

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

SIMULAÇÃO DE FENÔMENOS TERMO-FLUIDODINÂMICOS PELO
EMPREGO DOS MÉTODOS DE DIFERENÇAS FINITAS À SOLUÇÃO DA
EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

Tese submetida à

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

para a obtenção do grau de

DOUTOR EM ENGENHARIA

RODRIGO SURMAS

Florianópolis, abril de 2010

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

SIMULAÇÃO DE FENÔMENOS TERMO-FLUIDODINÂMICOS PELO
EMPREGO DOS MÉTODOS DE DIFERENÇAS FINITAS À SOLUÇÃO DA
EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

RODRIGO SURMAS

Esta tese foi julgada adequada para a obtenção do título de

DOCTOR EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA

sendo aprovada em sua forma final.

Paulo César Philippi, Dr. Ing. - Orientador

Luís Orlando Emerich do Santos, Dr. Eng. - Co-orientador

Eduardo Alberto Fancello, D. Sc. - Coordenador do Curso

Banca Examinadora

Pablo Javier Blanco, D. Sci. - Presidente

Aristeu da Silveira Neto, Dr.

Amir A. Martins de Oliveira Júnior, Ph.D.

Marcelo Krajnc Alves, Ph.D.

Agradecimentos

Ao Philippi e ao Emerich pela orientação.

Ao CNPq pela bolsa que me concedeu desde que eu comecei no LMPT, em setembro de 2000, e me acompanhou até que eu entrasse na Petrobras.

À Petrobras, que apoiou toda a parte final do meu doutorado, especialmente ao Vinicius e ao Eugênio.

A todos os amigos que compartilharam bons momentos e idéias comigo durante a tese, Alexandre, Anderson, André, Capico, Carelli, Celsão, Diogo, Emerich, Fabiano, Fabio, Haverroth, Hegele, Humberto, Iara, Ivan, Julian, Mayer, Passarinho, Philippi, Rossano, Saulo e Vinicius.

A toda minha família, Mario, Regina e Manu, Arnaldo, Irene, Fran, Milene, Darlei e Ju, por todo o apoio.

E, principalmente, a Fe, por tudo. Te amo.

Sumário

Resumo	p. ix
Abstract	p. xi
Lista de Figuras	p. xiii
Lista de Tabelas	p. xvii
Simbologia	p. xix
1 Introdução	p. 1
2 Fundamentos da Teoria Cinética dos Gases	p. 5
2.1 Equação de Transporte de Boltzmann	p. 5
2.1.1 Descrição Microscópica	p. 5
2.1.2 Equação de Liouville	p. 7
2.1.3 Hierarquia BBGKY	p. 9
2.1.4 Equação de Transporte de Boltzmann	p. 10
2.1.5 Invariantes de Colisão	p. 14
2.1.6 Distribuição de Equilíbrio	p. 15
2.1.7 Teorema H	p. 16
2.2 Solução da Equação de Boltzmann	p. 17
2.2.1 Múltiplos Tempos de Relaxação	p. 17
2.2.2 Modelo de Colisão BGK	p. 19
2.2.3 Modelo de Colisão a Dois Tempos de Relaxação (TRT)	p. 19
2.3 Equações da Fluidodinâmica	p. 20

2.3.1	Balanco de Massa	p. 20
2.3.2	Balanco de Quantidade de Movimento	p. 20
2.3.3	Balanco de Energia	p. 21
2.3.4	Tensor Tensão e Fluxo de Calor	p. 21
3	Análise de Chapman-Enskog	p. 23
3.1	Modelo BGK	p. 24
3.1.1	Análise de Escala	p. 24
3.1.2	Escoamento Não Isotérmicos	p. 25
3.1.3	Escoamentos Isotérmicos	p. 31
3.1.4	Fenômenos Puramente Difusivos	p. 33
3.2	Escoamentos a Números de Knudsen Elevados	p. 34
3.2.1	Escoamentos Unidimensionais	p. 34
3.2.1.1	Fenômenos Puramente Difusivos	p. 34
3.2.1.2	Escoamentos Isotérmicos	p. 35
3.2.1.3	Escoamentos Não Isotérmicos	p. 37
3.2.2	Escoamentos Bidimensionais	p. 38
3.2.2.1	Fenômenos Puramente Difusivos	p. 38
3.2.2.2	Escoamentos Isotérmicos	p. 39
3.2.2.3	Escoamentos Não Isotérmicos	p. 40
3.3	Modelo de Colisão a Dois Tempos de Relaxação (TRT)	p. 42
4	Discretização da Equação de Boltzmann	p. 47
4.1	Solução da Equação de Boltzmann	p. 47
4.2	Métodos de Lattice Boltzmann	p. 47
4.3	Modelos de Lattice Gas	p. 49
4.4	Modelos de Lattice Boltzmann	p. 51
5	Discretização do Espaço Físico e do Tempo	p. 55

5.1	Métodos de Lattice Boltzmann	p. 55
5.1.1	Derivação de He and Luo	p. 56
5.1.2	Análise de Escala	p. 57
5.1.3	Análise de Chapman-Enskog	p. 57
5.2	Modelo de Colisão a Dois Tempos de Relaxação	p. 61
5.2.1	Análise de Chapman-Enskog	p. 61
5.3	Resolvendo a Equação de Lattice Boltzmann	p. 62
5.4	Métodos de Diferenças Finitas	p. 64
5.5	Discretizações Desacopladas	p. 65
5.5.1	Discretização do Tempo	p. 65
5.5.2	Discretização Espacial	p. 66
5.6	Discretização da Derivada Material	p. 67
5.7	Análise de Chapman-Enskog	p. 68
5.7.1	Discretizações Desacopladas do Espaço e do Tempo	p. 68
5.7.2	Runge-Kutta de Ordem δt^2	p. 69
5.7.3	Runge-Kutta de Ordem δt^4	p. 72
6	Discretização do Espaço de Velocidades	p. 73
6.1	Determinação da Distribuição de Equilíbrio em um Espaço Discreto . .	p. 75
6.2	Métodos de Boltzmann para Escoamentos Não-Isotérmicos	p. 77
6.3	Quadratura da Distribuição de Equilíbrio com Abscissas Prescritas . .	p. 79
6.4	Quadratura Unidimensional	p. 82
6.5	Quadratura Bidimensional	p. 84
6.5.1	Redes Space-Filling	p. 85
6.5.1.1	Redes de Segunda Ordem	p. 85
6.5.1.2	Redes de Terceira Ordem	p. 86
6.5.1.3	Redes de Quarta Ordem	p. 87
6.5.1.4	Redes de Quarta Ordem Incompletas	p. 88

6.5.1.5	Redes de Quinta Ordem	p. 89
6.5.1.6	Redes de Sexta Ordem	p. 90
6.5.2	Redes Não Space-Filling	p. 91
6.5.2.1	Redes de Segunda Ordem	p. 91
6.5.2.2	Redes de Terceira Ordem	p. 92
6.5.2.3	Redes de Quarta Ordem	p. 93
6.5.2.4	Redes de Quarta Ordem Incompletas	p. 94
6.5.2.5	Redes de Quinta Ordem	p. 95
6.5.2.6	Outras Redes	p. 96
6.6	Quadratura Tridimensional	p. 97
6.6.1	Redes Space-Filling	p. 98
6.6.1.1	Redes de Segunda Ordem	p. 98
6.6.1.2	Redes de Terceira Ordem	p. 98
6.6.1.3	Redes de Quarta Ordem	p. 99
6.6.1.4	Redes de Quarta Ordem Incompletas	p. 99
6.6.2	Redes Não Space-Filling	p. 100
6.6.2.1	Redes de Segunda Ordem	p. 100
6.6.2.2	Redes de Terceira Ordem	p. 100
6.6.2.3	Redes de Quarta Ordem	p. 100
6.6.2.4	Redes de Quarta Ordem Incompletas	p. 101
6.7	Efeitos do Truncamento da Função Distribuição de Equilíbrio	p. 101
6.7.1	D1Q3	p. 102
6.7.2	D2Q9	p. 102
6.7.3	D2V17	p. 103
7	Condições Iniciais e de Contorno	p. 105
7.1	Modelos de Interação das Moléculas de um Fluido com as Fronteiras Sólidas de um Sistema	p. 106

7.1.1	Reflexão Especular	p. 106
7.1.2	Condição de Bounce-Back	p. 107
7.1.3	Condição de Equilíbrio ou Difusa	p. 107
7.1.4	Reconstrução da Função Distribuição nas Fronteiras	p. 108
7.2	Aplicação de Condições de Contorno aos LBMs	p. 108
7.3	Condições Iniciais	p. 112
8	Resultados	p. 115
8.1	Medição dos Coeficientes de Transporte	p. 116
8.1.1	Difusão de um Degrau	p. 116
8.1.1.1	Formulação do Problema	p. 116
8.1.1.2	Validação da Análise de Chapman-Enskog no Esquema de Colisão e Propagação	p. 117
8.1.2	Difusão de uma Onda Sinusoidal	p. 120
8.1.2.1	Formulação do Problema	p. 120
8.1.2.2	Validação da Análise de Chapman-Enskog em Alta Or- dem de Kn	p. 121
8.1.2.3	Coeficientes de Transporte em Métodos Numéricos De- sacoplados	p. 124
8.2	Tubo de Choque de Sod	p. 128
8.2.1	Formulação do Problema	p. 128
8.2.2	Efeito da Recuperação de Momentos de Ordem Crescente da Dis- tribuição de Equilíbrio	p. 129
8.3	Escoamento de Couette com Dissipação Viscosa	p. 132
8.4	Cavidade Quadrada com Tampa Deslizante	p. 133
8.5	Escoamentos em Meios Porosos	p. 135
8.6	Análise do Uso de LBMs Alternativos ao Esquema de Colisão e Propagação	p. 139
9	Conclusão	p. 141

Apêndice A – Polinômios de Hermite	p. 145
Apêndice B – Redes	p. 147
B.1 Redes Unidimensionais	p. 147
B.2 Redes Bidimensionais	p. 147
B.2.1 Redes Space-Filling	p. 147
B.2.2 Redes Não Space-Filling	p. 150
B.3 Redes Tridimensionais	p. 152
B.3.1 Redes Space-Filling	p. 152
B.3.2 Redes Não Space-Filling	p. 154
Apêndice C – Lista de Publicações	p. 155
C.1 Congressos e Conferências	p. 155
C.2 Artigos	p. 157
Referências	p. 159

Resumo

Shan e colaboradores^[1] e Philippi e colaboradores^[2], em 2006, reabriram a perspectiva de uso do lattice Boltzmann para a simulação de escoamentos não isotérmicos e/ou a alto número de Knudsen através da resolução direta da equação de Boltzmann ao estabelecerem uma ligação sistemática e consistente entre a Teoria Cinética dos Gases e os métodos de lattice Boltzmann (LBM), determinando condições necessárias para a discretização do espaço de velocidades em diferentes ordens do número de Knudsen. As redes obtidas através do método proposto por eles, de abscissas prescritas, provaram ser estáveis em escoamentos em uma ampla faixa de parâmetros.

Levando em consideração que as redes obtidas através deste método aumentaram significativamente o número de velocidades moleculares necessárias para a discretização do espaço de velocidades e os fenômenos físicos descritos por esta formulação possuem grande complexidade, exigindo uma maior quantidade de parâmetros para que os coeficientes de transporte do fluido simulado em várias escalas de Knudsen possam ser corretamente ajustados, diversas adaptações aos LBMs convencionais precisaram ser realizadas.

Modelos de colisão a múltiplos tempos de relaxação, adequados ao ajuste dos coeficientes de transporte do fluido simulado, foram propostos. Um modelo de colisão a dois tempos de relaxação será discutido e analisado nesta tese.

Do ponto de vista numérico, métodos mais acurados em relação a sua discretização espacial e temporal foram testados com o objetivo de melhorar a representação numérica dos efeitos físicos relacionados a números de Knudsen finitos, de forma que o comportamento do modelo de colisão utilizado fosse representado com mais acurácia, evitando que ele se confundisse com erros numéricos do método de solução.

Condições de contorno adequadas a simulação destes escoamentos também tiveram que ser propostas. Seu uso em simulações utilizando diferentes métodos numéricos revela a dificuldade em ajustá-las quando fenômenos em uma escala inferior a da fluidodinâmica são considerados.

Todos os métodos propostos foram analisados através da expansão de Chapman-Enskog. O objetivo destas análises foi comparar os métodos numéricos e os modelos de colisão no contínuo teoricamente, prevendo as equações macroscópicas que eles deveriam obedecer em diversas ordens do número de Knudsen.

Depois de uma extensa discussão teórica sobre o método de lattice Boltzmann, diversas simulações foram realizadas com o objetivo de testar: i) o efeito que a correta representação de ordens crescentes dos momentos da distribuição de equilíbrio do contínuo no espaço discreto de velocidades possui, ii) a acurácia dos diferentes métodos de diferenças finitas empregados em diversas ordens de Knudsen, iii) a acurácia das análises de Chapman-Enskog realizadas e por fim, iv) a influência das condições iniciais e de contorno na evolução de escoamentos simulados a diversas ordens do número de Knudsen.

Palavras-chave: métodos de lattice Boltzmann, quadratura por abscissas prescritas, análise de Chapman-Enskog.

Abstract

Shan et al.^[1] and Philippi et al.^[2], in 2006, reopened the prospect of using the lattice Boltzmann method to simulate non isothermal and/or high Knudsen number flows through the direct solution of the Boltzmann equation when they established a systematic link between the Kinetic Theory of Gases and the lattice Boltzmann methods (LBM), determining necessary conditions for the discretization of the velocity space in different orders of the Knudsen number. The lattices obtained through the method proposed by them, a prescribed abscissas quadrature, proved to be stable in flows over a wide range of parameters.

Considering that the lattices obtained by this method significantly increased the number of discrete molecular velocities required for the discretization of velocity space and the physical phenomena described by this formulation can be very complex, requiring a large number of parameters for setting the transport coefficients of the fluid simulated at various Knudsen scales, several adjustments to the conventional LBMs must be done.

Collision models with multiple relaxation times, appropriate to adjust the transport coefficients of the simulated fluid, were proposed. A simplified collision model with two relaxation times is discussed and analysed in this work.

From the numerical point of view, more accurate methods in relation to their spatial and temporal discretizations were tested with the aim of improving the numerical representation of the physical effects related to finite Knudsen numbers, avoiding the numerical error misinterpretations as real physical phenomena.

Suitable boundary conditions to simulate these flows had also to be proposed. Its use in simulations using several numerical methods highlighted the difficulty in adjusting them when physical phenomena of a scale more refined than the conventional fluid dynamics scale are considered.

All the proposed methods were analysed theoretically through Chapman-Enskog expansions. The purpose of these analyses was to compare the numerical methods applied and the collision models in the continuum theory, predicting the macroscopic equations that they should obey in different Knudsen number orders.

After an extensive theoretical discussion about the lattice Boltzmann method, several simulations were done with the purpose of testing: i) the effect that the correct representation of increasing orders of the moments of the equilibrium distribution in the continuous space have in the simulations, ii) the accuracy of the different finite difference methods employed to simulate various Knudsen number order phenomena, iii) the accuracy of the Chapman-Enskog analyses done and, iv) the influence of the initial and boundary conditions in the flows simulated at several Knudsen number orders.

Keywords: lattice Boltzmann method, quadrature based on prescribed abscissas, Chapman-Enskog analysis.

Lista de Figuras

1	Variáveis de integração no termo de colisão da equação de transporte de Boltzmann.	p. 10
2	Domínio de integração do termo de colisão da equação de Boltzmann, Equação 2.17.	p. 13
3	Etapa de colisão nos modelos de lattice gas.	p. 50
4	Etapa de propagação nos modelos de lattice gas.	p. 51
5	Exemplo de rede formada por velocidades discretas restritas às direções principais.	p. 85
6	D2Q9	p. 86
7	D2V17	p. 87
8	D2V37	p. 88
9	D2V25w1	p. 88
10	D2V25w6	p. 88
11	D2V53	p. 89
12	D2V81	p. 90
13	D2Q7	p. 92
14	D2V33n	p. 92
15	D2V12 ₁	p. 93
16	D2V12 ₂	p. 93
17	D2V19n	p. 94
18	D2V20n	p. 94
19	D2V21n	p. 94
20	D2V17n	p. 95
21	D2V28n	p. 95

22	D3V6	p. 98
23	D3V8	p. 98
24	D3V12	p. 98
25	D3V24	p. 98
26	Distribuições de moléculas refletidas especularmente.	p. 106
27	Condição de contorno de Bounce-Back.	p. 107
28	Condição de contorno de equilíbrio ou difusa.	p. 108
29	Difusão de um degrau de uma propriedade.	p. 116
30	Coeficientes de transporte medidos em diferentes redes utilizando o esquema de colisão e propagação. Os pontos são resultados de simulações numéricas e as linhas a previsão realizada pela análise de Chapman-Enskog.	p. 117
31	Coeficientes de transporte medidos em diferentes redes utilizando o esquema de colisão e propagação. Os pontos são resultados de simulações numéricas e as linhas a previsão realizada pela análise de Chapman-Enskog.	p. 118
32	Viscosidade cinemática medida em relação ao número de Prandtl do fluido, comparada a previsão analítica realizada (retas).	p. 119
33	Difusão de uma onda sinusoidal.	p. 120
34	Medição da difusividade mássica em função do tempo em um fenômeno puramente difusivo simulado em uma rede D1V11 com um método de Runge-Kutta de segunda ordem considerando diferentes condições iniciais. Resultados da análise de Chapman-Enskog em ordens crescentes são também mostrados.	p. 122
35	Comparação entre diversos esquemas de diferenças finitas para a discretização espacial quando é utilizado um esquema de Runge-Kutta de segunda ordem para a discretização temporal.	p. 125
36	Tubo de choque de Sod.	p. 128
37	Medida da velocidade do som em um domínio com relação ao desvio da temperatura θ	p. 129
38	Simulação do tubo de choque utilizando duas discretizações espaço-temporais diferentes, em um domínio unidimensional.	p. 130

39	Distribuição de temperatura e densidade no problema do tubo de choque de Sod.	p. 132
40	Escoamento de Couette. A temperatura a) e a velocidade b) são comparadas com a solução dada pelas equações de Navier-Stokes-Fourier. Os pontos correspondem as simulações realizadas através do LBM utilizando duas malhas diferentes, uma com cinco pontos e outra com vinte. . . .	p. 133
41	Escoamento em uma cavidade quadrada, $Re = 1000$. São mostradas a componente da velocidade na direção horizontal ao longo do eixo médio da cavidade $x = 0,5L$ e a componente vertical ao longo do eixo médio da cavidade $y = 0,5L$. A velocidade mostrada foi adimensionalizada pela velocidade máxima na malha.	p. 134
42	Permeabilidade absoluta medida em função do tempo de relaxação utilizado (esquerda). Diferença percentual entre a permeabilidade absoluta no limite de baixo Kn e esta permeabilidade medida a Kn finito (direita), definido como a razão entre Ma e $Re^{[3]}$	p. 136
43	Permeabilidade absoluta medida em função de Kn	p. 137

Lista de Tabelas

1	Análise de Chapman-Enskog considerando um fenômeno puramente difusivo unidimensional.	p. 35
2	Análise de Chapman-Enskog de um modelo BGK isotérmico unidimensional.	p. 36
3	Análise de Chapman-Enskog de um modelo BGK não isotérmico unidimensional.	p. 37
4	Análise de Chapman-Enskog considerando um fenômeno puramente difusivo bidimensional.	p. 39
5	Análise de Chapman-Enskog de um modelo BGK isotérmico bidimensional.	p. 40
6	Análise de Chapman-Enskog de um modelo BGK não isotérmico bidimensional.	p. 41
7	Análise de Chapman-Enskog do esquema de colisão e propagação, considerando um fenômeno puramente difusivo.	p. 58
8	Análise de Chapman-Enskog do esquema de colisão e propagação, considerando um modelo BGK isotérmico bidimensional.	p. 59
9	Resultados da análise de Chapman-Enskog do esquema de Runge-Kutta de ordem δt^2 , considerando um fenômeno puramente difusivo.	p. 71
10	Resultados da análise de Chapman-Enskog do esquema de Runge-Kutta de ordem δt^4 , considerando um fenômeno puramente difusivo.	p. 72
11	Redes Unidimensionais	p. 83
12	Rede D1V5.	p. 84
13	Redes não space-filling, formadas por polígonos regulares, suficientes para a quadratura dos momentos listados em 2D.	p. 96
14	Comparação entre os métodos de diferenças finitas desacoplados e o método de colisão e propagação, quando $Kn = 0,001$	p. 126

15	Redes unidimensionais de quarta, quinta, sexta, sétima e oitava ordem, respectivamente.	p. 147
16	D2Q9, rede de segunda ordem.	p. 147
17	D2V17, rede de terceira ordem.	p. 148
18	D2V25, duas redes de quarta ordem incompletas.	p. 148
19	D2V37, rede de quarta ordem.	p. 148
20	D2V53, rede de quinta ordem.	p. 149
21	D2V81, rede de sexta ordem.	p. 149
22	D2V12n, duas redes de terceira ordem.	p. 150
23	D2V17n, rede de quarta ordem incompleta.	p. 150
24	D2V19n, rede de quarta ordem.	p. 150
25	D2V20n, rede de quarta ordem.	p. 151
26	D2V21n, rede de quarta ordem.	p. 151
27	D2V28n, rede de quinta ordem.	p. 151
28	D3Q15, rede de segunda ordem.	p. 152
29	D3Q19, rede de segunda ordem.	p. 152
30	D3V39, rede de terceira ordem.	p. 152
31	D3V41, rede de terceira ordem.	p. 153
32	D3V59, rede de quarta ordem incompleta.	p. 153
33	D3V107, rede de quarta ordem.	p. 153
34	D3V27n, duas redes de terceira ordem.	p. 154
35	D3V33n, rede de quarta ordem incompleta.	p. 154
36	D3V53n, rede de quarta ordem.	p. 154

