hermite Polynomials

```
In [1]: import sympy as sp
from IPython.core.display import display
sp.init_printing(use_latex=True)
```

Scalar Hermite Polynomials

```
In [2]: def Hn(theN, simb = 'x', stat=True):
    n = sp.Integer(theN)
    x = sp.Symbol(simb)
    one = sp.Integer(1)
    two = sp.Integer(2)
    if stat:
        exp = (-one) ** n * sp.exp(x ** 2 / two)
        der = sp.exp(-x ** 2 / two)
    else:
        exp = (-one) ** n * sp.exp(x ** 2)
        der = sp.exp(-x ** 2)
    return exp * sp.diff(der, x, n)

In [3]: SH = [ Hn(i, stat=False) for i in range(6) ]
x = list(SH[1].free_symbols)[0]
for i, j in enumerate(SH):
    display(sp.Eq(sp.Function('%H%d(%s)' % (i, x)), j.expand()))
```

False

$$H1(x) = 2x$$

$$H2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

Tensor Hermite Polynomials

```
In [4]: def THn(theN, DIM = 3, stat=True, simb = 'x y z'):
        """def THn(theN, DIM = 3, stat=True, simb = 'x y z'):
        Returns the {theN}-th Hermite tensor polynomial in the
        variables {simb} for a {DIM}-dimensional Euclidean
        space, with 1 <= {DIM} <= 3.
        """
        # Gradient operator
        def grad(oper):
            RET = list()
            if isinstance(oper, list):
                for i in range(DIM):
                    RET.append(grad(oper[i]))
            else:
                for i in range(DIM):
                    RET.append(sp.diff(oper, BAS[i]))
            return RET
        # Recursive list multiplier
        def symbRecMul(symbFact, LST):
            for i, elem in enumerate(LST):
                if isinstance(elem, list):
                    LST[i] = symbRecMul(symbFact, elem)
                else:
                    LST[i] = (LST[i] * symbFact).simplify().expand()
            return LST
        # Constants and preparations
        n = sp.Integer(theN)
        if DIM < 1:
            DIM = 1
        if DIM > 3:
            DIM = 3
        DIM = sp.Integer(int(DIM))
        one = sp.Integer(1)
        two = sp.Integer(2)
        three = sp.Integer(3)
        # Spatial coordinates
        x, y, z = sp.symbols(simb)
        # Euclidean space dimensionality
        if DIM == one:
            xi = sp.sqrt(x**two)
            BAS = [x]
        elif DIM == two:
            xi = sp.sqrt(x**two + y**two)
            BAS = [x, y]
        elif DIM == three:
            xi = sp.sqrt(x**two + y**two + z**two)
            BAS = [x, y, z]
        # Weight function
```

```

# Weight function
if stat:
    omega = (two*sp.pi)**(-DIM/two) * sp.exp(-xi**two/two)
else:
    omega = (two*sp.pi)**(-DIM/two) * sp.exp(-xi**two/one)
# Return variable
ret = omega.copy()
for n in range(theN):
    ret = grad(ret)
# Return
if theN == 0:
    return ((-one)**theN / omega * ret).simplify()
else:
    return symbRecMul((-one)**theN / omega, ret)

```

Two-Dimensional Hermite Tensors — First Few Examples

In [5]: `H2 = list()`

In [6]: `H2.append(THn(0, DIM = 2, stat=False))`
`H2[0]`

Out[6]: `1`

In [7]: `H2.append(THn(1, DIM = 2, stat=False))`
`H2[1]`

Out[7]: `[2x, 2y]`

In [8]: `H2.append(THn(2, DIM = 2, stat=False))`
`H2[2]`

Out[8]: `[[4x2 - 2, 4xy], [4xy, 4y2 - 2]]`

In [10]: `H2.append(THn(3, DIM = 2, stat=False))`
`for i in H2[3]:`
`display(i)`

`[[8x3 - 12x, 8x2y - 4y], [8x2y - 4y, 8xy2 - 4x]]`

`[[8x2y - 4y, 8xy2 - 4x], [8xy2 - 4x, 8y3 - 12y]]`

In [12]: `H2.append(THn(5, DIM = 2, stat=False))`
`for i in H2[5]:`
`for j in i:`
`for k in j:`
`for l in k:`
`display(l)`

`[32x5 - 160x3 + 120x, 32x4y - 96x2y + 24y]`

`[32x4y - 96x2y + 24y, 32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x]`

`[32x4y - 96x2y + 24y, 32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x4y - 96x2y + 24y, 32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y, 32xy4 - 96xy2 + 24x]`

`[32x4y - 96x2y + 24y, 32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y, 32xy4 - 96xy2 + 24x]`

`[32x3y2 - 16x3 - 48xy2 + 24x, 32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y]`

`[32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y, 32xy4 - 96xy2 + 24x]`

`[32x2y3 - 48x2y - 16y3 + 24y, 32xy4 - 96xy2 + 24x]`

`[32xy4 - 96xy2 + 24x, 32y5 - 160y3 + 120y]`

Three-Dimensional Hermite Tensors — First Few Examples

In [14]: `H3 = list()`

In [15]: `H3.append(THn(0, DIM = 3, stat=False))`
`H3[0]`

Out[15]: `1`

In [16]: `H3.append(THn(1, DIM = 3, stat=False))`
`H3[1]`

Out[16]: `[2x, 2y, 2z]`

In [17]: `H3.append(THn(2, DIM = 3, stat=False))`
`H3[2]`

Out[17]: `[[4x2 - 2, 4xy, 4xz], [4xy, 4y2 - 2, 4yz], [4xz, 4yz, 4z2 - 2]]`

In [18]: `H3.append(THn(3, DIM = 3, stat=False))`
`for i in H3[3]:`
`for j in i:`
`display(j)`

`[8x3 - 12x, 8x2y - 4y, 8x2z - 4z]`

`[8x2y - 4y, 8xy2 - 4x, 8xyz]`

`[8x2z - 4z, 8xyz, 8xz2 - 4x]`

`[8x2y - 4y, 8xy2 - 4x, 8xyz]`

`[8xy2 - 4x, 8y3 - 12y, 8y2z - 4z]`

`[8xyz, 8y2z - 4z, 8yz2 - 4y]`

`[8x2z - 4z, 8xyz, 8xz2 - 4x]`

`[8xyz, 8y2z - 4z, 8yz2 - 4y]`

`[8xz2 - 4x, 8yz2 - 4y, 8z3 - 12z]`