Simbologia

a	coeficientes de uma expansão em polinômios de Hermite, fator de escala
c_s	velocidade do som
C	indica a presença de um conjunto de partículas em determinada posição no espaço de fases
$\mathbf{C}$	velocidade peculiar
C_P	calor específico a pressão constante
C_V	calor específico a volume constante
CFL	número de Courant
D	número de dimensões de um sistema
E_c	número de Eckert
f	função distribuição de moléculas
f_i	função distribuição de moléculas com velocidade i
f^{eq}	função distribuição de moléculas no equilíbrio
f_i^{eq}	função distribuição de moléculas discreta no equilíbrio, com velocidade molecular ξ_i
$f^{(n)}$	correção de ordem n para a distribuição f na expansão em ordens do número de Knudsen
$f(x, t)$	função genérica f dependente de x e t
F_i	força por unidade de massa que age em uma molécula i
$g(x, t)$	função genérica g dependente de x e t
H	função do teorema H
$\mathcal{H}$	polinômio tensorial de Hermite
i	molécula i , índice da velocidade molecular discreta ξ_i

k	condutividade térmica
Kn	número de Knudsen
l	comprimento característico microscópico
L	comprimento característico macroscópico
$\mathcal{L}$	operador linear
m	massa de uma molécula, ordem de uma expansão
M	número de moléculas
Ma	número de Mach
n	número de partículas por unidade de volume, ordem de uma expansão
N	número de dimensões do espaço de fases, número de total de moléculas em um sistema, ordem de uma expansão
N_i	variável booleana que representa a presença de uma molécula em um sítio com velocidade ξ_i
N_x, n_x	número de pontos de um domínio
p	pressão
P	indica a probabilidade de um conjunto de N partículas estar em determinada posição no espaço de fases no tempo t
Pr	número de Prandtl
P_M	indica a probabilidade de um conjunto de M partículas estar em determinada posição no espaço de fases no tempo t , quando o sistema como um todo possui N partículas
$P_{\alpha\beta}$	tensor tensão
$\mathbf{q}, q_\alpha$	fluxo de calor
r	raio
r_{ij}	distância entre uma molécula i e uma molécula j
R	constante geral dos gases
Re	número de Reynolds

t	tempo
t^*, t_0	tempo adimensional
T	temperatura
T_0	temperatura constante de referência
$\mathbf{u}, u_\alpha$	velocidade macroscópica
U	velocidade macroscópica característica
$\mathbf{x}, \mathbf{x}'$	coordenada espacial
$\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_0$	coordenada espacial adimensional
$\mathbf{x}_i$	posição espacial de uma molécula i
w_i, W_i	pesos relacionados à velocidade molecular ξ_i
γ_1, γ_2	frequências de relaxação
$\gamma^{(m,n)}$	tensor de relaxação
δ	delta de Dirac, tempo característico microscópico
$\delta_{\alpha\beta}$	delta de Kronecker
δt	passo de tempo de um método
δx	distância entre dois pontos adjacentes do espaço físico
Δt	relação entre a menor distância entre dois nós da malha na direção da velocidade molecular ξ e o módulo desta velocidade
ϵ	ângulo de azimute
θ	tempo característico macroscópico
θ_0	desvio adimensional de temperatura em relação a temperatura de referência T_0
μ	viscosidade dinâmica
ν	viscosidade cinemática
ξ, ξ'	velocidade de uma molécula ou de um conjunto de moléculas
ξ^*, ξ_0	velocidade adimensional de uma molécula ou de um conjunto de moléculas

ξ_i	velocidade discreta de uma molécula ou de um conjunto de moléculas
ξ_{0i}	velocidade discreta adimensional de uma molécula ou de um conjunto de moléculas
ρ	massa específica
σ	diâmetro de uma molécula
τ, τ', τ^*	tempo de relaxação, tempo entre o início e o fim de um processo de colisão
$\tau, \tau_{\alpha\beta}$	tensor tensão viscoso
ϕ	uma perturbação
ϕ_{ij}	potencial intermolecular entre uma molécula i e uma j
φ	invariante de colisão
$\psi(\xi)$	polinômio genérico de ξ
Ω	operador de colisão
Ω_i	operador de colisão que age sobre moléculas de velocidade ξ_i
$\nabla, \vec{\nabla}$	gradiente
∇^*	gradiente adimensional
∂_t	derivada parcial em relação ao tempo
∂_α	derivada parcial em relação a coordenada espacial x_α
$\frac{D}{Dt}$	derivada material

1 *Introdução*

Os modelos de lattice gas foram concebidos como uma ferramenta para resolver problemas fluidodinâmicos complexos na metade dos anos 1980s, atraindo a atenção de diversos pesquisadores pela forma intuitiva em que fenômenos físicos complexos eram tratados em escala microscópica. Todavia, as promessas de resolver escoamentos turbulentos, incluindo efeitos térmicos desde a escala molecular e escoamentos a alto número de Knudsen, foram adiadas quando diversos problemas, principalmente ligados ao ruído excessivo do método, foram sendo observados.

No final dos anos 1980s e começo dos anos 1990s, uma alternativa interessante a estes modelos, que eliminava o ruído completamente, foi desenvolvida. No início, os métodos de lattice Boltzmann (LBM) foram concebidos como uma extensão simples dos modelos de lattice gas, dos quais eles dependiam teoricamente. Depois de alguns anos a conexão entre os métodos de lattice Boltzmann e a equação de transporte de Boltzmann foi ficando clara e os métodos de lattice Boltzmann voltaram a ser uma promessa na solução de escoamentos complexos, baseados diretamente, desta vez, na solução da equação de transporte de Boltzmann com operadores de colisão simplificados.

Entretanto, enquanto a simulação de escoamentos isotérmicos através deste método tinha uma boa recepção em diversas áreas da mecânica dos fluidos, principalmente devido: i) a natureza explícita e local do método, que o fazia especialmente adequado ao processamento paralelo de alto desempenho; ii) a facilidade de aplicação de condições de contorno neste método, que o fazia adequado a simulações numéricas utilizando geometrias bastante complexas, e.g., em meios porosos; e iii) a maneira intuitiva com que modelos de colisão simples reproduziam fenômenos complexos, especialmente em escoamentos multifásicos, em uma escala macroscópica; as primeiras tentativas de fazer com que os métodos de lattice Boltzmann simulassem escoamentos não-isotérmicos com eficiência falharam.

Estes maus resultados em desenvolver métodos onde a equação do balanço de energia fosse corretamente representada, causados especialmente pela instabilidade numérica deles, ligada a dificuldade em sua derivação a partir da Teoria Cinética dos Gases, acabaram criando o mito de que os métodos de lattice Boltzmann eram estritamente restritos

à solução de problemas isotérmicos.

As tentativas posteriores de simular escoamentos não isotérmicos passaram a utilizar modelos híbridos, em que a equação de balanço da energia era resolvida de maneira complementar a solução da equação de Boltzmann, tornando o modelo aplicável a solução de problemas termofluidodinâmicos ao custo de duplicar a informação que já deveria estar contida no modelo original, i.e., na distribuição de moléculas do fluido simulado.

Em 2006, todavia, Shan e colaboradores^[1] e Philippi e colaboradores^[2] estabeleceram uma ligação sistemática e consistente entre a Teoria Cinética dos Gases, i.e., entre a equação de Boltzmann, e os métodos de lattice Boltzmann ao estabelecer condições necessárias para a discretização do espaço de velocidades em diferentes ordens do número de Knudsen com o objetivo de obter conjuntos de velocidades discretas com o menor tamanho possível para a representação de fenômenos isotérmicos ou não. Parte desta tese é dedicada a reconstruir os principais passos destes trabalhos e obter estas redes.

Neste contexto, a utilização do modelo de colisão BGK, que possui apenas um tempo de relaxação, precisou também ser revista. Embora um parâmetro livre seja suficiente para representar um escoamento isotérmico com acurácia quando ele é utilizado para ajustar a viscosidade cinemática do fluido, em fenômenos não-isotérmicos ou a alto número de Knudsen um parâmetro apenas não é suficiente para ajustar todos os coeficientes de transporte deste fluido. De forma a contornar esta limitação, modelos de colisão mais complexos, a múltiplos tempos de relaxação, foram também derivados e testados nesta tese.

Do ponto de vista numérico, em adição a isso, métodos mais acurados em relação a sua discretização espacial e temporal foram testados com o objetivo de melhorar a representação numérica dos efeitos físicos relacionados a números de Knudsen finitos, de forma que o comportamento do modelo de colisão utilizado fosse representado com mais acurácia, evitando que ele se confundisse com erros numéricos do método de solução da equação.

Neste trabalho, métodos de diferenças finitas de várias ordens foram utilizados para discretizar a equação de Boltzmann. A perspectiva de uso destes métodos não se resume somente ao caso supracitado. A flexibilização das características dos métodos numéricos utilizados tem importantes aplicações relacionadas ao uso de malhas adaptativas, melhoramento da estabilidade do algoritmo, adaptação de condições de contorno com mais facilidade, entre outros.

De modo a avaliar o uso destes métodos de maneira teórica, comparando-os com os modelos de colisão no contínuo, foi utilizada como ferramenta a análise de Chapman-

Enskog. Posteriormente foram realizadas simulações para confirmar os resultados das análises e medir os diversos efeitos físicos ou numéricos associados com a equação de Boltzmann e sua discretização, em especial, i) o efeito da correta representação de ordens crescentes dos momentos da distribuição de equilíbrio do contínuo no espaço discreto de velocidades, ii) a acurácia dos diferentes métodos de diferenças finitas empregados, iii) a acurácia da análise de Chapman-Enskog realizada, iv) a influência das condições iniciais e de contorno na evolução do escoamento simulado, especialmente a número de Knudsen alto.

Esta tese está organizada da seguinte maneira. No capítulo seguinte os principais modelos de colisão utilizados durante esta tese serão derivados e analisados, bem como sua relação com os modelos de colisão com origem na Teoria Cinética dos Gases. No terceiro capítulo a análise de Chapman-Enskog destes modelos é realizada de maneira detalhada, de forma a obter as equações de balanço em escala macroscópica que os fluidos simulados por estes modelos devem obedecer em ordens crescentes do número de Knudsen quando o espaço de fases é contínuo.

No quarto capítulo os principais aspectos da discretização da equação de Boltzmann serão discutidos. Nos capítulos seguintes esta discretização é detalhada em relação ao espaço físico primeiramente considerando o espaço de velocidades contínuo, Capítulo 5, e depois ignorando a discretização do espaço físico e fazendo a discretização apenas em relação ao espaço de velocidades, Capítulo 6. As equações de balanço esperadas em cada ordem do número de Knudsen nestas situações são analisadas detalhadamente. No Capítulo 7 as condições iniciais e de contorno utilizadas pelo método serão apresentadas e no capítulo seguinte todas as hipóteses formuladas durante a tese são testadas numericamente com o auxílio destas condições. O Capítulo 9 discute os principais resultados encontrados, concluindo a tese.

2 *Fundamentos da Teoria Cinética dos Gases*

2.1 Equação de Transporte de Boltzmann

2.1.1 Descrição Microscópica

O escoamento de um fluido é descrito, usando a hipótese do contínuo ^[4], através dos seus campos de densidade, velocidade e temperatura. Nesta escala, chamada neste trabalho de macroscópica, os detalhes microscópicos deste fluido, e.g., a representação de cada molécula do fluido e suas forças intermoleculares, não são relevantes, desde que sejam propriamente definidas relações constitutivas nas equações de balanço da quantidade de movimento e energia.

Neste tipo de descrição, quando as equações de balanço da massa, quantidade de movimento e energia são escritas, a pressão é relacionada a densidade e a temperatura localmente e o fluxo de calor e o tensor tensão são definidos empiricamente, a modelagem do escoamento deste fluido é concluída quando condições de contorno fisicamente representativas, dependentes diretamente da densidade, velocidade e temperatura, são fixadas nas fronteiras do domínio de solução.

Existem, todavia, fenômenos difíceis de representar através das equações de Navier-Stokes, em que os detalhes da dinâmica molecular tem grande influência sobre os padrões de escoamento observados^[5], e.g., os escoamentos a número de Knudsen alto, definido como a razão entre o livre caminho médio de uma molécula de um fluido e um comprimento macroscópico característico ou os escoamentos envolvendo mais de uma fase ou componente. Neste caso é necessário o desenvolvimento de modelos alternativos ao acima descrito.

Para que estes modelos sejam concebidos é necessário diminuir a escala de observação do fenômeno considerado de maneira a tornar mais claros os seus detalhes. Quando esta escala é suficientemente diminuída, o fluido pode ser modelado, em uma primeira aproximação, como um conjunto de moléculas sem qualquer estrutura interna distinguível,

representadas por pontos materiais. Equações descrevendo o movimento destas moléculas podem então ser escritas como

$$\boldsymbol{\xi}_i = \frac{d\boldsymbol{x}_i}{dt}, \quad (2.1)$$

$$\boldsymbol{F}_i = \frac{d\boldsymbol{\xi}_i}{dt}, \quad (2.2)$$

onde $\boldsymbol{x}_i$ representa a posição e $\boldsymbol{\xi}_i$ a velocidade de cada molécula i no fluido e $\boldsymbol{F}_i$ representa a força total por unidade de massa que age nesta mesma molécula devido à força gravitacional, à presença de outras moléculas ou à presença de paredes sólidas por exemplo. Neste tipo de descrição, chamada neste trabalho de microscópica, a força de interação entre quaisquer duas moléculas pertencentes ao sistema considerado precisa ser determinada a priori para que o modelo possa ser aplicado.

Uma vez que o potencial de interação e a estrutura molecular são definidos, a modelagem do escoamento do fluido considerado é concluída quando condições de contorno fisicamente representativas nesta escala são fixadas nas fronteiras do domínio de solução, e.g., quando a força de interação entre as moléculas do fluido e as moléculas da fronteira sólida é determinada.

Descrever corretamente a força de interação intermolecular representa a primeira dificuldade encontrada quando um modelo microscópico é aplicado. O potencial de interação entre duas moléculas quaisquer depende das suas propriedades elétricas, sendo muito complexo de ser modelado mesmo nas condições mais simples, e.g., em gases monoatômicos. Desta maneira é muito comum que formas simplificadas destes potenciais sejam adotadas para descrever a interação intermolecular, e.g., o potencial de Lennard-Jones [6], e a interação entre as moléculas do fluido e da parede, e.g., através de condições de reflexão especular, reflexão difusa ou uma combinação destas duas usando um coeficiente de acomodação [3].

É muito importante reconhecer as diferenças entre as condições de contorno aplicadas em modelos da micro e da macroescala. Na escala macroscópica, a velocidade, densidade, pressão, temperatura e suas derivadas podem ser impostas diretamente nas fronteiras do sistema considerado. Na escala microscópica, somente a forma de interação entre as moléculas do fluido e as moléculas nas fronteiras do sistema pode ser imposta, sendo as variáveis macroscópicas determinadas nas fronteiras somente quando algum tipo de média estatística, i.e., temporal e/ou espacial e/ou de ensemble, é realizada. Isso pode levar a dificuldades conceituais na modelagem da interação entre o fluido e as fronteiras do sistema quando as únicas condições de contorno conhecidas são as condições na escala macroscópica.

O fato de que é necessária a realização de médias para a obtenção das variáveis ma-

croscópicas de resposta a um determinado problema resolvido nesta escala impõe um segundo obstáculo a modelagem destes sistemas, que é a necessidade de simulação da dinâmica de um grande número de moléculas por um longo tempo, muitas vezes considerando muitos sistemas ao mesmo tempo para que os resultados sejam representativos, o que faz com que o custo computacional desta modelagem seja bastante elevado. Contudo, mesmo que um supercomputador pudesse realizar este tipo de simulação e armazenamento, os resultados encontrados possivelmente estariam contaminados pelos combinação dos erros cometidos na dispendiosa determinação das condições iniciais de velocidade e posição de um grande número de moléculas e pelo erro de computação acumulado, que cresce rapidamente [7].

Todavia, se o interesse do modelista não é acompanhar a evolução de cada uma das moléculas de um sistema particular, mas estudar o comportamento na escala microscópica de diferentes sistemas que compartilham uma mesma característica macroscópica, e.g., número total de moléculas e/ou energia total, a formulação microscópica destes sistemas pode ser manipulada através das ferramentas da Mecânica Estatística de forma a produzir uma formulação, neste trabalho chamada de mesoscópica, em que os detalhes da interação intermolecular e a ignorância sobre as condições iniciais do problema são filtrados.

Nesta formulação a descrição individual da trajetória de cada molécula no espaço de fases não é mais realizada, sendo o gás modelado agora pela função distribuição de moléculas $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$. Esta distribuição representa a probabilidade de que uma certa molécula de um determinado gás esteja localizada entre $\mathbf{x}$ e $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$, com velocidade entre $\boldsymbol{\xi}$ e $\boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi}$, no tempo entre t e $t + dt$. Ao definir a função f desta maneira estão sendo ignorados todos os graus de liberdade de movimento da molécula exceto o de translação.

Espera-se, ao conceber este modelo, preservar vários detalhes da dinâmica molecular não acessíveis através da descrição macroscópica do escoamento considerado e, ao mesmo tempo, facilitar a obtenção das quantidades macroscópicas de interesse na solução de escoamentos de fluidos, e.g., densidade, velocidade, temperatura, tensões e fluxos de calor, através de médias da função f no espaço de fases.

Nas próximas seções os principais passos que levam, a partir da formulação microscópica dada pelas Eqs. 2.1 e 2.2, à equação de transporte de Boltzmann, que descreve a evolução temporal de f , serão revisados [3, 7, 8].

2.1.2 Equação de Liouville

Considerando o espaço de fases composto pelas coordenadas de todas as moléculas idênticas de um determinado gás e de suas velocidades, i.e., um espaço formado por

$6N$ dimensões, onde $3N$ dimensões estão relacionadas às coordenadas espaciais de todas as moléculas do gás e $3N$ dimensões estão relacionadas as suas velocidades, a seguinte expressão representa o estado do sistema em um tempo t :

$$C(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_N, t) = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1(t)) \dots \delta(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_N(t)) \delta(\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}_1(t)) \dots \delta(\boldsymbol{\xi}_N - \boldsymbol{\xi}_N(t)), \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{x}_i$ e $\boldsymbol{\xi}_i$ são as coordenadas do espaço de fases considerado e $\mathbf{x}_i(t)$ e $\boldsymbol{\xi}_i(t)$ são as soluções das Eqs. 2.1 e 2.2 para cada molécula com índice i .

Apesar da descrição do sistema através da função C ser aproximadamente equivalente a descrição dada pela Segunda Lei de Newton ^[7], a primeira descrição tem significado físico mesmo que a função C não seja mais um delta de Dirac e sim uma função das coordenadas do espaço de fases.

Se a Equação 2.3 for derivada em relação a t , $\mathbf{x}_j$ e $\boldsymbol{\xi}_j$, a seguinte expressão pode ser obtida:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sum_{j=1}^N \boldsymbol{\xi}_j \cdot \frac{\partial C}{\partial \mathbf{x}_j} + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_j \cdot \frac{\partial C}{\partial \boldsymbol{\xi}_j} = 0. \quad (2.4)$$

Esta equação não depende mais da solução das equações de Newton escritas para cada molécula, como na Eq. 2.3, embora dependa da determinação da posição e da velocidade de todas as moléculas do sistema considerado no tempo t_0 . Sua solução descreve o caminho da função C no espaço de fases, que é orientado pelas velocidades características $\boldsymbol{\xi}_j(t)$ e $\mathbf{F}_j(t)$.

A equação acima pode ser escrita para qualquer sistema com número de moléculas e energia total fixos. A média da função C no espaço de fases, considerando todos os sistemas possíveis que compartilham destas mesmas características, é igual a uma função P , que possui equação de evolução similar:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \sum_{j=1}^N \boldsymbol{\xi}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_j} + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \boldsymbol{\xi}_j} = 0. \quad (2.5)$$

A solução desta equação representa a probabilidade de que, em um sistema de N moléculas, a molécula de número 1 tenha velocidade $\boldsymbol{\xi}_1$ e esteja localizada na posição $\mathbf{x}_1$, ao mesmo tempo em que uma molécula de número 2 tenha velocidade $\boldsymbol{\xi}_2$ e esteja localizada na posição $\mathbf{x}_2$ e assim por diante, considerando cada uma das N moléculas que compõem este sistema, em um certo tempo t . Note que se as moléculas consideradas forem indistinguíveis, a função P deve ser simétrica com relação às velocidades moleculares e a posição espacial de cada uma das moléculas no sistema. A Equação 2.5 é chamada de

equação de Liouville ^[8].

2.1.3 Hierarquia BBGKY

As propriedades macroscópicas de interesse na solução de um escoamento qualquer não dependem frequentemente das médias tomadas com respeito a função distribuição $P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \dots, \boldsymbol{\xi}_N, t)$, mas, ao invés disso, em médias tomadas com respeito a distribuições de moléculas reduzidas $P_M(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_M, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \dots, \boldsymbol{\xi}_M, t)$ definidas por:

$$P_M(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_M, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \dots, \boldsymbol{\xi}_M, t) = \int P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \dots, \boldsymbol{\xi}_N, t) d\mathbf{x}_{M+1} \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{M+1} \dots d\boldsymbol{\xi}_N, \quad (2.6)$$

A Equação 2.5 deve ser integrada no espaço de fases, utilizando a relação acima, para que a equação de evolução das distribuições P_M possa ser obtida. Os limites de integração desta equação são os seguintes: i) o espaço físico onde o gás está confinado, considerando que nenhuma molécula deixa a região onde o gás está e não existe nenhuma troca de energia entre as moléculas do gás e as fronteiras do sistema, e ii) todas as possíveis velocidades que cada uma das moléculas que compõem o gás pode apresentar. Como o gás é formado por moléculas clássicas, as velocidades são limitadas apenas pela energia total do sistema, podendo variar entre $-\infty$ e ∞ no limite onde o número de moléculas é infinito e a massa de cada molécula, m , é zero.

Considerando que as únicas forças agindo em cada uma das moléculas j é causada pelo potencial molecular ϕ_{ij} entre esta molécula e cada uma das outras moléculas i que compõem o sistema e considerando que este potencial depende somente da distância entre as moléculas $r_{ij} = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$, a força resultante agindo em uma molécula pode ser calculada através da equação:

$$\mathbf{F}_j = -\frac{1}{m} \sum_{i=1, i \neq j}^N \frac{\partial \phi_{ji}}{\partial \mathbf{x}_j}, \quad (2.7)$$

onde a massa de cada uma das moléculas deste sistema é idêntica. Substituindo a equação acima na equação de Liouville e integrando a equação resultante no espaço de fases dentro dos limites de integração acima descritos, encontra-se ^[9]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_M}{\partial t} + \sum_{j=1}^M \boldsymbol{\xi}_j \cdot \frac{\partial P_M}{\partial \mathbf{x}_j} - \sum_{i,j=1}^M \frac{1}{m} \frac{\partial \phi_{ji}}{\partial \mathbf{x}_j} \cdot \frac{\partial P_M}{\partial \boldsymbol{\xi}_j} = \\ \frac{(N-M)}{m} \sum_{j=1}^M \int \frac{\partial \phi_{j(M+1)}}{\partial \mathbf{x}_j} \cdot \frac{\partial P_{M+1}}{\partial \boldsymbol{\xi}_j} d\mathbf{x}_{M+1} d\boldsymbol{\xi}_{M+1}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Ao variar M entre 1 e N obtém-se um grupo de equações conhecido como hierarquia

BBGKY. Conforme mostrado na equação acima, as distribuições P_M dependem da informação contida nas distribuições $P_{(M+1)}$. Todavia, se uma determinada relação entre $P_{(M+1)}$ e as distribuições $P_1, P_2, \dots, P_{(M-1)}$ e P_M for assumida, este sistema de equações pode ser significativamente simplificado.

Na próxima seção, a Equação 2.5 será integrada no espaço de fases com o objetivo de se obter uma equação de evolução para P_1 . Pela eliminação da dependência da equação resultante em relação à distribuição $P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t)$ através da hipótese do caos molecular, chega-se a equação de transporte de Boltzmann, Equação 2.9.

2.1.4 Equação de Transporte de Boltzmann

Um gás composto por um infinito número de moléculas idênticas que interagem entre si somente através de um potencial de curto alcance, tão curto que somente colisões binárias localizadas no espaço ocorrem e ao mesmo tempo suficientemente longo de forma que o efeito das colisões na dinâmica do escoamento não é desprezível, obedece a seguinte equação, conhecida como equação de transporte de Boltzmann ^[3]:

$$\partial_t f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \int (f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}', t)f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_1, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1, t)) |\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_1| r dr d\boldsymbol{\xi}_1, \quad (2.9)$$

onde $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ é a função distribuição de moléculas relacionada à função P_1 através de $f = NP_1$. O operador ∂_t representa a derivada $\frac{\partial}{\partial t}$. As variáveis de integração podem ser representadas pela seguinte figura (mais detalhes em Cercignani^[3] e Huang^[10]):

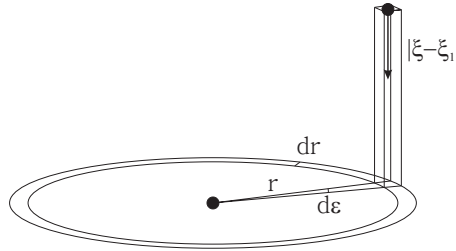


Figura 1: Variáveis de integração no termo de colisão da equação de transporte de Boltzmann.

O operador de colisão, parte direita da Equação 2.9, possui integrando que pode ser dividido em duas partes.

A primeira parte, que é sempre positiva, representa a taxa de colisões entre duas moléculas cujas velocidades anteriores ao processo de colisão são iguais a $\boldsymbol{\xi}'$ e $\boldsymbol{\xi}'_1$ que, depois de trocar quantidade de movimento e energia em uma colisão instantânea, têm velocidades alteradas para $\boldsymbol{\xi}$ e $\boldsymbol{\xi}_1$. O resultado destas colisões é um aumento do número

de moléculas no volume do espaço de fases definido por $d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi}$ na posição definida pelas coordenadas $\mathbf{x}$ e $\boldsymbol{\xi}$.

A segunda parte, que é sempre negativa, representa a taxa de colisões entre duas moléculas cujas velocidades anteriores ao processo de colisão são iguais a $\boldsymbol{\xi}$ e $\boldsymbol{\xi}_1$ que, depois de trocar quantidade de movimento e energia em uma colisão instantânea, têm velocidades alteradas para $\boldsymbol{\xi}'$ e $\boldsymbol{\xi}'_1$. O resultado destas colisões é uma diminuição do número de moléculas no volume do espaço de fases definido por $d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi}$ na posição definida pelas coordenadas $\mathbf{x}$ e $\boldsymbol{\xi}$.

Boltzmann^[11] derivou esta equação considerando os aspectos geométricos de colisões binárias em um gás monoatômico. Seu método é difícil de ser generalizado ou estendido para situações em que algumas das hipóteses utilizadas por ele possam ser relaxadas. Um procedimento sistemático e mais flexível de derivação da equação de transporte de Boltzmann pode ser construído seguindo as linhas da obtenção da hierarquia BBGKY apresentada na seção anterior.

Considera-se inicialmente um gás composto por esferas rígidas no limite do gás de Boltzmann, onde o número de moléculas é muito grande ($N \rightarrow \infty$), a massa de cada molécula é muito pequena ($m \rightarrow 0$) e o diâmetro de cada molécula é negligível ($\sigma \rightarrow 0$). Deve-se observar que neste gás o efeito das colisões, que é proporcional a $N\sigma^2$, e a massa do sistema, que é proporcional a Nm , não são nulos.

Integra-se então a equação de Liouville no espaço de fases, limitando desta vez o espaço físico acessível a cada molécula numerada entre 2 e N à região externa a zona de influência da molécula 1, i.e., limitando-se a $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1| \geq \sigma$. No limite do gás de Boltzmann as distribuições reduzidas dadas pela Equação 2.6 e as distribuições reduzidas obtidas por este procedimento são iguais^[8].

Nesta integração, a partir da Equação 2.5, o termo relacionado à derivada temporal pode ser facilmente obtido,

$$\int_{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1| > \sigma} \frac{\partial P}{\partial t} d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N = \frac{\partial P_1}{\partial t}. \quad (2.10)$$

A derivada espacial pode ser integrada no espaço de fases com a ajuda da regra da integral de Leibniz e do teorema da divergência de Gauss-Ostrogradsky conforme

mostrado:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \int_{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1| > \sigma} \boldsymbol{\xi}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_j} d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N = \\
& \int_{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1| > \sigma} \left(\int_{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| > \sigma} \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_1} d\mathbf{x}_2 \right) d\mathbf{x}_3 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N + \\
& \sum_{j=2}^N \int_{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1| > \sigma} \left(\int_{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_1| > \sigma} \boldsymbol{\xi}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}_j} d\mathbf{x}_j \right) d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_{j-1} d\mathbf{x}_{j+1} \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N = \\
& \int_{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1| > \sigma} \left(\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} \int_{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| > \sigma} P d\mathbf{x}_2 - \oint_{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| = \sigma} P \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \mathbf{n}_2 dS_2 \right) d\mathbf{x}_3 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N + \\
& \sum_{j=2}^N \int_{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1| > \sigma} \left(\oint_{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_1| = \sigma} P \boldsymbol{\xi}_j \cdot \mathbf{n}_j dS_j \right) d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_{j-1} d\mathbf{x}_{j+1} \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N = \\
& \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{x}_1} - \sum_{j=2}^N \oint_{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_1| = \sigma} P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \mathbf{n}_j dS_j d\boldsymbol{\xi}_j + \\
& \sum_{j=2}^N \oint_{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_1| = \sigma} P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) \boldsymbol{\xi}_j \cdot \mathbf{n}_j dS_j d\boldsymbol{\xi}_j. \tag{2.11}
\end{aligned}$$

No espaço físico dado por $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1| \geq \sigma$, a força entre as moléculas i e 1 é zero, de forma que

$$\sum_{j=1}^N \int_{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1| > \sigma} \mathbf{F}_j \cdot \frac{\partial P}{\partial \boldsymbol{\xi}_j} d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N = 0. \tag{2.12}$$

A integração da equação de Liouville resulta, desta maneira, em

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{x}_1} + (N-1) \oint_{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| = \sigma} P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) (\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot \mathbf{n}_2 dS_2 d\boldsymbol{\xi}_2 = 0. \tag{2.13}$$

onde foram utilizadas as simetrias da função P em relação as velocidade moleculares e as posições de cada molécula. A integral de superfície mostrada na equação acima pode ser dividida em duas partes, correspondentes aos hemisférios esquerdo, onde $(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot \mathbf{n}_2 > 0$, e direito, onde $(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot \mathbf{n}_2 < 0$. Note que as moléculas de número 2 que estão localizadas no hemisfério esquerdo estão entrando na zona de influência das moléculas de número 1 e, portanto, estão na iminência da colisão, Figura 2. De maneira análoga, as moléculas de número 2 que estão localizadas no hemisfério direito de integração estão saindo da zona de influência das moléculas de número 1, concluindo, desta forma, o processo de colisão em que estavam envolvidas. É útil considerar estes dois hemisférios de integração de maneira

independente, escrevendo

$$\begin{aligned} & \frac{\partial P_1}{\partial t} + \xi_1 \cdot \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{x}_1} + (N-1) \oint_{(\xi_2 - \xi_1) \cdot \mathbf{n}_2 > 0} P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \xi_1, \xi_2) |(\xi_2 - \xi_1) \cdot \mathbf{n}_2| dS_2 d\xi_2 \\ & - (N-1) \oint_{(\xi_2 - \xi_1) \cdot \mathbf{n}_2 < 0} P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \xi_1, \xi_2) |(\xi_2 - \xi_1) \cdot \mathbf{n}_2| dS_2 d\xi_2 = 0. \end{aligned} \quad (2.14)$$

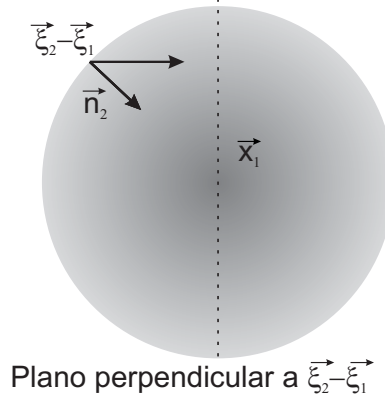


Figura 2: Domínio de integração do termo de colisão da equação de Boltzmann, Equação 2.17.

Usando a hipótese de que as moléculas do gás interagem somente através de colisões binárias, as moléculas que deixam a esfera próxima a molécula-alvo com velocidade relativa igual a $(\xi_2 - \xi_1)$ podem ser diretamente relacionadas àquelas moléculas que entram na esfera próxima a molécula-alvo no tempo $(t - \tau)$, onde τ representa o tempo entre o início e o fim do processo de colisão^[8],

$$P_2(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \xi'_1, \xi'_2, t - \tau) = P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \xi_1, \xi_2, t). \quad (2.15)$$

No limite do gás de Boltzmann, $\mathbf{x}'_1 \rightarrow \mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}$, $\mathbf{x}'_2 \rightarrow \mathbf{x}_2 \rightarrow \mathbf{x}$ e $t - \tau \rightarrow t$.

A Equação 2.14 corresponde à primeira equação da hierarquia BBGKY. De maneira a fazer a descrição do sistema neste primeiro nível independente das distribuições reduzidas P_M , onde $M > 1$, deve-se relacionar a distribuição $P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \xi_1, \xi_2)$ às distribuições $P_1(\mathbf{x}_1, \xi_1)$ e $P_1(\mathbf{x}_2, \xi_2)$. Supondo que as velocidades e posições das moléculas antes do processo de colisão não são correlacionadas, i.e., adotando a hipótese do caos molecular^[11],

$$P_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \xi_1, \xi_2) = P_1(\mathbf{x}_1, \xi_1) P_1(\mathbf{x}_2, \xi_2). \quad (2.16)$$

Substituindo a equação acima na Equação 2.14, encontra-se

$$\begin{aligned} & \frac{\partial P_1}{\partial t} + \xi_1 \cdot \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{x}_1} = \\ & (N-1) \oint (P_1(\xi'_1)P_1(\xi'_2) - P_1(\xi_1)P_1(\xi_2)) |(\xi_2 - \xi_1) \cdot \mathbf{n}_2| dS_2 d\xi_2, \end{aligned} \quad (2.17)$$

que é similar a Equação 2.9.

2.1.5 Invariantes de Colisão

Considerando as equações de conservação da quantidade de movimento e energia na colisão binária entre duas moléculas 1 e 2,

$$\boldsymbol{\xi}_1 + \boldsymbol{\xi}_2 = \boldsymbol{\xi}'_1 + \boldsymbol{\xi}'_2, \quad (2.18)$$

$$\xi_1^2 + \xi_2^2 = \xi_1'^2 + \xi_2'^2, \quad (2.19)$$

pode ser demonstrado^[3, 8] que, quando a seguinte integral, ver Equação 2.17,

$$\int \varphi(\boldsymbol{\xi}_1) \Omega d\boldsymbol{\xi}_1 = \int \varphi(\boldsymbol{\xi}_1) (P_1(\boldsymbol{\xi}'_1)P_1(\boldsymbol{\xi}'_2) - P_1(\boldsymbol{\xi}_1)P_1(\boldsymbol{\xi}_2)) |(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot \mathbf{n}_2| dS_2 d\boldsymbol{\xi}_2 d\boldsymbol{\xi}_1, \quad (2.20)$$

onde $\varphi(\boldsymbol{\xi}_1)$ é uma função qualquer da velocidade molecular $\boldsymbol{\xi}_1$, é submetida a mudança de variáveis $\boldsymbol{\xi}_1 \rightarrow \boldsymbol{\xi}_2$, $\boldsymbol{\xi}_2 \rightarrow \boldsymbol{\xi}_1$, $\boldsymbol{\xi}'_1 \rightarrow \boldsymbol{\xi}'_2$ e $\boldsymbol{\xi}'_2 \rightarrow \boldsymbol{\xi}'_1$, encontra-se:

$$\int \varphi(\boldsymbol{\xi}_1) \Omega d\boldsymbol{\xi}_1 = \int \varphi(\boldsymbol{\xi}_2) (P_1(\boldsymbol{\xi}'_1)P_1(\boldsymbol{\xi}'_2) - P_1(\boldsymbol{\xi}_1)P_1(\boldsymbol{\xi}_2)) |(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot \mathbf{n}_2| dS_2 d\boldsymbol{\xi}_2 d\boldsymbol{\xi}_1. \quad (2.21)$$

Esta mudança de variáveis é equivalente a intercambiar as velocidades entre quaisquer duas moléculas que estiverem na iminência de um processo de colisão.

A mudança de variáveis $\boldsymbol{\xi}_1 \rightarrow \boldsymbol{\xi}'_1$, $\boldsymbol{\xi}_2 \rightarrow \boldsymbol{\xi}'_2$, $\boldsymbol{\xi}'_1 \rightarrow \boldsymbol{\xi}_1$ e $\boldsymbol{\xi}'_2 \rightarrow \boldsymbol{\xi}_2$ no integrando da Equação 2.20, que é equivalente a inversão temporal de todas as colisões, resulta em:

$$\int \varphi(\boldsymbol{\xi}_1) \Omega d\boldsymbol{\xi}_1 = - \int \varphi(\boldsymbol{\xi}'_1) (P_1(\boldsymbol{\xi}'_1)P_1(\boldsymbol{\xi}'_2) - P_1(\boldsymbol{\xi}_1)P_1(\boldsymbol{\xi}_2)) |(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot \mathbf{n}_2| dS_2 d\boldsymbol{\xi}_2 d\boldsymbol{\xi}_1, \quad (2.22)$$

onde o sinal negativo se justifica fisicamente pela inversão do efeito das colisões causada pela inversão temporal. O determinante do Jacobiano J da transformação $d\boldsymbol{\xi}_1 d\boldsymbol{\xi}_2 = |J(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}'_1, \boldsymbol{\xi}'_2)| d\boldsymbol{\xi}'_1 d\boldsymbol{\xi}'_2$ é igual a um, o que pode ser demonstrado utilizando as leis de conservação^[3], Eqs. 2.18 e 2.19.

A inversão temporal das colisões combinada com o intercâmbio entre as velocidades de quaisquer duas moléculas que estiverem na iminência de uma colisão é equivalente a troca de variáveis $\boldsymbol{\xi}_1 \rightarrow \boldsymbol{\xi}'_2$, $\boldsymbol{\xi}_2 \rightarrow \boldsymbol{\xi}'_1$, $\boldsymbol{\xi}'_1 \rightarrow \boldsymbol{\xi}_2$ e $\boldsymbol{\xi}'_2 \rightarrow \boldsymbol{\xi}_1$ no integrando da Equação 2.20, resultando em:

$$\int \varphi(\boldsymbol{\xi}_1) \Omega d\boldsymbol{\xi}_1 = - \int \varphi(\boldsymbol{\xi}'_2) (P_1(\boldsymbol{\xi}'_1)P_1(\boldsymbol{\xi}'_2) - P_1(\boldsymbol{\xi}_1)P_1(\boldsymbol{\xi}_2)) |(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot \mathbf{n}_2| dS_2 d\boldsymbol{\xi}_2 d\boldsymbol{\xi}_1. \quad (2.23)$$

A combinação das últimas quatro equações resulta em:

$$\begin{aligned} \int \varphi(\boldsymbol{\xi}_1) \Omega d\boldsymbol{\xi}_1 = \\ \frac{1}{4} \int (\varphi(\boldsymbol{\xi}_1) + \varphi(\boldsymbol{\xi}_2) - \varphi(\boldsymbol{\xi}'_1) - \varphi(\boldsymbol{\xi}'_2)) (P_1(\boldsymbol{\xi}'_1)P_1(\boldsymbol{\xi}'_2) - P_1(\boldsymbol{\xi}_1)P_1(\boldsymbol{\xi}_2)) \times \\ |(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot \mathbf{n}_2| dS_2 d\boldsymbol{\xi}_2 d\boldsymbol{\xi}_1, \end{aligned} \quad (2.24)$$

que representa uma importante propriedade de simetria do operador de colisão da equação de Boltzmann, Ω . Sempre que uma função qualquer $\varphi(\boldsymbol{\xi}_1)$ obedecer a relação $\varphi(\boldsymbol{\xi}_1) + \varphi(\boldsymbol{\xi}_2) = \varphi(\boldsymbol{\xi}'_1) + \varphi(\boldsymbol{\xi}'_2)$, a integração do operador de colisão multiplicado por $\varphi(\boldsymbol{\xi}_1)$ no espaço de velocidades $\boldsymbol{\xi}_1$ é igual a zero. Neste caso, a função $\varphi(\boldsymbol{\xi}_1)$ é chamada de invariante colisional. Os invariantes colisionais são combinações lineares dos invariantes colisionais elementares, i.e., $\varphi(\boldsymbol{\xi}_1) = 1, \boldsymbol{\xi}_1$ e $\boldsymbol{\xi}_1^2$, que representam a conservação da massa, quantidade de movimento e energia em uma colisão.

2.1.6 Distribuição de Equilíbrio

No equilíbrio, como o efeito das colisões é nulo, a distribuição f deve satisfazer, Equação 2.9,

$$f f_1 = f' f'_1, \quad (2.25)$$

que pode ser escrita como

$$\log f + \log f_1 = \log f' + \log f'_1. \quad (2.26)$$

A função $\log f$ é, desta forma, um invariante colisional, Seção 2.1.5, e pode ser escrita como uma combinação linear dos invariantes colisionais elementares,

$$\log f = a m + \mathbf{b} \cdot m \boldsymbol{\xi} + c \frac{m \boldsymbol{\xi}^2}{2}, \quad (2.27)$$

onde a , $\mathbf{b}$ e c são constantes a serem determinadas. Isto pode ser realizado reconhecendo que, no equilíbrio, as seguintes relações (chamadas de momentos de f e f^{eq}) são verdadeiras:

$$n(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.28)$$

$$n(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.29)$$

$$\frac{Dn(\mathbf{x}, t) RT(\mathbf{x}, t)}{2} = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2} d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2} d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.30)$$

onde $n(\mathbf{x}, t)$, $n(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ e $\frac{Dn(\mathbf{x}, t) RT(\mathbf{x}, t)}{2}$ são a densidade de partículas, quantidade de movimento e energia de um gás em um ponto $\mathbf{x}$ do sistema no tempo t e D é a dimensão

deste sistema. Usando as relações acima pode-se obter a distribuição de equilíbrio deste gás:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{n(\mathbf{x}, t)}{(2\pi RT(\mathbf{x}, t))^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2RT(\mathbf{x}, t)}\right). \quad (2.31)$$

2.1.7 Teorema H

Ao multiplicar a equação de Boltzmann, Equação 2.9, pela função $\ln f(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi}$ e integrar o resultado no espaço de velocidades chega-se a

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\int f(\boldsymbol{\xi}) \ln f(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi})}{\partial t} + \frac{\partial(\int \xi_\alpha f(\boldsymbol{\xi}) \ln f(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi})}{\partial x_\alpha} = \\ & \int (\ln f(\boldsymbol{\xi}) + 1) (f(\boldsymbol{\xi}')f(\boldsymbol{\xi}_1') - f(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi}_1)) |\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_1| r dr d\epsilon d\boldsymbol{\xi}_1 d\boldsymbol{\xi}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Utilizando a propriedade de simetria demonstrada na seção anterior, Equação 2.24, na equação acima,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\int f(\boldsymbol{\xi}) \ln f(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi})}{\partial t} + \frac{\partial(\int \xi_\alpha f(\boldsymbol{\xi}) \ln f(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi})}{\partial x_\alpha} = \\ & \int \left(\ln \left(\frac{f(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi}_1)}{f(\boldsymbol{\xi}')f(\boldsymbol{\xi}_1')} \right) \right) (f(\boldsymbol{\xi}')f(\boldsymbol{\xi}_1') - f(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi}_1)) |\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_1| r dr d\epsilon d\boldsymbol{\xi}_1 d\boldsymbol{\xi} < 0. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Note que o lado direito da equação é sempre negativo devido a propriedade:

$$(x - y) \ln(y/x) \leq 0. \quad (2.34)$$

Se a Equação 2.33 for integrada no espaço físico e as moléculas obedecerem uma condição de contorno de reflexão especular^[3], Seção 7.1.1, obtem-se

$$\frac{\partial(\int f(\boldsymbol{\xi}) \ln f(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{x})}{\partial t} \leq 0. \quad (2.35)$$

A função $\int (f(\boldsymbol{\xi}) \ln f(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{x})$ é chamada de função H e tem importância equivalente a da entropia, sendo a entropia algumas vezes escrita como $S = -kH$ ^[12]. Note que qualquer outra condição de contorno que tenha fluxo de H nulo nas fronteiras também obedece a inequação acima e que a igualdade é válida somente se a função distribuição f é igual a função distribuição de equilíbrio de Maxwell, Equação 2.31.

Nesta seção foi discutido o teorema H para um gás no limite de Boltzmann em um espaço de fases contínuo. Em espaços de fases discretos e em especial nos métodos de simulação utilizados neste trabalho, no entanto, o teorema H conforme definido nesta seção não é obedecido de forma exata, o que ainda é fonte de um debate focado principalmente em um destes dois pontos: i) qual deveria ser a forma da função H dos métodos de lattice Boltzmann para que uma inequação análoga à Equação 2.35 fosse sempre válida ou ii)

qual deveria ser a forma da distribuição de equilíbrio discreta que poderia fazer a Equação 2.35 válida, mantendo-se a forma da função H .^[13]

2.2 Solução da Equação de Boltzmann

A dificuldade de resolver a equação de Boltzmann e de construir aproximações mais completas para a hierarquia BBGKY encorajou o desenvolvimento de várias classes de diferentes modelos de colisão mais simples de serem tratados tanto analiticamente quanto numericamente. Muitos destes modelos foram validados com sucesso em diversos problemas práticos.^[9]

Um destes modelos, que é especialmente importante para a comunidade de lattice Boltzmann, é o modelo BGK^[14, 15]. Ele foi construído empiricamente por Bhatnagar, Gross e Krook e mais tarde foi mostrado válido como uma primeira aproximação para a equação de transporte de Boltzmann escrita para moléculas de Maxwell^[3, 9]. Sua simplicidade, já que apresenta apenas um parâmetro livre a ser ajustado a posteriori de acordo com as propriedades do gás sendo simulado é, ao mesmo tempo, sua maior qualidade, quando o escoamento que está sendo representado é bastante simples, e.g., escoamentos incompressíveis isotérmicos, e seu maior defeito, quando a complexidade do escoamento sendo simulado é maior e o gás exige mais parâmetros para ser corretamente modelado, e.g., quando a viscosidade e a difusividade térmica são independentes.

Gross e Jackson^[16] estenderam o supracitado modelo através da expansão do operador de colisão escrito para moléculas de Maxwell em uma série de autofunções que determinam uma hierarquia de modelos cuja aproximação de primeira ordem é o modelo BGK. Na próxima seção este procedimento será detalhado.

2.2.1 Múltiplos Tempos de Relaxação

O modelo de colisão obtido de acordo com o procedimento de Gross-Jackson^[3, 16], i.e., expandindo o operador de colisão em polinômios de Hermite, será apresentado aqui seguindo a derivação mostrada em Philippi e colaboradores^[17, 18]. Considere a equação de transporte de Boltzmann:

$$\partial_t f + \xi \cdot \nabla f = \Omega, \quad (2.36)$$

onde Ω é o operador de colisão. Escrevendo a função distribuição como $f = f^{eq} (1 + \phi)$ quando f é próximo a f^{eq} , o termo de colisão pode ser escrito para moléculas de Maxwell como^[3]

$$\Omega = f^{eq} \mathcal{L}(\phi), \quad (2.37)$$

onde $\mathcal{L}(\phi)$ é um operador linear. Apesar do operador acima poder ser mostrado válido para moléculas de Maxwell, a construção do modelo poderia ser realizada de forma independente. O ajuste dos parâmetros livres do modelo baseado em experimentos poderia estender sua validade para outros tipos de moléculas^[3].

A perturbação ϕ pode ser expandida em tensores polinomiais de Hermite, Apêndice A, dependendo da velocidade peculiar $\mathbf{C} = \frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}}{\sqrt{RT}}$, i.e.,

$$\phi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\phi}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\mathbf{C}), \quad (2.38)$$

onde os subíndices dos polinômios $a_{\phi, \alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}$ e $\mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}(\mathbf{C})$ foram omitidos por simplicidade.

Os coeficientes $a_{\phi}^{(n)}(\mathbf{x}, t)$ podem ser relacionados aos momentos de $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ através de

$$\int f d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq} (1 + \phi) d\boldsymbol{\xi} = \rho, \quad (2.39)$$

$$\int f \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq} (1 + \phi) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = \rho \mathbf{u}, \quad (2.40)$$

$$\int f \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq} (1 + \phi) \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \rho RT \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (2.41)$$

$$\int f \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq} (1 + \phi) \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) d\boldsymbol{\xi} = \mathbf{q}, \quad (2.42)$$

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade, $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor tensão viscoso^[3] e $\mathbf{q}$ é o fluxo de calor^[3]. Desta forma, $a_{\phi}^{(0)} = 0$, $a_{\phi, \alpha}^{(1)} = 0$, $a_{\phi, \alpha\beta}^{(2)} = \tau_{\alpha\beta} / \rho RT$ e $a_{\phi, \alpha\beta\beta}^{(3)} = 2q_{\alpha} / \rho RT^{3/2}$.

Usando a Equação 2.38, o operador linear pode ser escrito como^[3]

$$\mathcal{L}(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\phi}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{L}(\mathcal{H}^{(n)}(\mathbf{C})). \quad (2.43)$$

O operador linear $\mathcal{L}(\mathcal{H}^{(n)}(\mathbf{C}))$ também pode ser expandido em polinômios de Hermite,

$$\mathcal{L}(\mathcal{H}^{(n)}(\mathbf{C})) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \gamma^{(m,n)} \mathcal{H}^{(m)}(\mathbf{C}). \quad (2.44)$$

A combinação da equação acima e da Equação 2.43 resulta na forma completa do operador linear $\mathcal{L}(\phi)$,

$$\mathcal{L}(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \gamma^{(m,n)} a_{\phi}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}^{(m)}(\mathbf{C}). \quad (2.45)$$

Nesta equação $\gamma^{(m,n)}$ é o tensor de relaxação de ordem $m + n$. Nas próximas seções modelos simplificados serão derivados a partir da equação acima através da formulação

de hipóteses sobre a forma dos parâmetros de relaxação.

2.2.2 Modelo de Colisão BGK

De forma a obter um modelo de colisão com apenas um parâmetro de relaxação, escreve-se a Equação 2.45 como:

$$\mathcal{L}(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \gamma_{\alpha_m \beta_m \dots, \alpha_n \beta_n \dots}^{(m,n)} a_{\phi, \alpha_n \beta_n \dots}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha_m \beta_m \dots}^{(m)}(\mathbf{C}). \quad (2.46)$$

Nesta equação existem m índices mudos dados pelas letras gregas $\alpha_m \beta_m \dots$ e n índices mudos dados pelas letras gregas $\alpha_n \beta_n \dots$. Se qualquer elemento do tensor $\gamma_{\alpha_m \beta_m \dots, \alpha_n \beta_n \dots}^{(m,n)}$ é igual a um parâmetro livre γ_1 se $n = m$ e os índices mudos $\alpha_n \beta_n \dots$ forem uma permutação dos índices $\alpha_m \beta_m \dots$, e é igual a zero caso contrário, a equação acima pode então ser escrita como:

$$\mathcal{L}(\phi) = \gamma_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\phi, \alpha_n \beta_n \dots}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha_n \beta_n \dots}^{(n)}(\mathbf{C}), \quad (2.47)$$

que é exatamente igual ϕ , Equação 2.38, vezes γ_1 . A equação de Boltzmann com este modelo de colisão, chamado de operador de colisão BGK ^[14], pode então ser escrita,

$$\partial_t f + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = f^{eq}(\gamma_1 \phi) = \gamma_1 (f - f^{eq}) = \frac{(f^{eq} - f)}{\tau}, \quad (2.48)$$

onde o parâmetro livre γ_1 é frequentemente substituído por $\tau = -1/\gamma_1$, que representa o tempo de relaxação da função distribuição f para uma distribuição de equilíbrio local f^{eq} .

2.2.3 Modelo de Colisão a Dois Tempos de Relaxação (TRT)

Considerando novamente a expansão dada pela Equação 2.46, lembrando que $a_{\phi}^{(0)} = 0$ e $a_{\phi, \alpha}^{(1)} = 0$, e isolando o termo que corresponde a $n = 2$, tem-se

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\phi) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2m!} \gamma_{\alpha_m \beta_m \dots, \alpha \beta}^{(m,2)} a_{\phi, \alpha \beta}^{(2)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha_m \beta_m \dots}^{(m)}(\mathbf{C}) \\ &+ \sum_{n=3}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \gamma_{\alpha_m \beta_m \dots, \alpha_n \beta_n \dots}^{(m,n)} a_{\phi, \alpha_n \beta_n \dots}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha_m \beta_m \dots}^{(m)}(\mathbf{C}). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Fazendo os elementos do tensor $\gamma_{\alpha_m \beta_m \dots, \alpha \beta}^{(m,2)}$ iguais a zero se $m \neq n$ e diagonalizando o segundo termo da equação acima usando o mesmo procedimento aplicado na última

seção, obtém-se

$$\mathcal{L}(\phi) = \frac{\gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^{(2,2)}}{4} a_{\phi,\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\gamma\delta}^{(2)}(\mathbf{C}) + \gamma_1 \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\phi,\alpha_n\beta_n\dots}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha_n\beta_n\dots}^{(n)}(\mathbf{C}). \quad (2.50)$$

Impondo isotropia de quarta ordem para o tensor $\gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^{(2,2)}$, i.e.,

$$\gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^{(2,2)} = \gamma_2 (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}), \quad (2.51)$$

onde γ_2 é outro parâmetro livre, e reagrupando os termos,

$$\mathcal{L}(\phi) = \frac{(\gamma_2 - \gamma_1)}{2} a_{\phi,\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{C}) + \gamma_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\phi,\alpha_n\beta_n\dots}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha_n\beta_n\dots}^{(n)}(\mathbf{C}). \quad (2.52)$$

A equação de Boltzmann com este modelo de colisão, chamado de modelo de colisão a dois tempos de relaxação (TRT), pode então ser escrita como

$$\partial_t f + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = f^{eq} \left(\gamma_1 \phi + \frac{(\gamma_2 - \gamma_1)}{2} a_{\phi,\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{C}) \right). \quad (2.53)$$

A equação acima pode ser utilizada, como será demonstrado na Seção 3.3, para a simulação de escoamento de fluidos a um número de Prandtl variável. Outros modelos com mais de dois parâmetros livres independentes e exatidão crescente, em termos do número de Knudsen^[3], pode ser desenvolvidos facilmente se elementos de mais alta ordem do tensor $\gamma_{\alpha_m\beta_m\dots,\alpha_n\beta_n\dots}^{(m,n)}$ forem diferentes um dos outros ou diferentes de zero.

2.3 Equações da Fluidodinâmica

2.3.1 Balanço de Massa

A seguinte equação pode ser obtida multiplicando a equação de Boltzmann, Equação 2.9, por $m d\boldsymbol{\xi}$ e integrando no espaço de velocidades:

$$\partial_t \rho + \partial_{\alpha} (\rho u_{\alpha}) = 0. \quad (2.54)$$

2.3.2 Balanço de Quantidade de Movimento

A seguinte equação pode ser obtida multiplicando a equação de Boltzmann, Equação 2.9, por $m \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi}$ e integrando no espaço de velocidades:

$$\partial_t (\rho u_{\alpha}) + \partial_{\beta} (\rho u_{\alpha} u_{\beta} + P_{\alpha\beta}) = 0, \quad (2.55)$$

onde $P_{\alpha\beta}$ é o tensor tensão definido pela seguinte equação:

$$m \int f \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} = \rho u_\alpha u_\beta + P_{\alpha\beta}, \quad (2.56)$$

onde o primeiro termo do lado direito da equação representa a fluxo macroscópico de quantidade de movimento e o segundo termo representa o fluxo de quantidade de movimento devido ao movimento aleatório das moléculas do gás no escoamento. Desta forma, o tensor tensão pode ser escrito como:

$$m \int f (\xi_\alpha - u_\alpha) (\xi_\beta - u_\beta) d\boldsymbol{\xi} = P_{\alpha\beta}. \quad (2.57)$$

2.3.3 Balanço de Energia

A seguinte equação pode ser obtida multiplicando a equação de Boltzmann, Equação 2.9, por $m \frac{\xi^2}{2} d\boldsymbol{\xi}$ e integrando no espaço de velocidades:

$$\partial_t \left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{D}{2} \rho R T \right) + \partial_\beta \left(\frac{\rho u^2 u_\beta}{2} + \frac{D}{2} \rho u_\beta R T \right) + \partial_\alpha (u_\beta P_{\alpha\beta}) + \partial_\alpha q_\alpha = 0, \quad (2.58)$$

onde q_α é o fluxo de calor (ou fluxo de energia não convectiva^[3]), definido pela equação:

$$\int f \xi_\alpha \left(\frac{m \xi^2}{2} \right) d\boldsymbol{\xi} = u_\alpha \left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{P_{\beta\beta}}{2} \right) + u_\beta P_{\alpha\beta} + q_\alpha, \quad (2.59)$$

onde o primeiro termo da parte direita da equação representa o fluxo de energia devido a convecção em escala macroscópica e o segundo termo é o trabalho realizado pela pressão. O fluxo de calor pode ser alternativamente definido através da Equação 2.42.

2.3.4 Tensor Tensão e Fluxo de Calor

Quando equações em uma escala macroscópica estão sendo utilizadas para descrever um dado escoamento, é necessário que equações constitutivas sejam escritas para o fluxo de calor e o tensor tensão neste fluido.

Quando o presente método, em uma escala mesoscópica, é utilizado, nenhuma forma para o tensor tensão e o fluxo de calor é postulada, uma vez que esta informação já está contida em f , Equações 2.57 e 2.42, sendo uma consequência direta do modelo de colisão adotado. Quando este modelo é baseado em características microscópicas do gás, e.g., a forma do potencial de interação intermolecular, os parâmetros livres deste modelo também serão função destas características, e.g., diâmetro médio da molécula.

Frequentemente, no entanto, a descrição do sistema considerado em função apenas de suas variáveis microscópicas não é satisfatória, especialmente quando as variáveis de inte-

resse em um dado escoamento são médias sobre as variáveis microscópicas, e.g., densidade, velocidade e temperatura. Neste caso, é importante estimar a relação entre os parâmetros e variáveis microscópicos do modelo e o comportamento macroscópico do gás, i.e., as equações macroscópicas que este gás deve obedecer e seus coeficientes de transporte.

A análise de Chapman-Enskog é uma ferramenta da Teoria Cinética dos Gases que pode ser aplicada para fazer esta conexão e será, neste trabalho, extensivamente utilizada, veja Seção 3. O resultado desta análise é frequentemente uma relação entre os coeficientes de transporte de um gás e os parâmetros moleculares que descrevem o potencial intermolecular adotado.

Todavia, existem situações em que nenhuma formulação macroscópica é satisfatória, e.g., quando o livre caminho médio é comparável às dimensões do problema, e a equação de transporte de Boltzmann deve ser resolvida diretamente. Um dos mais importantes debates na comunidade de lattice Boltzmann é se o lattice Boltzmann pode ou não ser aplicado para resolver este tipo de situação, ver Seções 3.2 e 8.5 e Succi^[19] para maiores detalhes.

3 *Análise de Chapman-Enskog*

A análise de Chapman-Enskog (CE) é um método de perturbação baseado na ordem de magnitude do número de Knudsen (Kn), definido como a relação entre um comprimento microscópico característico, e.g., o livre caminho médio, e um comprimento macroscópico característico^[3].

Apesar de seu limite de validade e sua convergência não serem claros^[3, 7, 8], ainda assim esta análise é uma ferramenta poderosa, especialmente no contexto dos métodos de lattice Boltzmann (LBMs), para calcular os coeficientes de transporte de um dado gás descrito por um certo modelo de colisão.

Neste capítulo este método será aplicado com o objetivo de encontrar os coeficientes de transporte de fluidos representados pelos modelos de colisão mostrados nas últimas seções. Alguns dos passos aqui mostrados são comuns a qualquer análise de Chapman-Enskog (inclusive para modelos discretos) e serão, por isso, cuidadosamente discutidos. No Capítulo 4, este método será aplicado para encontrar os coeficientes de transporte de um fluido modelado pelos métodos de lattice Boltzmann que, como qualquer outro método numérico, apresentam erros numéricos que podem influenciar a simulação de um dado escoamento.

A influência dos erros originados nas discretizações espacial e temporal será estudada na Seção 5.1.3 e a influência dos erros relacionados à não-preservação dos momentos de alta ordem da função distribuição, i.e., originados na discretização do espaço de velocidades, será discutida na Seção 6.7.

De maneira a aplicar este método, deve-se fazer previamente uma análise de escala sobre a equação que será analisada. Isso será realizado, na próxima seção, considerando a equação de Boltzmann com modelo de colisão BGK.

3.1 Modelo BGK

3.1.1 Análise de Escala

O objetivo desta análise de escala é identificar as principais escalas temporais e espaciais do fenômeno estudado, medindo as suas influências. De maneira a iniciar esta análise, considere a equação de transporte de Boltzmann com o operador de colisão BGK:

$$\partial_t f + \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\nabla} f = \frac{f^{eq} - f}{\tau}. \quad (3.1)$$

Esta equação pode ser adimensionalizada através da seguinte troca de variáveis:

$$t = \theta t^*, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{x} = L \mathbf{x}^*, \quad (3.3)$$

$$\boldsymbol{\xi} = \frac{l}{\delta} \boldsymbol{\xi}^*, \quad (3.4)$$

onde δ e θ são tempos característicos microscópico e macroscópico, respectivamente, e l e L são comprimentos característicos microscópico e macroscópico, respectivamente. Desta maneira, a Equação 3.1 pode ser escrita como:

$$\frac{\delta}{\theta} (\partial_{t^*} f + \boldsymbol{\xi}^* \cdot \boldsymbol{\nabla}^* f) = \frac{\delta}{\tau} (f^{eq} - f), \quad (3.5)$$

onde foi adotada a simplificação $l/L \approx \delta/\theta$ ^[3], i.e., as escalas temporais e espaciais foram consideradas equivalentes. Se δ é aproximadamente igual a τ , i.e., o tempo característico microscópico é aproximadamente igual ao tempo de relaxação da função distribuição para a função distribuição no equilíbrio, a equação acima pode ser escrita como:

$$Kn (\partial_{t^*} f + \boldsymbol{\xi}^* \cdot \boldsymbol{\nabla}^* f) = (f^{eq} - f), \quad (3.6)$$

onde Kn foi definido aqui como l/L ou,^[3]

$$Kn = \frac{Ma}{Re} = \frac{U\nu}{c_s UL} = \frac{\nu}{c_s L}, \quad (3.7)$$

onde Ma e Re são os números de Mach e de Reynolds, ν é a viscosidade cinemática, c_s a velocidade do som e L um comprimento característico do sistema.

Na análise de Chapman-Enskog, a distribuição f é dividida em escalas de tempo de acordo com a seguinte expansão:

$$f = f^{(0)} + Kn f^{(1)} + Kn^2 f^{(2)} + Kn^3 f^{(3)} + \dots, \quad (3.8)$$

e a escala temporal é expandida em operadores desta mesma forma:

$$\partial_t^* = \partial_0 + Kn\partial_1 + Kn^2\partial_2 + Kn^3\partial_3 + \dots \quad (3.9)$$

Tomando as duas equações acima, substituindo-as na Equação 3.6 e reagrupando a equação resultante em ordens crescentes do número de Knudsen:

$$\begin{aligned} Kn^0 & (f^{eq} - f^{(0)}) + \\ Kn^1 & (\partial_0 f^{eq} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{eq} + f^{(1)}) + \\ Kn^2 & (\partial_1 f^{eq} + \partial_0 f^{(1)} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(1)} + f^{(2)}) + \\ Kn^3 & (\partial_2 f^{eq} + \partial_1 f^{(1)} + \partial_0 f^{(2)} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(2)} + f^{(3)}) + \dots = 0, \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde foi adotada novamente a notação de Einstein.

Se o número de Knudsen é pequeno, cada ordem do número de Knudsen pode ser igualada independentemente a zero, de maneira que:

$$f^{(0)} = f^{eq}, \quad (3.11)$$

$$f^{(1)} = -\partial_0 f^{eq} - \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{eq}, \quad (3.12)$$

$$f^{(2)} = -\partial_1 f^{eq} - \partial_0 f^{(1)} - \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(1)}, \quad (3.13)$$

$$f^{(3)} = -\partial_2 f^{eq} - \partial_1 f^{(1)} - \partial_0 f^{(2)} - \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(2)}, \quad (3.14)$$

3.1.2 Escoamento Não Isotérmicos

Da Equação 3.11,

$$f^{eq}(\mathbf{x}, t) = f^{(0)}(\mathbf{x}, t), \quad (3.15)$$

i.e., a solução de ordem zero da função distribuição é a distribuição de equilíbrio com a densidade, velocidade e temperatura do ponto $\mathbf{x}$ considerado no tempo t . Das Equações 2.28, 2.29, 2.30 e 3.8 pode ser inferido que:

$$\int (f - f^{eq}) d\boldsymbol{\xi} = \int (Kn f^{(1)} + Kn^2 f^{(2)} + Kn^3 f^{(3)} + \dots) d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad (3.16)$$

$$\int (f - f^{eq}) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = \int (Kn f^{(1)} + Kn^2 f^{(2)} + Kn^3 f^{(3)} + \dots) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad (3.17)$$

$$\int (f - f^{eq}) \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2} d\boldsymbol{\xi} = \int (Kn f^{(1)} + Kn^2 f^{(2)} + Kn^3 f^{(3)} + \dots) \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2} d\boldsymbol{\xi} = 0. \quad (3.18)$$

De maneira a fazer estas equações válidas, cada escala precisa ser igual a zero independentemente, de forma que

$$\int f^{(n)} d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad (3.19)$$

$$\int f^{(n)} \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad (3.20)$$

$$\int f^{(n)} \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2} d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad (3.21)$$

para todo n igual ou maior do que um. Esta propriedade é utilizada sistematicamente com as Equações 3.12, 3.13 e 3.14 de maneira a obter as equações macroscópicas que este fluido obedece em ordens crescentes do número de Knudsen.

Quando as Eqs. 3.12 e 3.13 são integradas no espaço de velocidades, obtém-se:

$$\partial_0 n + \theta \partial_\alpha (n u_\alpha) = 0, \quad (3.22)$$

$$\partial_1 n = 0. \quad (3.23)$$

A derivada temporal pode ser obtida através da substituição das equações acima na Equação 3.9. A equação resultante é a equação de balanço de massa, que não apresenta nenhuma correção em ordens mais altas do número de Knudsen. Isto pode ser observado através da integração das Equações 3.11, 3.12, 3.13 e 3.14 no espaço de velocidades com a ajuda da Equação 3.20, que representa a conservação da quantidade de movimento na escala microscópica em ordens crescentes do número de Knudsen. Ou seja,

$$\partial_t n + \partial_\alpha (n u_\alpha) = 0. \quad (3.24)$$

Esta equação foi escrita para n , que é o número de moléculas por unidade de volume, mas poderia ter sido escrita para ρ , massa por unidade de volume, se fosse multiplicada por m , a massa de cada molécula.

Multiplicando a Equação 3.12 por $\boldsymbol{\xi}$ e integrando no espaço de velocidades,

$$\partial_0 (n u_\alpha) + \theta \partial_\beta \left(\int f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} \right) = 0. \quad (3.25)$$

A integral $\int f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}$ pode ser resolvida se a Equação 2.31 for utilizada, i.e.,

$$\int f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} = n u_\alpha u_\beta + n R T \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.26)$$

onde $\delta_{\alpha\beta}$ é o delta de Kronecker. Desta maneira, a Equação 3.25 pode ser reduzida a

$$\partial_0 (n u_\alpha) + \theta \partial_\beta (n u_\alpha u_\beta) = -\theta \partial_\alpha (n R T). \quad (3.27)$$

Multiplicando a Equação 3.12 por ξ^2 e integrando o resultado no espaço de velocidades,

$$\partial_0 (nu^2 + DnRT) + \theta \partial_\beta \left(\int f^{eq} \xi^2 \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} \right) = 0. \quad (3.28)$$

A integral $\int f^{eq} \xi^2 \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}$ pode ser resolvida utilizando-se a Equação 2.31, i.e.,

$$\int f^{eq} \xi^2 \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} = nu^2 u_\beta + nu_\beta RT(D + 2). \quad (3.29)$$

Desta forma, a Equação 3.28 pode ser reduzida a

$$\partial_0 \left(\frac{nu^2}{2} + \frac{D}{2} nRT \right) + \theta \partial_\beta \left(\frac{nu^2 u_\beta}{2} + \frac{D}{2} nRT u_\beta \right) = -\theta \partial_\beta (nRT u_\beta). \quad (3.30)$$

Esta é a equação de balanço de energia. Utilizando a Equação 3.25 para subtrair dela o termo relacionado a energia mecânica, $\frac{nu^2}{2}$, pode ser obtida uma equação para a evolução da energia interna do gás:

$$\partial_0 \left(\frac{D}{2} nRT \right) + \theta \partial_\beta \left(\frac{D}{2} nRT u_\beta \right) = -\theta nRT \partial_\beta u_\beta. \quad (3.31)$$

Se a análise é truncada neste ponto, as seguintes equações são obtidas quando as Eqs. 3.27 e 3.31 são multiplicadas por m e a Equação 3.9 é utilizada:

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha (\rho RT), \quad (3.32)$$

$$\partial_t \left(\frac{D}{2} \rho RT \right) + \partial_\beta \left(\frac{D}{2} \rho RT u_\beta \right) = -\rho RT \partial_\beta u_\beta. \quad (3.33)$$

Estas equações representam o comportamento do escoamento no limite que $Kn \rightarrow 0$, quando os efeitos relacionados a viscosidade e a difusividade térmica são tão pequenos que podem ser desprezados. As Eqs. 3.24, 3.32 e 3.33 formam o conjunto de equações de Euler^[8] para um gás que obedece a equação de estado de gás ideal.

De maneira a obter equações descrevendo o comportamento do fluido em condições de número de Knudsen baixo, mas não necessariamente nulo, correções para as equações de Euler podem ser obtidas sistematicamente pela multiplicação das Eqs. 3.13, 3.14 e assim por diante, por 1, $\boldsymbol{\xi}$ e ξ^2 .

Desta forma, multiplicando a Equação 3.13 por $\boldsymbol{\xi}$ e integrando o resultado no espaço de velocidades,

$$\partial_1 (nu_\alpha) + \theta \partial_\beta \left(\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} \right) = 0. \quad (3.34)$$

A integral $\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}$ pode ser resolvida através da utilização da Equação 3.12, i.e.,

$$\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} = - \int (\partial_0 (f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta) + \theta \partial_\gamma (f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma)) d\boldsymbol{\xi}. \quad (3.35)$$

Para que a equação acima seja resolvida, é necessário calcular a integral $\int f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma d\boldsymbol{\xi}$. Isto pode ser realizado com a ajuda da Equação 2.31,

$$\int f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma d\boldsymbol{\xi} = nu_\alpha u_\beta u_\gamma + nRT u_\delta \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}, \quad (3.36)$$

onde $\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}$. O termo $\partial_0 (\int f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi})$ pode ser calculado através da combinação da Equação 3.26 com as Eqs. 3.22, 3.27 e 3.31. Desta forma, a Equação 3.34 pode ser escrita como:

$$\partial_1 (nu_\alpha) = \theta^2 \partial_\beta \left(nRT \left(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) \right). \quad (3.37)$$

Utilizando a definição dada pela Equação 3.9,

$$\begin{aligned} \partial_{t^*} (nu_\alpha) &= \partial_0 (nu_\alpha) + Kn \partial_1 (nu_\alpha) = \\ &= -\theta \partial_\beta (nu_\alpha u_\beta) - \theta \partial_\alpha (nRT) + \theta \tau \partial_\beta \left(nRT \left(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) \right), \end{aligned} \quad (3.38)$$

que pode ser multiplicada por m e simplificada,

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha (\rho RT) + \partial_\beta \left(\tau \rho RT \left(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) \right). \quad (3.39)$$

O último termo da equação acima é o termo relacionado às tensões viscosas. Ao comparar esta equação à equação de Navier-Stokes escrita para um fluido que obedece a equação de estado de gás ideal^[4], a viscosidade dinâmica, μ , pode ser relacionada a τ através da equação:

$$\mu = \tau \rho RT. \quad (3.40)$$

De maneira a obter a equação de balanço de energia, a Equação 3.13 é multiplicada por ξ^2 e integrada no espaço de velocidades,

$$\partial_1 (nu^2 + DnRT) + \partial_0 \left(\int f^{(1)} \xi^2 d\boldsymbol{\xi} \right) + \theta \partial_\beta \left(\int f^{(1)} \xi^2 \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} \right) = 0. \quad (3.41)$$

O segundo termo da equação acima é nulo,

$$\int f^{(1)} \xi^2 d\boldsymbol{\xi} = \int f^{(1)} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 d\boldsymbol{\xi} + 2\mathbf{u} \cdot \int f^{(1)} \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} - u^2 \int f^{(1)} d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad (3.42)$$

e o terceiro termo pode ser resolvido através da utilização da Equação 3.12, i.e.,

$$\int f^{(1)} \xi^2 \xi_\beta d\boldsymbol{\xi} = - \int (\partial_0 (f^{eq} \xi^2 \xi_\beta) + \theta \partial_\gamma (f^{eq} \xi^2 \xi_\beta \xi_\gamma)) d\boldsymbol{\xi}. \quad (3.43)$$

A integral $\int f^{eq} \xi^2 \xi_\beta \xi_\gamma d\boldsymbol{\xi}$ pode ser facilmente resolvida através do uso da Equação 2.31,

$$\int f^{eq} \xi^2 \xi_\beta \xi_\gamma d\boldsymbol{\xi} = nu^2 u_\beta u_\gamma + nRT (u^2 \delta_{\beta\gamma} + u_\beta u_\gamma (D+4)) + n(RT)^2 (D+2) \delta_{\beta\gamma}. \quad (3.44)$$

O termo $\partial_0 (\int f^{eq} \xi^2 \xi_\beta d\boldsymbol{\xi})$ pode ser calculado utilizando-se a Equação 3.29 em conjunto com as Eqs. 3.22, 3.27 e 3.31. A Equação 3.41 pode então ser escrita, depois de um pouco de álgebra, como:

$$\begin{aligned} \partial_1 \left(\frac{nu^2}{2} + \frac{D}{2} nRT \right) = \\ \theta^2 \partial_\beta \left(\left(\frac{D+2}{2} \right) nRT \partial_\beta (RT) + nRT u_\alpha \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) \right). \end{aligned} \quad (3.45)$$

A partir das Eqs. 3.9, 3.30 e 3.45 a derivada temporal pode ser reconstruída, i.e.,

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{D}{2} \rho RT \right) + \partial_\beta \left(\frac{\rho u^2 u_\beta}{2} + \frac{D}{2} \rho u_\beta RT \right) = -\partial_\beta (\rho u_\beta RT) + \\ \partial_\beta \left(\tau \left(\frac{D+2}{2} \right) \rho RT \partial_\beta (RT) + \tau \rho RT u_\alpha \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) \right). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Uma equação de evolução para a energia interna do gás pode ser obtida se a energia mecânica for subtraída da equação acima, i.e.,

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{D}{2} \rho RT \right) + \partial_\beta \left(\frac{D}{2} \rho RT u_\beta \right) = \partial_\beta \left(\tau \left(\frac{D+2}{2} \right) \rho RT \partial_\beta (RT) \right) + \\ \tau \rho RT (\partial_\alpha u_\beta) \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) - \rho RT \partial_\beta u_\beta \end{aligned} \quad (3.47)$$

O primeiro termo da parte direita da equação acima está relacionado a difusão de energia térmica e, quando comparado com o conjunto de equações de Navier-Stokes-Fourier^[4], fornece uma relação entre τ e a condutividade térmica k ,

$$k = \tau \left(\frac{D+2}{2} \right) \rho R^2 T. \quad (3.48)$$

O segundo termo da parte direita da equação está relacionado aos efeitos dissipativos causados pela ação das forças viscosas. A expressão $\tau \rho RT$, que multiplica as derivadas deste termo, é a viscosidade dinâmica do fluido e confirma a forma deste coeficiente de transporte encontrada na equação de balanço de quantidade de movimento, Equação 3.40.

Pode ser deduzido, a partir das Eqs. 3.40 e 3.48, que o número de Prandtl, Pr , é igual a

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu C_P}{k} = 1, \quad (3.49)$$

onde $\nu = \mu/\rho$ é a viscosidade cinemática, $\alpha = k/\rho C_P$ é a difusividade térmica e $C_P = R(D+2)/2$ é o calor específico do gás a pressão constante. Números de Prandtl diferentes

de um podem ser utilizados nas simulações somente quando operadores de colisão mais completos são empregados, Seções 2.2.1 e 3.3.

A forma dos coeficientes de transporte dada pelas Eqs. 3.40 e 3.48 não representa exatamente a forma observada em um gás composto de esferas rígidas ou qualquer outro potencial intermolecular independente da direção^[20]. Isto acontece porque o tempo de relaxação foi assumido constante enquanto, na verdade, ele deve depender da temperatura e densidade do gás e da velocidade molecular^[9, 21].

Note também que a forma das equações obtidas depende somente do seguinte conjunto de momentos da distribuição de equilíbrio:

$$\{1, \xi_\alpha, \xi_\alpha \xi_\beta, \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma, \xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta\}, \quad (3.50)$$

que correspondem as Equações 2.28, 2.29, 3.26, 3.36 e 3.44. Este fato é de suma importância no processo de discretização do espaço de velocidades, Capítulo 6. Quando os momentos da distribuição de equilíbrio até determinada potência (também chamada de ordem) são idênticos no espaço contínuo e no espaço discreto de velocidades, as equações obtidas pela análise de Chapman-Enskog destes dois modelos são as mesmas até a ordem do número de Knudsen considerada. McNamara e Alder^[22] foram os primeiros a identificar esta propriedade dentro da comunidade de lattice Boltzmann, utilizando o trabalho clássico da Teoria Cinética dos Gases de Grad^[23].

Este resultado, que é baseado na análise de Chapman-Enskog, pode ser generalizado de modo a criar uma condição de exatidão para diferentes ordens do número de Knudsen^[1]. Seguindo a análise de Chapman-Enskog, a equação de balanço de massa é recuperada até a ordem n do número de Knudsen se os momentos da distribuição de equilíbrio até a ordem $(n + 1)$ forem corretamente representados, e.g., para garantir que a equação de balanço de massa seja exata até a primeira ordem de Knudsen, momentos de até segunda ordem da função distribuição de equilíbrio são necessários, i.e, $\{1, \xi_\alpha, \xi_\alpha \xi_\beta\}$.

Seguindo o mesmo raciocínio, a equação de balanço de quantidade de movimento é recuperada até a ordem n do número de Knudsen se os momentos da distribuição de equilíbrio até a ordem $(n + 2)$ forem corretamente representados. A equação de balanço de energia demanda a conservação de momentos de ordem $(n + 3)$ de forma $\xi^2 \xi_\gamma \xi_1 \dots \xi_n$. Note que o conjunto completo de momentos de ordem $(n + 3)$, cuja forma é $\xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma \xi_1 \dots \xi_n$, não precisa ser corretamente representado pois, na obtenção da equação de balanço de energia, as ordens sucessivas do número de Knudsen são multiplicadas por ξ^2 e não por $\xi_\alpha \xi_\beta$.

Conforme será mostrado na Seção 6, esta pequena diferença é responsável por uma

significante redução do número de velocidades moleculares discretas necessárias para representar um escoamento e por uma simplificação destas velocidades, que se mantêm alinhadas aos eixos e diagonais principais do sistema de coordenadas utilizado. É interessante observar, todavia, que este resultado é válido somente para o modelo de colisão BGK. Modelos de colisão mais complexos demandam a preservação de momentos da distribuição de equilíbrio de ordens ainda mais altas, Seção 6.5.2.6, que necessitam de maiores e mais complexos conjuntos de velocidades discretas para serem representados.

A análise de Chapman-Enskog perde o seu valor quando o número de Knudsen cresce e se aproxima de um. De um ponto de vista matemático, a convergência desta análise pode ser provada ou refutada em apenas alguns casos especiais^[3, 8]. Além disso, não é claro se as diferentes escalas não se confundem e invalidam a sua separação ou se a distribuição local de equilíbrio é uma aproximação de ordem zero válida para a função distribuição f .

Quando ordens crescentes do número de Knudsen são consideradas, as equações macroscópicas obtidas são bastante difíceis de resolver devido aos termos não lineares de alta ordem (em relação às derivadas) que a compõem e as complexas condições de contorno que estes termos exigem. Do ponto de vista físico, existe ainda muita controvérsia sobre a relevância destas equações, conhecidas como equação de Burnett e super-Burnett. Enquanto alguns autores relatam boa concordância entre a solução obtida através da aplicação destas equações e resultados experimentais^[8, 24], outros entendem que esta análise não é válida em qualquer escoamento que apresente qualquer discrepância em relação às equações de Navier-Stokes-Fourier^[3].

3.1.3 Escoamentos Isotérmicos

Em diversos problemas fluidodinâmicos comuns na engenharia a temperatura pode ser considerada constante, eliminando a necessidade de se resolver a equação da energia. Neste caso, a função distribuição de equilíbrio é igual a^[25]:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{n(\mathbf{x}, t)}{(2\pi RT_0)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2RT_0}\right), \quad (3.51)$$

onde T_0 é uma temperatura de referência constante.

A análise de Chapman-Enskog pode novamente ser utilizada para prever o comportamento macroscópico deste sistema quando o número de Knudsen é pequeno. Considerando a integração das Equações 3.11, 3.12, 3.13 e 3.14 no espaço de velocidades, pode-se observar que a equação de balanço de massa é a mesma obtida na análise anterior, de

forma que as Eqs. 3.22 e 3.23 continuam sendo válidas:

$$\partial_0 n + \theta \partial_\alpha (n u_\alpha) = 0, \quad (3.52)$$

$$\partial_1 n = 0. \quad (3.53)$$

Tomando a Equação 3.12, multiplicando-a por ξ e integrando-a no espaço de velocidades moleculares, obtém-se:

$$\partial_0 (n u_\alpha) + \theta \partial_\beta (n u_\alpha u_\beta) = -\theta \partial_\alpha (n R T_0). \quad (3.54)$$

Esta equação é análoga a Equação 3.25 obtida na seção anterior, com a diferença de que o termo relacionado ao gradiente de pressão apresenta agora uma temperatura constante.

Multiplicando a Equação 3.13 por ξ e integrando o resultado no espaço de velocidades,

$$\partial_1 (n u_\alpha) + \theta \partial_\beta \left(\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\xi \right) = 0, \quad (3.55)$$

onde a integral $\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\xi$ é igual a:

$$\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\xi = - \int (\partial_0 (f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta) + \theta \partial_\gamma (f^{eq} \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma)) d\xi. \quad (3.56)$$

As equações acima são similares às Eqs. 3.34 e 3.35. Substituindo as Equações 3.26 e 3.36, escritas porém para uma distribuição de equilíbrio com temperatura constante T_0 , na equação acima, obtém-se:

$$\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\xi = -\partial_0 (n u_\alpha u_\beta + n R T_0 \delta_{\alpha\beta}) - \theta \partial_\gamma (n u_\alpha u_\beta u_\gamma + n R T_0 u_\delta \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}). \quad (3.57)$$

As Eqs. 3.52 e 3.54 podem ser utilizadas, juntamente com a equação acima, para simplificar a Equação 3.55. Deste modo, encontra-se:

$$\partial_1 (n u_\alpha) = \theta^2 \partial_\beta (n R T_0 (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)). \quad (3.58)$$

Este resultado é bastante surpreendente já que era esperado que a equação acima fosse igual a Equação 3.37. A diferença entre estas duas equações tem origem no termo $\partial_0 \left(\frac{D}{2} n R T \right)$, que é igual a, Equação 3.31,

$$\partial_0 \left(\frac{D}{2} n R T \right) = -\theta \partial_\beta \left(\frac{D}{2} n R T u_\beta \right) - \theta n R T \partial_\beta u_\beta, \quad (3.59)$$

na primeira derivação e igual a, Equação 3.52,

$$\partial_0 \left(\frac{D}{2} n R T_0 \right) = -\theta \partial_\beta \left(\frac{D}{2} n R T_0 u_\beta \right), \quad (3.60)$$

na segunda. A energia interna do gás, ao se manter a temperatura igual a T_0 na distri-

buição de equilíbrio, é transferida entre os sítios do domínio sem ser afetada de nenhuma forma pelo trabalho de pressão, que é eliminado da equação de balanço de energia interna. Fisicamente este sistema pode ser comparado a um modelo em que cada ponto do domínio está em contato com um reservatório de calor a uma temperatura constante igual a T_0 que absorve qualquer variação de temperatura causada pelo trabalho de pressão.

As equações de balanço de massa e quantidade de movimento resultantes da análise até a primeira ordem do número de Knudsen são então:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0, \quad (3.61)$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha (\rho RT_0) + \partial_\beta (\tau \rho RT_0 (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)). \quad (3.62)$$

Quando o número de Mach, definido como U/c_s , onde U é uma velocidade característica macroscópica e c_s é a velocidade do som, é pequeno o suficiente, as equações acima podem ser utilizadas como uma aproximação para escoamentos incompressíveis isotérmicos^[4]. Esta aproximação é muito usual nos métodos de lattice Boltzmann^[15], Capítulo 4.

3.1.4 Fenômenos Puramente Difusivos

Quando a temperatura em um dado escoamento é constante e a velocidade do fluido em qualquer ponto do domínio é imposta igual a zero, i.e., $u = 0$ e $T = T_0$, o fluido obedece a equação de difusão da massa. Esta equação tem algumas aplicações práticas importantes em algumas áreas da engenharia^[26], mas neste trabalho será utilizada estritamente para analisar e testar, usando simulações numéricas, os efeitos de alta ordem em relação ao número de Knudsen previstos pela análise de Chapman-Enskog que, nesta situação, é muito simples de realizar devido à linearidade da distribuição de equilíbrio em relação à densidade do fluido, i.e.,

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{n(\mathbf{x}, t)}{(2\pi RT_0)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT_0}\right). \quad (3.63)$$

A integração sucessiva das Eqs. 3.12, 3.13 e assim por diante no espaço de velocidades, visando obter a equação de balanço de massa, produz:

$$\partial_q n = -\partial_\alpha \left(\int f^{(q)} \boldsymbol{\xi}_\alpha d\boldsymbol{\xi} \right), \quad (3.64)$$

em sucessivas ordens de aproximação q . Multiplicando esta equação por m e integrando

no espaço de velocidades obtem-se

$$\partial_0 \rho = 0, \quad (3.65)$$

$$\partial_1 \rho = \theta^2 RT_0 \partial_\alpha \partial_\alpha \rho. \quad (3.66)$$

O resultado acima pode ser, através do emprego da Equação 3.9, simplificado de modo a se obter:

$$\partial_t \rho = \tau RT_0 \partial_\alpha \partial_\alpha \rho, \quad (3.67)$$

que é válida como uma aproximação de primeira ordem em relação ao número de Knudsen neste caso.

3.2 Escoamentos a Números de Knudsen Elevados

Nesta seção a análise de Chapman-Enskog será utilizada para prever o comportamento dos modelos de colisão apresentados quando fenômenos de alto número de Knudsen são considerados. O objetivo principal desta análise é comparar os modelos de colisão deste capítulo àqueles apresentados nos Capítulos 4, 5 e 6 que, como são aplicados a espaços físico e de velocidades discretos, possuem erros de discretização que podem influenciar significativamente o comportamento do fluido modelado. A validade destas análises será testada e discutida nas próximas seções e no Capítulo 8, de resultados numéricos.

3.2.1 Escoamentos Unidimensionais

Modelos unidimensionais são muito simplificados para a grande maioria dos problemas na natureza. Sua simplicidade, todavia, é muito útil para testar a álgebra computacional utilizada na análise de Chapman-Enskog e possibilitar a obtenção de equações em alta ordem de Knudsen com solução numérica mais simples, por não possuírem termos de derivadas parciais, tornando o processo de validação das equações obtidas também mais simples.

3.2.1.1 Fenômenos Puramente Difusivos

Seguindo a derivação detalhada na Seção 3.1.4, as seguintes relações foram utilizadas:

$$\int m f(x, \xi, t) d\xi = \int m f^{eq}(x, \xi, t) d\xi = \rho(x, t), \quad (3.68)$$

$$\int m f^{eq}(x, \xi, t) \xi^q d\xi = \rho(x, t) RT^{q/2} \left(\frac{1 + (-1)^q}{2} \right) (q-1)!!, \quad (3.69)$$

onde $q \geq 1$ e $q!!$ representa o fatorial duplo de q . Conforme discutido na Seção 3.1.4, a função distribuição de equilíbrio foi tomada como tendo velocidade macroscópica zero e temperatura T constante.

A análise de Chapman-Enskog deste sistema tem como resultado,

Tabela 1: Análise de Chapman-Enskog considerando um fenômeno puramente difusivo unidimensional.

Equação de Balanço de Massa	
Kn^0	$\partial_t \rho = 0$
Kn^1 e Kn^2	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho$
Kn^3 e Kn^4	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho$
Kn^5 e Kn^6	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho + 4\tau^5 RT^3 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho$
Kn^{2k-1} e Kn^{2k}	$\partial_t \rho = \sum_{i=1}^k a(i) \tau^{2i-1} RT^i \partial_x^{2i} \rho$
onde	$a(i) = (i-1) \sum_{j=1}^{i-1} a(j)a(i-j)$ e $a(1) = 1$

O operador $\partial_x^{2i} \rho$ representa a derivada de ordem $2i$ de ρ em relação a variável espacial x . É importante notar que todas as correções relacionadas as derivadas ímpares são nulas, ou seja, todos os coeficientes de dispersão são iguais a zero. O parâmetro livre τ é utilizado aqui para controlar a difusividade mássica, Seção 8.1.2.

3.2.1.2 Escoamentos Isotérmicos

Esta análise foi realizada considerando-se as seguintes relações:

$$f^{eq}(x, \xi, t) = \frac{n(x, t)}{\sqrt{2\pi RT}} e^{-\frac{(\xi - u(x, t))^2}{2RT}}, \quad (3.70)$$

$$\int f(x, \xi, t) d\xi = \int f^{eq}(x, \xi, t) d\xi, \quad (3.71)$$

$$\int f(x, \xi, t) \xi d\xi = \int f^{eq}(x, \xi, t) \xi d\xi. \quad (3.72)$$

Conforme discutido na Seção 3.1.3, a função distribuição de equilíbrio tem temperatura T constante.

A análise de Chapman-Enskog deste sistema fornece os seguintes resultados,

Tabela 2: Análise de Chapman-Enskog de um modelo BGK isotérmico unidimensional.

Equação de Balanço de Massa	
$Kn^m, \forall m \geq 0$	$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0$
Equação de Balanço de Quantidade de Movimento	
Kn^0	$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + \rho RT) = 0$
Kn^1	$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + \rho RT) = 2\tau \partial_x(\rho RT \partial_x u)$
Kn^2	$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + \rho RT) = 2\tau \partial_x(\rho RT \partial_x u) +$ $2\tau^2 \partial_x[\rho RT (RT \partial_x \partial_x \log(\rho RT) - (\partial_x u)^2)]$
Kn^3	$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + \rho RT) = 2\tau \partial_x(\rho RT \partial_x u) +$ $2\tau^2 \partial_x[\rho RT (RT \partial_x \partial_x \log(\rho RT) - (\partial_x u)^2)] +$ $4\tau^3 RT \partial_x [\partial_x(\rho RT \partial_x \partial_x u) - 2\rho RT (\partial_x u) (\partial_x \partial_x \log \rho RT)]$

As equações acima são muito difíceis de resolver mesmo numericamente por conta dos termos não-lineares envolvendo derivadas de alta ordem presentes nelas. As tentativas realizadas pelo autor usando discretizações baseadas em volumes ou diferenças finitas foram infrutíferas. Entretanto, mesmo se estas equações pudessem ser resolvidas, é difícil saber se sua solução poderia ter qualquer significado físico devido à hipótese de temperatura constante a alto número de Knudsen assumida no início da análise, ao modelo de operador de colisão assumido, que é muito simplificado, e aos problemas inerentes a análise de Chapman-Enskog^[3].

Mesmo que a correção de segunda ordem para as equações da fluidodinâmica não tenha significado físico neste caso, os resultados da análise de Chapman-Enskog podem ser comparados com os resultados numéricos que resolvem diretamente a equação de transporte de Boltzmann de maneira a validar a análise. Se ambos os métodos apresentarem os mesmos resultados nesta comparação, as equações obtidas através da análise de Chapman-Enskog podem ser utilizadas para determinar algumas das propriedades da solução obtida pelo método numérico, e.g., o intervalo de estabilidade do método numérico utilizado^[27].

3.2.1.3 Escoamentos Não Isotérmicos

Esta análise foi realizada considerando-se as seguintes relações:

$$f^{eq}(x, \xi, t) = \frac{n(x, t)}{\sqrt{2\pi RT(x, t)}} e^{-\frac{(\xi - u(x, t))^2}{2RT(x, t)}}, \quad (3.73)$$

$$\int f(x, \xi, t) d\xi = \int f^{eq}(x, \xi, t) d\xi, \quad (3.74)$$

$$\int f(x, \xi, t) \xi d\xi = \int f^{eq}(x, \xi, t) \xi d\xi, \quad (3.75)$$

$$\int f(x, \xi, t) \frac{(\xi - u(x, t))^2}{2} d\xi = \int f^{eq}(x, \xi, t) \frac{(\xi - u(x, t))^2}{2} d\xi. \quad (3.76)$$

A distribuição de equilíbrio utilizada foi a distribuição de Maxwell-Boltzmann completa, com ρ , u e T dependendo de x e t .

A análise de Chapman-Enskog deste sistema fornece os seguintes resultados,

Tabela 3: Análise de Chapman-Enskog de um modelo BGK não isotérmico unidimensional.

Equação de Balanço de Massa	
$Kn^m, \forall m \geq 0$	$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0$
Equação de Balanço de Quantidade de Movimento	
$Kn^m, \forall m \geq 0$	$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + \rho RT) = 0$
Equação de Balanço de Energia	
Kn^0	$\partial_t(\rho RT) + \partial_x(\rho u RT) = -2\rho RT(\partial_x u)$
Kn^1	$\partial_t(\rho RT) + \partial_x(\rho u RT) = -2\rho RT(\partial_x u) + 3\tau \partial_x(\rho RT(\partial_x RT))$
Kn^2	$\partial_t(\rho RT) + \partial_x(\rho u RT) = -2\rho RT(\partial_x u) + 3\tau \partial_x(\rho RT(\partial_x RT)) + 6\tau^2 \partial_x(\rho RT \partial_x(RT \partial_x u))$
Kn^3	$\partial_t(\rho RT) + \partial_x(\rho u RT) = -2\rho RT(\partial_x u) + 3\tau \partial_x(\rho RT(\partial_x RT)) + 6\tau^2 \partial_x(\rho RT \partial_x(RT \partial_x u)) + 3\tau^3 \partial_x[6\rho RT \partial_x(RT(\partial_x u)^2) + 3\partial_x(\rho \partial_x(RT^2 \partial_x RT)) + \rho RT \partial_x(RT^2 \partial_x \partial_x \log \rho) + \rho RT^2 \partial_x(RT \partial_x \partial_x \log \rho) + \rho(\partial_x RT)^3]$

É importante notar que, comparando os resultados acima como os das duas últimas

seções, as equações de balanço de massa e da quantidade de movimento neste caso não possuem correções de alta ordem em Knudsen, enquanto no caso de escoamentos isotérmicos apenas a equação de balanço de massa não apresenta nenhuma correção. A viscosidade cinemática em problemas unidimensionais não possui nenhum significado, sendo a equação de balanço de quantidade de movimento igual a equação de Euler^[4].

O parâmetro livre τ é utilizado aqui para controlar a difusividade térmica em primeira ordem de Knudsen. Os coeficientes de transporte de mais alta ordem não podem ser estabelecidos de maneira independente com o modelo de colisão adotado.

3.2.2 Escoamentos Bidimensionais

A formulação bidimensional da equação de transporte de Boltzmann com operador BGK é bastante efetiva para descrever uma série de diferentes fenômenos fluidodinâmicos e, por causa disto, é muito mais importante do ponto de vista prático do que a formulação unidimensional. Em contrapartida, as equações de balanço macroscópicas neste caso são muito mais difíceis de serem obtidas via análise de Chapman-Enskog e a resolução destas equações, mesmo numericamente, é bem mais complicada do que a de seus pares unidimensionais. Nas próximas seções alguns resultados das análises de Chapman-Enskog aplicadas a diferentes sistemas bidimensionais serão apresentadas.

3.2.2.1 Fenômenos Puramente Difusivos

Seguindo a derivação apresentada na Seção 3.1.4, as seguintes relações foram utilizadas:

$$\int m f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \int m f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \rho(\mathbf{x}, t) \quad (3.77)$$

$$\begin{aligned} & \int m f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \xi_x^p \xi_y^q d\boldsymbol{\xi} = \\ & \rho(\mathbf{x}, t) R T^{\frac{p+q}{2}} \left(\frac{1 + (-1)^p}{2} \right) \left(\frac{1 + (-1)^q}{2} \right) (p-1)!!(q-1)!! \end{aligned} \quad (3.78)$$

onde $p \geq 1, q \geq 1$.

A análise de Chapman-Enskog deste sistema fornece os seguintes resultados,

Tabela 4: Análise de Chapman-Enskog considerando um fenômeno puramente difusivo bidimensional.

Equação de Balanço de Massa	
Kn^0	$\partial_t \rho = 0$
Kn^1 e Kn^2	$\partial_t \rho = \tau RT \nabla^2 \rho$
Kn^3 e Kn^4	$\partial_t \rho = \tau RT \nabla^2 \rho + \tau^3 RT^2 \nabla^2 (\nabla^2 \rho)$
Kn^5 e Kn^6	$\partial_t \rho = \tau RT \nabla^2 \rho + \tau^3 RT^2 \nabla^2 (\nabla^2 \rho) + 4\tau^5 RT^3 \nabla^2 (\nabla^2 (\nabla^2 \rho))$
Kn^{2k-1} e Kn^{2k}	$\partial_t \rho = \sum_{i=1}^k a(i) \tau^{2i-1} RT^i \nabla^{2i} \rho$
onde	$a(i) = (i-1) \sum_{j=1}^{i-1} a(j)a(i-j)$ e $a(1) = 1$

Note que as equações encontradas em duas dimensões são generalizações das equações encontradas no caso unidimensional, Seção 3.2.1.1, e podem em muitas situações serem analisadas e resolvidas utilizando os mesmos métodos.

3.2.2.2 Escoamentos Isotérmicos

Esta análise foi realizada considerando-se as seguintes relações:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{n(\mathbf{x}, t)}{2\pi RT} e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2RT}}, \quad (3.79)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.80)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi}. \quad (3.81)$$

A análise de Chapman-Enskog deste sistema fornece os seguintes resultados,

Tabela 5: Análise de Chapman-Enskog de um modelo BGK isotérmico bidimensional.

Equação de Balanço de Massa	
$Kn^m, \forall m \geq 0$	$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0$
Equação de Balanço de Quantidade de Movimento	
Kn^0	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = 0$
Kn^1	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = \tau \partial_\beta (\rho RT (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha))$
Kn^2	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = \tau \partial_\beta (\rho RT (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)) +$ $2\tau^2 \partial_\beta [\rho RT (RT \partial_\alpha \partial_\beta \log(\rho RT) - (\partial_\gamma u_\alpha) (\partial_\gamma u_\beta))].$

Os resultados unidimensionais, Tabela 2, e os resultados bidimensionais da tabela acima são muito similares. Ambos apresentam na primeira ordem do número de Knudsen uma aproximação para as equações de Navier-Stokes escritas para um escoamento incompressível isotérmico^[4], Seção 3.1.3. O parâmetro livre τ pode ser utilizado neste caso para ajustar o valor da viscosidade cinemática enquanto, na Seção 3.2.1.2, ele era utilizado para ajustar o valor do segundo coeficiente de viscosidade.

3.2.2.3 Escoamentos Não Isotérmicos

Esta análise foi realizada considerando-se as seguintes relações:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{n(\mathbf{x}, t)}{(2\pi RT(\mathbf{x}, t))^{3/2}} e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2RT(\mathbf{x}, t)}}, \quad (3.82)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.83)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.84)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2} d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2} d\boldsymbol{\xi}. \quad (3.85)$$

A análise de Chapman-Enskog deste sistema fornece os seguintes resultados,

Tabela 6: Análise de Chapman-Enskog de um modelo BGK não isotérmico bidimensional.

Equação de Balanço de Massa	
$Kn^m, \forall m \geq 0$	$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0$
Equação de Balanço de Quantidade de Movimento	
Kn^0	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = 0$
Kn^1	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = \tau \partial_\beta (\rho RT (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \delta_{\alpha\beta} (\partial_\gamma u_\gamma)))$
Kn^2	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = \tau \partial_\beta (\rho RT (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \delta_{\alpha\beta} (\partial_\gamma u_\gamma)))$ $+ \tau^2 \partial_\beta (\rho RT (2(\partial_\alpha u_\gamma)(\partial_\beta u_\gamma) - \delta_{\alpha\beta} (\partial_\eta u_\gamma)(\partial_\eta u_\gamma)))$ $+ \tau^2 \partial_\beta (\rho RT (2(RT \partial_\alpha \partial_\beta \log \rho RT - \partial_\alpha \partial_\beta RT) - \delta_{\alpha\beta} (RT \partial_\gamma \partial_\gamma \log \rho RT - \partial_\gamma \partial_\gamma RT)))$
Equação de Balanço de Energia	
Kn^0	$\partial_t (\rho RT) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha RT) = -\rho RT (\partial_\alpha u_\alpha)$
Kn^1	$\partial_t (\rho RT) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha RT) = -\rho RT (\partial_\alpha u_\alpha)$ $+ 2\tau \partial_\alpha (\rho RT (\partial_\alpha RT)) + \tau \rho RT (\partial_\alpha u_\beta) (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \delta_{\alpha\beta} (\partial_\gamma u_\gamma))$
Kn^2	$\partial_t (\rho RT) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha RT) = -\rho RT (\partial_\alpha u_\alpha)$ $+ 2\tau \partial_\alpha (\rho RT (\partial_\alpha RT)) + \tau \rho RT (\partial_\alpha u_\beta) (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \delta_{\alpha\beta} (\partial_\gamma u_\gamma))$ $+ 2\tau^2 \partial_\alpha (\rho RT^2 \partial_\alpha \partial_\beta u_\beta) + \tau^2 \partial_\alpha (\rho RT^2 \partial_\beta \partial_\beta u_\alpha)$ $- 2\tau^2 \rho RT (\partial_\alpha u_\beta) \partial_\alpha \partial_\beta RT + \tau^2 \rho RT (\partial_\alpha u_\alpha) \partial_\beta \partial_\beta RT$ $- 4\tau^2 (\partial_\alpha u_\beta) \partial_\beta (\rho RT \partial_\alpha RT) + 4\tau^2 (\partial_\alpha u_\alpha) \partial_\beta (\rho RT \partial_\beta RT)$ $+ 2\tau^2 \rho RT (\partial_\alpha u_\beta) (\partial_\gamma u_\beta) (\partial_\gamma u_\alpha) - \tau^2 \rho RT (\partial_\alpha u_\beta) (\partial_\alpha u_\beta) (\partial_\gamma u_\gamma)$ $+ 2\tau^2 \rho RT^2 (\partial_\alpha u_\beta) \partial_\alpha \partial_\beta \log \rho RT - \tau^2 \rho RT^2 (\partial_\alpha u_\alpha) \partial_\beta \partial_\beta \log \rho RT$ $+ 2\tau^2 \partial_\alpha (\rho RT \partial_\alpha (RT \partial_\beta u_\beta)) - 2\tau^2 \partial_\alpha (\rho RT \partial_\beta (RT \partial_\beta u_\alpha)) - 2\tau^2 \partial_\alpha (\rho RT \partial_\beta (RT \partial_\alpha u_\beta)).$

Note que existem diversas diferenças entre o escoamentos unidimensional, Tabela 3, e o bidimensional. Estas diferenças podem ser relacionadas ao efeito da viscosidade nas equações de balanço da quantidade de movimento e energia no caso bidimensional. As equações obtidas até a primeira ordem do número de Knudsen são o conjunto completo das equações de Navier-Stokes-Fourier escritos para um escoamento compressível^[4].

As correções de alta ordem às equações encontradas são bastante complexas e difíceis de resolver devido ao grande número de termos, não-linearidades e derivadas de alta ordem. Apesar de não haver garantia de que estas equações representam qualquer fenômeno físico, uma análise cuidadosa dos resultados obtidos em alta ordem sugere um acoplamento não-linear entre os diferentes termos de baixa ordem destas equações.

3.3 Modelo de Colisão a Dois Tempos de Relaxação (TRT)

Como foi algumas vezes enfatizado neste trabalho, o modelo de colisão BGK, por possuir apenas um parâmetro livre, não é adequado para descrever escoamentos em que o número de Prandtl seja diferente de um. Para corrigir esta limitação foi proposto o modelo de colisão a dois tempos de relaxação (TRT), cuja análise de Chapman-Enskog será detalhada nesta seção. A Equação 2.53, que é a equação de evolução deste modelo,

$$\partial_t f + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = f^{eq} \left(\gamma_1 \phi + \frac{(\gamma_2 - \gamma_1)}{2} a_{\phi, \alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{C}) \right), \quad (3.86)$$

pode ser adimensionalizada pela mesma mudança de variáveis aplicada ao modelo de colisão BGK, i.e., utilizando as relações dadas pelas Eqs. 3.2, 3.3 e 3.4.

Seguindo a análise de Chapman-Enskog apresentada na Seção 3, a derivada temporal pode ser expandida como na Equação 3.9 e a função distribuição como na Equação 3.8. Reconhecendo que a expansão do coeficiente $a_{\phi, \alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{x}, t)$ em ordens do número de Knudsen é uma consequência direta da expansão da função distribuição f no número de Knudsen, Equação 2.41, obtém-se

$$a_{\phi, \alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{x}, t) = \frac{\tau_{\alpha\beta}}{\rho RT} = \frac{\int (Kn f^{(1)} + Kn^2 f^{(2)} + Kn^3 f^{(3)} + \dots) \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}}{\rho RT}. \quad (3.87)$$

A Equação 3.86 pode ser então ser separada em diferentes ordens do número de Knudsen como segue, onde foi adotado o tempo característico microscópico como $-1/\gamma_1$,

$$\partial_0 f^{eq} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{eq} = f^{(1)} + (\gamma_2/\gamma_1 - 1) \left(\frac{\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}}{2\rho RT} \right) f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}), \quad (3.88)$$

$$\partial_1 f^{eq} + \partial_0 f^{(1)} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(1)} = f^{(2)} + (\gamma_2/\gamma_1 - 1) \left(\frac{\int f^{(2)} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}}{2\rho RT} \right) f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}), \quad (3.89)$$

onde $C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}$ é o tensor polinomial de Hermite de segunda ordem, Equação A.4, C_α é a velocidade peculiar definida como $\frac{\xi_\alpha - u_\alpha}{\sqrt{RT}}$, Seção 2.2.1.

Quando a Equação 3.88 é multiplicada sucessivamente por 1, ξ_γ e ξ^2 e integrada no espaço de velocidades, as equações de balanço da massa, quantidade de movimento

e energia obedecidas por um gás cujas moléculas seguem o modelo de colisão TRT são obtidas no limite $Kn \rightarrow 0$,

$$\int f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}) d\mathbf{\xi} = \int f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \xi_\gamma d\mathbf{\xi} = 0, \quad (3.90)$$

$$\int f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \xi^2 d\mathbf{\xi} = 2\rho RT \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.91)$$

Substituindo a relação acima na Equação 3.88 de maneira a obter a equação de balanço de energia e reconhecendo que $\tau_{\alpha\alpha} = 0$, através da relação de conservação da energia, Equação 2.30 e Equação 2.41, pode ser demonstrado que um fluido descrito pelo modelo de colisão TRT obedece as mesmas equações da fluidodinâmica que um fluido descrito pelo modelo de colisão BGK no limite em que $Kn \rightarrow 0$, Eqs. 3.24, 3.32 e 3.33.

A próxima correção para as equações da fluidodinâmica, de ordem mais alta em relação ao número de Knudsen, pode ser obtida através da multiplicação da Equação 3.89 por 1, ξ_γ e ξ^2 com posterior integração. O lado direito desta equação é nulo devido às equações de conservação microscópicas. O lado esquerdo desta equação possui termos $\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\gamma d\mathbf{\xi}$ e $\int f^{(1)} \xi^2 \xi_\alpha d\mathbf{\xi}$ quando multiplicado por ξ_γ e ξ^2 respetivamente. Estes dois termos podem ser avaliados através da multiplicação da Equação 3.88 por $\xi_\gamma \xi_\delta$ e $\xi^2 \xi_\gamma$, com posterior integração.

Para que esta integração possa ser realizada, dois momentos adicionais da função distribuição de equilíbrio são necessários:

$$\int f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \xi_\gamma \xi_\delta d\mathbf{\xi} = (\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) \rho RT, \quad (3.92)$$

$$\int f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \xi^2 \xi_\gamma d\mathbf{\xi} = (\delta_{\beta\gamma} u_\alpha + \delta_{\alpha\gamma} u_\beta + \delta_{\alpha\beta} u_\gamma) 2\rho RT. \quad (3.93)$$

Obtém-se, desta forma,

$$\partial_0 \left(\int f^{eq} \xi_\gamma \xi_\delta d\mathbf{\xi} \right) + \theta \partial_\alpha \left(\int f^{eq} \xi_\alpha \xi_\gamma \xi_\delta d\mathbf{\xi} \right) = (\gamma_2/\gamma_1) \left(\int f^{(1)} \xi_\gamma \xi_\delta d\mathbf{\xi} \right), \quad (3.94)$$

$$\begin{aligned} \partial_0 \left(\int f^{eq} \xi^2 \xi_\gamma d\mathbf{\xi} \right) + \theta \partial_\alpha \left(\int f^{eq} \xi^2 \xi_\alpha \xi_\gamma d\mathbf{\xi} \right) = \\ \left(\int f^{(1)} \xi^2 \xi_\gamma d\mathbf{\xi} \right) + (\gamma_2/\gamma_1 - 1) \left(\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\mathbf{\xi} \right) (\delta_{\beta\gamma} u_\alpha + \delta_{\alpha\gamma} u_\beta). \end{aligned} \quad (3.95)$$

O desenvolvimento algébrico da equação acima leva a, ver Seção 3,

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha (\rho RT) + \partial_\beta \left(\frac{\rho RT}{\gamma_2} \left(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) \right) = 0, \quad (3.96)$$

que é a equação de balanço de quantidade de movimento obedecida pelo fluido em primeira ordem do número de Knudsen. Neste caso, Equação 3.40, a viscosidade cinemática μ pode

ser relacionada a γ_2 através da equação:

$$\mu = -\frac{\rho RT}{\gamma_2} = \tau_2 \rho RT. \quad (3.97)$$

Como γ_2 é sempre um número negativo e é mais comum utilizar um tempo de relaxação como parâmetro livre ao invés de uma frequência, γ_2 é frequentemente igualado a $-1/\tau_2$, e τ_2 é então utilizado como parâmetro livre do modelo.

Com a ajuda das Eqs. 3.22, 3.25 e 3.28 para avaliar as derivadas ∂_0 e da Equação 3.9 para reconstruir a derivada temporal, a Equação 3.95, depois de um dispendioso exercício de álgebra, pode ser simplificada de forma a obter-se:

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{D}{2} \rho RT \right) + \partial_\beta \left(\frac{\rho u^2 u_\beta}{2} + \frac{D}{2} \rho u_\beta RT \right) = -\partial_\beta (\rho u_\beta RT) - \\ \partial_\beta \left(\frac{1}{\gamma_1} \left(\frac{D+2}{2} \right) \rho RT \partial_\beta (RT) + \frac{\rho RT}{\gamma_2} u_\alpha \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) \right). \end{aligned} \quad (3.98)$$

Esta é a equação de balanço de energia obedecida por um gás cujas moléculas seguem um modelo de colisão a dois tempos de relaxação quando correções até a primeira ordem de Knudsen são a ela incluídas.

Uma equação de evolução para a energia interna deste gás pode ser obtida se a energia mecânica for subtraída da equação acima, i.e.,

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{D}{2} \rho RT \right) + \partial_\beta \left(\frac{D}{2} \rho RT u_\beta \right) = -\partial_\beta \left(\frac{1}{\gamma_1} \left(\frac{D+2}{2} \right) \rho RT \partial_\beta (RT) \right) - \\ \frac{\rho RT}{\gamma_2} (\partial_\alpha u_\beta) \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) - \rho RT \partial_\beta u_\beta. \end{aligned} \quad (3.99)$$

O segundo termo na parte direita da equação acima está relacionado aos efeitos dissipativos causado pela ação das forças viscosas. A expressão $-\rho RT/\gamma_2$ multiplicando as derivadas é a viscosidade e confirma a forma encontrada na equação de balanço da quantidade de movimento, Equação 3.97.

A relação entre a condutividade térmica k e o parâmetro γ_1 é dada por^[4]

$$k = -\frac{1}{\gamma_1} \left(\frac{D+2}{2} \right) \rho R^2 T = \tau_1 \left(\frac{D+2}{2} \right) \rho R^2 T. \quad (3.100)$$

Como γ_1 é sempre um número negativo e é mais comum utilizar um tempo de relaxação como parâmetro livre ao invés de uma frequência, γ_1 é frequentemente igualado a $-1/\tau_1$, e τ_1 é então utilizado como parâmetro livre do modelo.

Pode ser deduzido a partir das Eqs. 3.97 e 3.100 que o número de Prandtl é, neste caso, igual a

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu C_P}{k} = \frac{\tau_2}{\tau_1}. \quad (3.101)$$

Note que, como o modelo de colisão TRT possui dois parâmetros livres, τ_1 e τ_2 , ele pode ser utilizado para ajustar o número de Prandtl livremente.

Desta forma, como no exemplo do modelo de colisão BGK, as equações resultantes da análise de Chapman-Enskog dependem somente dos momentos da função distribuição de equilíbrio. Quando o modelo de colisão a dois tempos de relaxação é considerado, além do conjunto de momentos $\{1, \xi_\alpha, \xi_\alpha \xi_\beta, \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma, \xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta\}$, Eqs. 2.28, 2.29, 3.26, 3.36 e 3.44, também os momentos $\{\xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma \xi_\delta, \xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma\}$, Eqs. 3.92 e 3.93, são necessários para que a análise de Chapman-Enskog seja realizada até a primeira ordem do número de Knudsen.

Uma inspeção cuidadosa da análise de Chapman-Enskog realizada mostra que quando o modelo de colisão TRT é considerado, os momentos necessários para recuperar cada correção da análise de Chapman-Enskog até uma determinada ordem do número de Knudsen crescem por uma potência quando comparados com a análise do modelo de colisão BGK, i.e., utilizando o modelo de colisão TRT, as equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia são recuperadas até a ordem n do número de Knudsen se os momentos da função distribuição de equilíbrio até as ordens $(n+2)$, $(n+3)$ e $(n+4)$ forem corretamente representados.

É interessante notar que quanto maior o número de tempos de relaxação diferentes considerados na linearização e diagonalização do operador de colisão, Seções 2.2.1, 2.2.3 e 2.2.3, melhor deve ser descrita a função distribuição de equilíbrio através de seus momentos. Em uma análise de Chapman-Enskog, considerando correções de ordem até n em relação ao número de Knudsen e um truncamento da expansão em polinômios de Hermite no termo de ordem m , são utilizados momentos da distribuição de equilíbrio de ordem até $(n+m)$, $(n+m+1)$ e $(n+m+2)$ na derivação das equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia.

Como será discutido com mais detalhes mais tarde, Seção 6, a ordem dos momentos da distribuição de equilíbrio que devem ser representados em um espaço discreto de velocidades é determinante no número de velocidades independentes pelo qual este espaço é composto. Quanto maior a ordem dos momentos da distribuição de equilíbrio, maior é este conjunto de velocidades. Desta forma, os métodos numéricos que utilizam modelos de colisão com mais de um tempo de relaxação são mais caros computacionalmente do que os métodos numéricos que utilizam o modelo de colisão BGK. Em contrapartida, os primeiros métodos têm uma quantidade maior de parâmetros livres, que proporcionam uma maior flexibilidade na definição do modelo de fluido que será simulado.

Acredita-se, ainda, que a inclusão de ordens maiores de momentos na distribuição de equilíbrio discreta pode trazer estabilidade aos algoritmos utilizados, i.e., redes com

um maior número de velocidades podem representar melhor os fenômenos físicos de alta ordem, diminuindo os efeitos numéricos dos algoritmos. Siebert^[28] mostra que em diversos casos isto pode ser verdadeiro.

Este capítulo mostrou os aspectos gerais da equação de transporte de Boltzmann e sua conexão com as equações de balanço macroscópicas via análise de Chapman-Enskog. No próximo capítulo os métodos de Boltzmann para redes serão apresentados e situados historicamente.

4 *Discretização da Equação de Boltzmann*

4.1 Solução da Equação de Boltzmann

A forma completa da equação de Boltzmann, Equação 2.9, é difícil de resolver e analisar devido a não-linearidade do termo de colisão [3, 7–9]. No capítulo anterior foram estudadas alternativas a esta equação no âmbito teórico com o objetivo de tornar o processo de solução da equação de Boltzmann simples e possível, mantendo a maior quantidade possível de informações sobre o fenômeno físico possível, e.g., considerando o modelo TRT para representar escoamentos a número de Prandtl variável.

No contexto da Teoria Cinética dos Gases, existem diversas alternativas que podem ser empregadas para resolver a equação de transporte de Boltzmann ou um de seus modelos [3, 6, 9]. Nesta seção, os métodos de lattice Boltzmann (LBMs) serão discutidos como uma destas alternativas, aplicando os modelos de colisão desenvolvidos no último capítulo.

4.2 Métodos de Lattice Boltzmann

Existem três diferentes formas de interpretar os LBMs.

Os primeiros LBMs foram criados após o desenvolvimento dos modelos de lattice gas e cellular automata^[29–31], Seção 4.3, e obedecem o mesmo princípio básico deles, i.e., que sistemas complexos podem ser descritos por regras simples que representem as características mais importantes deles enquanto detalhes menos importantes para a dinâmica destes sistemas são ignorados.

A função distribuição é interpretada como um conjunto de moléculas ou partículas que colidem e propagam dentro de uma rede obedecendo as leis de conservação como se elas fossem verdadeiramente um grupo de bolas de borracha. Os modelos de colisão e as condições de contorno são projetados através desta visão, pensando em como um grupo de partículas qualquer responderia a um estímulo causado pela presença de um outro

grupo de partículas presentes nas fronteiras do sistema, e.g., em escoamentos multifásicos a presença de partículas de mesma espécie de um grupo considerado ou de outra espécie estimula a criação de forças empíricas atrativas entre partículas de mesma espécie e repulsivas entre partículas de espécie diferente, fazendo com que padrões de imiscibilidade ou transição de fases sejam representados^[32].

Quando os LBMs começaram a ser utilizados em larga escala, percebeu-se que estes métodos eram computacionalmente bastante robustos, qualidade que atraiu a atenção de pesquisadores em diversas áreas diferentes. A segunda forma de interpretar os LBMs então emergiu, que é a visão destes métodos como solvers matemáticos aplicados na resolução de equações hiperbólicas.

Aplicações recentes que são parte desta classe de métodos incluem a solução de problemas envolvendo dinâmica de galáxias^[33], magnetohidrodinâmica^[34], mecânica quântica^[19] e outras^[19]. Aqui a função distribuição não é necessariamente conectada com qualquer variável da Teoria Cinética dos Gases e é utilizada somente como uma variável intermediária para recuperar alguma quantidade através de médias sobre estas variáveis, e.g., a massa, quantidade de movimento e energia na fluidodinâmica ou o campo magnético na magnetohidrodinâmica. Os modelos de colisão e condições de contorno são projetados sempre pensando em como uma soma poderia fornecer como resposta um valor prescrito para uma variável de interesse.

Quando o número de aplicações dos métodos de lattice Boltzmann aumentou, a conexão entre a equação de transporte de Boltzmann e estes métodos foi ficando cada vez mais evidente e uma base teórica para esta conexão foi sendo criada. Os trabalhos que então surgiram sobre as discretizações da equação de Boltzmann do espaço físico, temporal^[35-38] e de velocidades^[1, 2, 36, 39, 40], sem a necessidade de se referir teoricamente aos modelos de lattice gas, abriram uma nova perspectiva para o uso dos LBMs como um método para resolver diretamente a equação de transporte de Boltzmann, expandindo o limite de aplicação destes métodos para outros problemas relacionados mais diretamente a Teoria Cinética dos Gases, e.g., escoamentos a alto número de Knudsen.

As diferenças entre as três formas de se interpretar os LBMs estão relacionadas à forma com que estes métodos são derivados, o modo como as condições de contorno são vistas e a forma com que os erros numéricos destes métodos são estimados. Dependendo da aplicação ou de maneira que o entendimento sobre o método seja melhorado, uma ou outra forma pode ser utilizada.

Seguindo a visão do LBM como um método para resolver a equação de Boltzmann utilizando os modelos de colisão mostrados no Capítulo 2, nos próximos capítulos será

discutido como esta discretização é realizada, como determinar suas condições de contorno e o que pode ser feito para que os LBMs sejam um método confiável para resolver a equação de transporte de Boltzmann. Na próxima seção os modelos de lattice gas e sua conexão com os LBMs serão apresentados.

4.3 Modelos de Lattice Gas

Os métodos de lattice Boltzmann foram primeiramente propostos como uma extensão dos modelos de lattice gas^[41], que são um tipo de autômato celular no qual uma rede regular, composta por um conjunto de pontos, contém partículas fictícias que viajavam de ponto a ponto em tempos discretos, se encontrando nestes pontos ao final de cada passo de tempo e trocando quantidade de movimento e energia, Figura 3. À etapa onde as partículas trocam quantidade de movimento e energia dá-se o nome de colisão e à outra dá-se o nome de propagação.

As velocidades das partículas, nestes modelos, são restritas a valores discretos, de maneira que a cada passo de tempo as posições das partículas coincidem com as posições dos pontos discretos da rede. De maneira a recuperar corretamente as equações da massa, quantidade de movimento e energia, o conjunto de velocidades discretas precisa obedecer certas condições de isotropia, e.g., quando as equações de Navier-Stokes devem ser recuperadas, as redes devem ser isotrópicas ao menos até a quarta ordem ^[29, 30], Seção 6.

A seguinte equação representa a dinâmica do modelo:

$$N_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta t, t + \delta t) = N_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t), \quad (4.1)$$

onde N_i é uma variável booleana que representa a presença de uma partícula com velocidade molecular $\boldsymbol{\xi}_i$ em um certo ponto da rede considerada. O índice i representa cada uma das velocidades discretas da rede, e.g., Seção 6.5.1.1, e o operador Ω_i representa o efeito das colisões sobre a variável N_i .

Esta equação de evolução pode ser dividida em dois passos principais:

1. Colisão

$$N'_i(\mathbf{x}, t) = N_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.2)$$

Neste passo as partículas trocam quantidade de movimento. O balanço de energia é raramente obedecido nestes primeiros modelos já que o número de velocidades discretas necessárias para representar este escoamento era desconhecido e grande, o que diminuía muito a capacidade de processamento destes modelos devido a um passo de colisão consideravelmente mais complexo, dificuldades na aplicação das

condições de contorno e necessidade de médias mais demoradas, considerando um espaço físico maior ou um maior número de sistemas para atenuar significativamente o ruído que é característico destes modelos.

Devido ao fato do número de estados microscópicos possíveis deste sistema ser limitado, todos os estados podem ser, se o número de velocidades discretas não for excessivamente grande, descritos e armazenados em uma tabela de colisão, na qual variáveis de entrada, i.e., o número de partículas, a quantidade de movimento e a energia em um ponto, dão acesso a conjuntos de estados que compartilham destas mesmas propriedades.

Esta tabela pode ser construída porque o número máximo de partículas com uma certa velocidade discreta é um. Apesar do uso desta tabela fazer com que o algoritmo fosse muitíssimo rápido, a restrição em relação ao número de partículas com uma determinada velocidade é responsável por uma das maiores desvantagens deste modelo, a função distribuição de equilíbrio de Fermi-Dirac que daí resulta^[15].

O passo de colisão consiste na medida das variáveis de entrada e depois disto, de um sorteio de um estado de saída através dos estados possíveis detalhados na tabela de colisão. A Figura 3 mostra este processo em uma rede D2Q9, Seção 6.5.1.1.



Figura 3: Etapa de colisão nos modelos de lattice gas.

2. Propagação

$$N_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta t, t + \delta t) = N'_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.3)$$

Neste passo, partículas com velocidade $\boldsymbol{\xi}_i$ propagam entre os diversos pontos da rede entre os sítios conectados por vetores $\boldsymbol{\xi}_i \delta t$. A figura 4 mostra este processo em uma rede D2Q9, Seção 6.5.1.1.

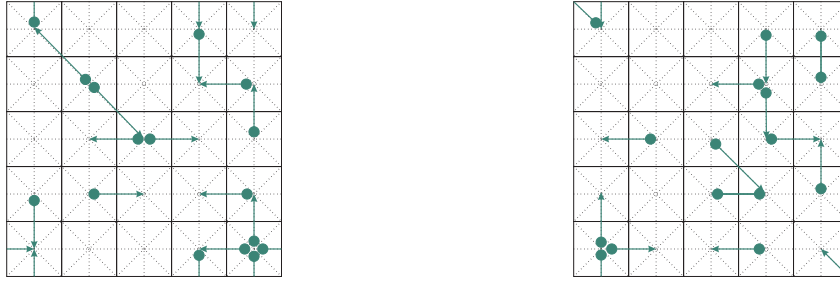


Figura 4: Etapa de propagação nos modelos de lattice gas.

Apesar do grande entusiasmo com o qual os modelos de lattice gas foram recebidos pela comunidade científica, e.g.^[42],

Uma estranha e nova corrente da física teórica encontrou uma forma de evitar completamente os cálculos que os computadores acham tão complicados. Ao invés de usar equações complexas para modelar o escoamento de fluidos, os físicos estão criando modelos matemáticos fantasticamente simples conhecidos como autômatos celulares.¹

Foi logo constatado que as aplicações nas quais os modelos de lattice gas poderiam ser usados eram severamente limitadas pelo grande ruído apresentado na medida das variáveis macroscópicas de interesse, pela dependência da pressão fluidodinâmica em relação à velocidade macroscópica do gás, conhecida como quebra da invariância galileana, pela função distribuição de equilíbrio de Fermi-Dirac e pela dificuldade em simular escoamentos a alto número de Reynolds^[15].

4.4 Modelos de Lattice Boltzmann

De maneira a eliminar a grande quantidade de ruído presente nos modelos de lattice gas foi idealizado um modelo que ao invés de utilizar variáveis booleanas para indicar a presença ou ausência de partículas com determinada velocidade utiliza variáveis reais, de acordo com a equação:

$$f_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t), \quad (4.4)$$

onde f_i representa o número esperado de partículas com velocidade i . Para que este modelo seja fechado é necessário determinar uma forma para o operador de colisão $\Omega_i(\mathbf{x}, t)$.

¹Uma tradução livre de: "A strange new wing of theoretical physics has found a way to sidestep completely the calculations that computers find so fiendish. Instead of using complex equations to mirror fluid flow, physicists are creating fantastically simple mathematical models known as cellular automata."

Nestes primeiros modelos o operador de colisão é ajustado livremente de forma que as equações da hidrodinâmica na escala macroscópica sejam corretamente representadas.

McNamara e Zanetti^[43] foram os primeiros a propor a equação acima considerando um operador de colisão semelhante àquele utilizado pelos modelos de lattice gas. O nível de ruído deste método foi bastante diminuído em relação aos modelos de lattice gas em troca de um custo computacional bem maior. Apesar deste modelo não ter sido muito utilizado por compartilhar os mesmos problemas dos modelos de lattice gas, ele foi importante como um primeiro passo no desenvolvimento que deu origem aos métodos de lattice Boltzmann modernos.

Higuera e Jimenez^[44] simplificaram o método de McNamara e Zanetti através da expansão da função distribuição em uma série que tinha a distribuição de equilíbrio, que neste trabalho é idêntica à distribuição de equilíbrio dos modelos de lattice gas, como centro. A equação de evolução deste método é

$$f_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \sum_j A_{ij} (f_j(\mathbf{x}, t) - f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (4.5)$$

quando termos de segunda ordem são desprezados. Mais tarde o operador de colisão proposto por Higuera e Jimenez, Equação 4.5, foi explorado com mais detalhes, dando origem ao método a múltiplos tempos de relaxação (MRT)^[45].

Chen e colaboradores^[46] e Qian e colaboradores^[25] propuseram ao mesmo tempo uma simplificação para a equação acima através da diagonalização do operador de colisão, os primeiros para uma aplicação em magnetohidrodinâmica e os segundos para uma aplicação em fluidodinâmica. A equação encontrada, que possuía um único parâmetro livre τ^* , é

$$f_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau^*}, \quad (4.6)$$

que pode ser considerada uma aproximação de primeira ordem para o operador de colisão BGK, Equação 3.1.

Qian e colaboradores^[25] foram ainda mais longe e propuseram uma distribuição de equilíbrio que substituída a distribuição de equilíbrio anterior, que foi construída com base nos modelos de lattice gas e era uma distribuição de Fermi-Dirac, eliminando assim os problemas relacionados a falta de invariância galileana até a primeira ordem do número de Knudsen, Capítulo 6.

Eles fizeram isto expandindo a função distribuição de equilíbrio em uma série de potências e, deixando os coeficientes da expansão livres, realizando a análise de Chapman-Enskog do modelo. As equações resultantes em primeira ordem do número de Knudsen foram ajustadas então de forma a corresponderem às equações de Navier-Stokes de um

escoamento isotérmico. O modelo proposto por eles, conhecido como LBGK, espalhou-se rapidamente entre a comunidade de mecânica dos fluidos devido principalmente a sua simplicidade e a performance do algoritmo resultante, conhecido por ser facilmente adaptável ao processamento paralelo. Os conjuntos de velocidades discretas utilizados por eles neste artigo, Capítulo 6, adotaram a nomenclatura $DiQj$ onde i é o número de dimensões do sistema considerado e j é o número de velocidades discretas da rede considerada.

5 *Discretização do Espaço Físico e do Tempo*

5.1 Métodos de Lattice Boltzmann

No último capítulo foram mostrados diferentes LBMs que compartilhavam uma mesma característica, a de possuir um operador de colisão $\Omega_i(\mathbf{x}, t)$ modelado empiricamente, sem qualquer conexão formal com a Teoria Cinética dos Gases. Isto aconteceu principalmente porque, como foi discutido no último capítulo, os primeiros métodos de lattice Boltzmann foram pensados como uma espécie de classe de celular automata, cujas bases de desenvolvimento são essencialmente numéricas e empíricas. Quando a relação entre a função distribuição no LBM e a função distribuição da Teoria Cinética foi ficando clara, uma série de pesquisadores tentou fazer uma conexão mais formal entre a equação de transporte de Boltzmann e os métodos de lattice Boltzmann.

Esta conexão é desejável por diferentes razões.

Quando o interesse pela aplicação dos modelos de lattice gas e lattice Boltzmann na resolução das equações de Navier-Stokes aumentou, diversas questões de ordem prática foram surgindo, por exemplo, estudos sobre a estabilidade numérica dos métodos e sobre o uso de malhas adaptativas (que são de fundamental importância em problemas de fluidodinâmica). Muitos destes problemas podem ser estudados de um ponto de vista essencialmente numérico, o que justifica a procura por uma conexão entre os LBMs e a equação de transporte de Boltzmann com o objetivo de esclarecer algumas das hipóteses numéricas adotadas nas derivações do método, procurando, desta forma, melhorar o algoritmo resultante ou determinar seu domínio de aplicação.

Na década de 1990, o interesse científico pelo LBM cresceu devido a sua capacidade de lidar com escoamentos complexos utilizando modelos robustos baseados apenas na intuição física do desenvolvedor do modelo. Todavia, a conexão entre os métodos de lattice Boltzmann e a equação de transporte de Boltzmann poderia melhorar estes modelos através da utilização de desenvolvimentos da Teoria Cinética dos Gases de forma mais

direta, e.g., através da utilização de modelos de colisão conhecidos e condições de contorno mais próximas da realidade.

Na próxima seção será apresentada uma forma de derivar os LBMs a partir da equação de transporte de Boltzmann com um modelo de colisão BGK^[36]. Esta derivação é usualmente realizada pela discretização da equação de transporte de Boltzmann em dois passos, o primeiro relacionado à discretização do espaço físico e temporal e o segundo, que será discutido com mais detalhes somente no próximo capítulo, relacionado à discretização do espaço de velocidades.

Neste capítulo, todas as análises apresentadas foram realizadas considerando que o espaço de velocidades é contínuo. Procurou-se, com esta medida, desacoplar os erros numéricos originados na discretização espacial e temporal dos erros numéricos originados na discretização do espaço de velocidades.

5.1.1 Derivação de He and Luo

A equação de evolução do modelo de colisão BGK, Equação 3.1, multiplicada pelo fator de integração $e^{t/\tau}$, pode ser escrita como

$$\frac{D(e^{t/\tau} f)}{Dt} = \frac{e^{t/\tau} f^{eq}}{\tau}, \quad (5.1)$$

onde $\frac{D}{Dt}$ é a derivada material $\partial_t + \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\nabla}$. A integração da equação acima entre o tempo t e o tempo $t + \delta t$ ao longo da trajetória de velocidade característica $\boldsymbol{\xi}$ no espaço de fases tem como resultado

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) - e^{-\delta t/\tau} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{e^{-\delta t/\tau}}{\tau} \int_t^{t+\delta t} e^{(t'-t)/\tau} f^{eq}(\mathbf{x} + (t' - t)\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}, t') dt'. \quad (5.2)$$

De maneira a realizar a integração remanescente na equação acima, deve-se postular como a distribuição de equilíbrio varia entre o tempo t e $t + \delta t$ ao longo da trajetória de integração. Como uma primeira aproximação, de ordem $\delta t/\tau$, pode-se considerar $f^{eq}(\mathbf{x} + (t' - t)\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}, t')$ constante ao longo desta trajetória,

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) - e^{-\delta t/\tau} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = (1 - e^{-\delta t/\tau}) f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t). \quad (5.3)$$

Expandindo as exponenciais em termos de $\delta t/\tau$ e mantendo somente os termos de ordem zero e um, obtém-se

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau/\delta t}. \quad (5.4)$$

Outros modelos poderiam ser obtidos se a forma da distribuição de equilíbrio ao longo da trajetória fosse assumida diferente ou se outros termos de alta ordem fossem considerados na derivação^[28]. Apesar deste procedimento não gerar uma diversidade muito grande de algoritmos e a equação acima poder ser obtida de forma mais direta considerando a aproximação de primeira ordem da derivada material pelo método de diferenças finitas, ele é um marco importante para o desenvolvimento do LBM, pois constitui a primeira derivação completa do LBM a partir da equação de transporte de Boltzmann quando a discretização do espaço de velocidades também é considerada, Capítulo 6.

5.1.2 Análise de Escala

De maneira a aplicar a análise de Chapman-Enskog, Capítulo 3, ao esquema de colisão e propagação dado pela Equação 5.4, uma análise de escala precisa ser realizada. Neste caso, o objetivo da análise é avaliar o erro numérico relacionado a discretização espacial e temporal do método em diferentes ordens do número de Knudsen.

Expandindo o lado esquerdo da Equação 5.4 em séries de Taylor em torno do ponto $\mathbf{x}$, $\boldsymbol{\xi}$ e t do espaço de fases,

$$(\partial_t + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla) f + \frac{\delta t}{2} (\partial_t + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla)^2 f + \frac{\delta t^2}{6} (\partial_t + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla)^3 f + \dots = \frac{f^{eq} - f}{\tau}, \quad (5.5)$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo da equação acima representa o termo de transporte da equação de Boltzmann e o segundo termo é o maior erro cometido ao discretizar a equação de evolução do modelo BGK através deste método.

Nesta análise de escala é importante saber quão grande é o passo de tempo δt em relação ao tempo de relaxação τ . Lembrando que τ é um tempo característico do gás que está sendo modelado e δt é um tempo característico do método numérico empregado, se δt é maior do que τ , tem-se um método sobrerelaxado, que é computacionalmente eficiente e instável. Por outro lado, se δt é menor do que τ , o método é mais estável mas computacionalmente mais caro. Frequentemente, de maneira a manter um equilíbrio entre os custos computacionais do método e a estabilidade do algoritmo, adotam-se valores de δt bastante próximos a τ .

5.1.3 Análise de Chapman-Enskog

Nesta seção são mostradas as equações resultantes da análise de Chapman-Enskog do algoritmo de colisão e propagação, Equação 5.5. Os resultados desta análise serão testados numericamente na Seção 8.1.1. Seguindo um procedimento similar àquele empregado no

Capítulo 3, uma análise de escala foi realizada a partir da Equação 5.5,

$$\begin{aligned}
& Kn^0 (f^{eq} - f^{(0)}) + \\
& Kn^1 (\partial_0 f^{eq} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{eq} + f^{(1)}) + \\
& Kn^2 (\partial_1 f^{eq} + \partial_0 f^{(1)} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(1)} + f^{(2)} \\
& + \frac{\delta t}{2\tau} (\partial_0 \partial_0 f^{eq} + 2\xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} \partial_0 f^{eq} + \xi_\alpha^* \xi_\beta^* \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} f^{eq})) + \\
& Kn^3 (\partial_2 f^{eq} + \partial_1 f^{(1)} + \partial_0 f^{(2)} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(2)} + f^{(3)} \\
& + \frac{\delta t}{2\tau} (\partial_1 \partial_0 f^{eq} + \partial_0 \partial_1 f^{eq} + \partial_0 \partial_0 f^{(1)} + 2\xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} \partial_1 f^{eq} + 2\xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} \partial_0 f^{(1)} + \xi_\alpha^* \xi_\beta^* \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} f^{(1)}) \\
& + \frac{\delta t^2}{6\tau^2} (\partial_0 \partial_0 \partial_0 f^{eq} + 3\xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} \partial_0 \partial_0 f^{eq} + 3\xi_\alpha^* \xi_\beta^* \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} \partial_0 f^{eq} + \xi_\alpha^* \xi_\beta^* \xi_\gamma^* \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} \partial_{\gamma^*} f^{eq})) \\
& + O[Kn^4] = 0.
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Pode ser observado pela equação acima que as duas primeiras equações da expansão em relação ao número de Knudsen não foram influenciadas pelos erros do algoritmo. Isto significa que as equações obtidas na aplicação da análise de Chapman-Enskog ao modelo contínuo são válidas ainda em ordem zero. A partir da primeira ordem, todavia, os erros numéricos do algoritmo precisam ser calculados.

As equações obtidas no caso de um modelo puramente difusivo bidimensional estão resumidas na Tabela 7. Como pode ser observado, a forma das equações obtidas é muito similar à do contínuo, Tabela 4, apesar da forma dos coeficientes de transportes ser diferente.

Equação de Balanço de Massa	
Kn^0	$\partial_t \rho = 0$
Kn^1 and Kn^2	$\partial_t \rho = \tau \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) RT \nabla^2 \rho$
Kn^3 and Kn^4	$\partial_t \rho = \tau \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) RT \nabla^2 \rho + \tau^3 \left(1 - \frac{3\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{2\tau^2}\right) RT^2 \nabla^2 (\nabla^2 \rho)$
Kn^5 and Kn^6	$\partial_t \rho = \tau \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) RT \nabla^2 \rho + \tau^3 \left(1 - \frac{3\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{2\tau^2}\right) RT^2 \nabla^2 (\nabla^2 \rho)$ $+ 4\tau^5 \left(1 - \frac{5\delta t}{2\tau} + \frac{25\delta t^2}{12\tau^2} - \frac{5\delta t^3}{8\tau^3} + \frac{\delta t^4}{24\tau^4}\right) RT^3 \nabla^2 (\nabla^2 (\nabla^2 \rho))$

Tabela 7: Análise de Chapman-Enskog do esquema de colisão e propagação, considerando um fenômeno puramente difusivo.

É interessante notar que todas as correções para os coeficientes de transporte são de primeira ordem em relação a δt , conforme esperado quando o esquema de discretização da derivada material é analisado. É comum, todavia, incorporar os erros do algoritmo

na definição do primeiro coeficiente de transporte do gás modelado, o que é equivalente à mudança de variáveis: $\tau \rightarrow \tau' + \frac{\delta t}{2}$ ou a definir o que pode ser chamado de viscosidade aparente^[47].

Neste caso os coeficientes de transporte podem ser reescritos como

$$\tau \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) RT \rightarrow \tau' RT, \quad (5.7)$$

$$\tau^3 \left(1 - \frac{3\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{2\tau^2}\right) RT^2 \rightarrow \tau'^3 \left(1 - \frac{\delta t^2}{4\tau'^2}\right) RT^2, \quad (5.8)$$

$$4\tau^5 \left(1 - \frac{5\delta t}{2\tau} + \frac{25\delta t^2}{12\tau^2} - \frac{5\delta t^3}{8\tau^3} + \frac{\delta t^4}{24\tau^4}\right) RT^3 \rightarrow 4\tau'^5 \left(1 - \frac{5\delta t^2}{12\tau'^2} + \frac{\delta t^4}{24\tau'^4}\right) RT^3, \quad (5.9)$$

e considera-se que os maiores erros numéricos do algoritmo são de segunda ordem em relação ao tempo. Uma propriedade interessante do algoritmo analisado, Seção 8.1.2.2, é que apenas a correção de primeira ordem é diferente de zero quando δt é igual a τ .

As equações obtidas através da expansão de Chapman-Enskog quando um escoamento isotérmico é modelado estão resumidas na Tabela 8 e podem ser comparadas com as equações obtidas quando o modelo contínuo é analisado, Tabela 5.

Equação de Balanço de Massa	
Kn^0	$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0$
Kn^1	$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0$
Kn^2	$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = \left(\frac{\delta t^2}{6}\right) \partial_\alpha \partial_\beta (\rho RT \partial_\alpha u_\beta)$
Equação de Balanço de Quantidade de Movimento	
Kn^0	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = 0$
Kn^1	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = \left(\tau - \frac{\delta t}{2}\right) \partial_\beta (\rho RT (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha))$
Kn^2	$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = \left(\tau - \frac{\delta t}{2}\right) \partial_\beta (\rho RT (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha))$ $+ \left(2\tau^2 - 2\tau\delta t + \frac{\delta t^2}{6}\right) \partial_\beta [\rho RT (RT \partial_\alpha \partial_\beta \log(\rho RT) - (\partial_\gamma u_\alpha) (\partial_\gamma u_\beta))]$ $+ \left(\frac{\delta t^2}{6}\right) (u_\alpha \partial_\beta \partial_\gamma (\rho RT \partial_\beta u_\gamma) - \partial_\gamma [\rho RT (\partial_\beta u_\gamma) (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)] - \rho RT (\partial_\beta u_\gamma) (\partial_\beta \partial_\gamma u_\alpha))$

Tabela 8: Análise de Chapman-Enskog do esquema de colisão e propagação, considerando um modelo BGK isotérmico bidimensional.

Neste caso a viscosidade é proporcional a $\tau - \delta t/2$, resultado que é bastante similar ao caso puramente difusivo onde o coeficiente de difusão também era proporcional a

$\tau - \delta t/2$. Se a mesma mudança de variáveis for aplicada, i.e., $\tau \rightarrow \tau' + \frac{\delta t}{2}$, os coeficientes de transporte obtidos serão de segunda ordem em relação ao tempo, mas neste caso existirão novos termos não físicos, i.e., termos que não podem ser diretamente ligados ao modelo de colisão adotado, mas somente ao método numérico utilizado, nas correções de alta ordem, e.g., a equação de balanço de massa apresenta um termo espúrio em segunda ordem de Knudsen que é proporcional a δt^2 enquanto, no modelo contínuo, as correções de alta ordem para a equação de balanço de massa são nulas.

Admitindo que a análise de Chapman-Enskog é uma ferramenta analítica confiável para avaliar os métodos numéricos aqui mostrados, os erros de segunda ordem destes métodos limitam a utilização do esquema de colisão e propagação à resolução de problemas a baixo número de Knudsen. Alguns autores, todavia, contestam esta conclusão.

Benzi e colaboradores^[48], comparando os resultados das simulações através dos LBMs diretamente com resultados experimentais em problemas simples, fizeram modificações nas condições de contorno para fazer a simulação de problemas a alto número de Knudsen possível. Esta alternativa é comum a outros métodos que visam simular o escoamento a número de Knudsen médio que utilizam as equações de Navier-Stokes-Fourier como base, alterando as condições de contorno para modelar o efeito de escorregamento^[5].

Junk e colaboradores^[49] e Sbragaglia e Succi^[50] propuseram novas análises para obter as equações macroscópicas do gás modelado em diferentes ordens do número de Knudsen.

Junk e colaboradores^[49] realizaram uma expansão assintótica cujo limite macroscópico a baixo número de Knudsen são as equações de Navier-Stokes escritas para um escoamento incompressível. Seu objetivo principal foi avaliar o erro cometido em diferentes escalas quando este tipo de fenômeno é representado.

Sbragaglia e Succi^[50] analisaram os limites dos LBMs a um número de Knudsen muito baixo ou muito alto, chegando à conclusão de que o método deve ser exato nestes casos. Através de uma análise apenas qualitativa, argumentaram que os desvios do LBM em relação ao modelo BGK no contínuo devem ser pequenos a números de Knudsen intermediários entre estes dois limites.

Qian e Zhou^[26] realizaram a análise de Chapman-Enskog utilizando o esquema de colisão e propagação com velocidades discretas de forma a encontrar as equações de balanço a alto número de Knudsen. Neste trabalho eles não reconheceram os termos encontrados pela análise em segunda ordem como erros numéricos verdadeiramente, mas relacionaram estes termos aos possíveis coeficientes de transporte do gás nesta escala. Também não procuraram analisar ou separar os erros numéricos originados na discretização do espaço físico, do tempo e do espaço de velocidades. Os resultados de suas análises foram testados

numericamente em casos simples, com excelentes resultados.

Neste trabalho as correções de alta ordem para as equações macroscópicas nos métodos de lattice Boltzmann foram avaliadas somente em escoamentos bidimensionais isotérmicos ou puramente difusivos. A análise de Chapman-Enskog de alta ordem dos LBMs em escoamentos não-isotérmicos leva basicamente às mesmas conclusões discutidas nesta seção.

Na seção seguinte o modelo de colisão a dois tempos de relaxação (TRT), Seção 3.3, que utiliza o esquema de colisão e propagação para discretização espaço-temporal será submetido a análise de Chapman-Enskog. Quando, no modelo TRT, os dois tempos de relaxação são idênticos, ele se torna equivalente ao modelo BGK.

5.2 Modelo de Colisão a Dois Tempos de Relaxação

O modelo de colisão TRT no contínuo, Equação 3.86, pode ser discretizado no espaço e no tempo através do esquema de colisão e propagação, com cálculo explícito do termo de colisão, ou seja,

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{(f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t))}{\tau_1/\delta t} + \left(\frac{1}{\tau_1/\delta t} - \frac{1}{\tau_2/\delta t} \right) \left(\frac{\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}}{2\rho RT} \right) f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{C}). \quad (5.10)$$

onde $\gamma_1 = -1/\tau_1$ e $\gamma_2 = -1/\tau_2$.

5.2.1 Análise de Chapman-Enskog

Considerando um fenômeno não-isotérmico modelado pela equação de evolução acima, de forma equivalente à utilizada na Seção 3.3, foram expandidos f e a derivada temporal da expansão em séries de Taylor da Equação 5.10 em ordens do número de Knudsen. As duas primeiras ordens desta expansão podem ser igualadas separadamente a zero de forma a que seja obtido

$$\begin{aligned} \partial_0 f^{eq} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{eq} = \\ -f^{(1)} + (1 - \tau_1/\tau_2) \left(\frac{\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}}{2\rho RT} \right) f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}), \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} \partial_1 f^{eq} + \partial_0 f^{(1)} + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(1)} + \frac{\delta t}{2\tau_1} (\partial_0 \partial_0 f^{eq} + 2\xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} \partial_0 f^{eq} + \xi_\alpha^* \xi_\beta^* \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} f^{eq}) = \\ -f^{(2)} + (1 - \tau_1/\tau_2) \left(\frac{\int f^{(2)} \xi_\alpha \xi_\beta d\boldsymbol{\xi}}{2\rho RT} \right) f^{eq} (C_\alpha C_\beta - \delta_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Procedendo a análise de Chapman-Enskog, em ordem zero de Knudsen as equações

de balanço encontradas são idênticas, ver Eqs. 3.90 e 3.91, às equações de balanço no contínuo nesta ordem, Eqs. 3.24, 3.32 e 3.33.

Em ordem primeira de Knudsen, quando a Equação 5.12 é multiplicada por 1, ξ_α e ξ^2 e integrada no espaço de velocidades, verifica-se que o seu lado direito é zero. O lado esquerdo desta equação, que apresenta termos da forma $\int f^{(1)} \xi_\alpha \xi_\gamma d\mathbf{\xi}$ e $\int f^{(1)} \xi^2 \xi_\alpha d\mathbf{\xi}$, pode ser calculado através da Equação 5.11. O resultado desta análise, ver Capítulo 3, são as seguintes equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia,

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0, \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha (\rho RT) = \\ & + \left(\tau_2 - \frac{\delta t}{2} \right) \partial_\beta \left(\rho RT \left(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) \right), \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t \left(\frac{D}{2} \rho RT \right) + \partial_\beta \left(\frac{D}{2} \rho RT u_\beta \right) = \left(\tau_1 - \frac{\delta t}{2} \right) \left(\frac{D+2}{2} \right) \partial_\beta (\rho RT \partial_\beta (RT)) \\ & + \left(\tau_2 - \frac{\delta t}{2} \right) \rho RT (\partial_\alpha u_\beta) \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right) - \rho RT \partial_\beta u_\beta. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Os coeficientes de transporte deste modelo, i.e., a viscosidade dinâmica e a condutividade térmica são iguais a^[4],

$$\mu = \left(\tau_2 - \frac{\delta t}{2} \right) \rho RT, \quad (5.16)$$

$$k = \left(\tau_1 - \frac{\delta t}{2} \right) \left(\frac{D+2}{2} \right) \rho R^2 T, \quad (5.17)$$

e o número de Prandtl é igual a,

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu C_P}{k} = \frac{\left(\tau_2 - \frac{\delta t}{2} \right)}{\left(\tau_1 - \frac{\delta t}{2} \right)}. \quad (5.18)$$

A verificação deste resultado foi realizada na Seção 8.1.1.2.

5.3 Resolvendo a Equação de Lattice Boltzmann

O esquema de colisão e propagação, Equação 5.4, é um método bastante robusto para resolver a equação de transporte de Boltzmann com o objetivo final de recuperar a solução das equações de Navier-Stokes para um dado problema. As origens do bom desempenho do método estão ligadas à forma de sua equação de evolução, cujo termo advectivo é linear e cujo termo não-homogêneo ou termo de colisão é local e explícito, apesar de não-linear.

Todavia, o esquema de colisão-propagação não é a única forma de discretizar a equação de Boltzmann. Sendo uma equação hiperbólica não-homogênea, esta equação poderia ser discretizada utilizando qualquer outro método numérico conhecido^[51]. Apesar da

grande importância do esquema de colisão e propagação, existem diversas razões para que métodos numéricos alternativos sejam estudados.

Em escoamentos a alto número de Knudsen, como foi mostrado na seção anterior, o esquema de colisão e propagação pode apresentar erros da mesma ordem dos termos de alta ordem originais do modelo de colisão, prejudicando seriamente a sua aplicação. Estes erros podem ser, a princípio, eliminados ou diminuídos através do uso de métodos numéricos de discretização de ordem mais alta.

No esquema de colisão e propagação a discretização do espaço físico e do tempo estão acopladas pela discretização do espaço de velocidades. Em outras palavras, o número de Courant (CFL) é sempre igual a um:

$$CFL = \frac{|\xi \delta t|}{\delta x} = \frac{|\xi \delta t|}{|\xi \delta t|} = 1, \quad (5.19)$$

onde δx é a distância entre dois pontos adjacentes do espaço físico. Note que, no esquema de colisão e propagação, esta distância é sempre proporcional à velocidade molecular. Um método alternativo de discretização poderia resultar em um CFL flexível, i.e., o CFL poderia variar de ponto a ponto no domínio do espaço físico e depender da velocidade molecular discreta considerada. Uma aplicação bastante intuitiva de um método deste tipo seria na construção de malhas numéricas adaptativas.

Os LBMs, como são escritos para uma função distribuição f e não para as variáveis macroscópicas massa, velocidade e temperatura, apresentam problemas de indeterminação quando as condições de contorno dependem diretamente destas quantidades ou de suas derivadas, mesmo quando problemas fluidodinâmicos bastante simples são abordados. Neste contexto seria útil utilizar um método numérico flexível que pudesse adaptar seus pontos de solução às fronteiras e/ou considerar a informação de mais pontos do domínio quando uma certa condição de contorno é imposta, para tentar minimizar estes problemas.

Os modelos térmicos e os escoamentos a alto número de Knudsen, como mostrado na Seção 3, demandam que momentos de alta ordem da distribuição de equilíbrio sejam corretamente representados. Quanto maior a ordem do momento da distribuição de equilíbrio que precisa ser representado, maior é o conjunto de velocidades mínimo resultante da discretização do espaço de velocidades. Quando um esquema de colisão e propagação ou qualquer outro esquema que restrinja o conjunto de velocidades a vetores ligando pontos de uma rede regular está sendo utilizado, o número de velocidades discretas é ainda maior já que uma restrição a mais é imposta na discretização do espaço de velocidades, a restrição de que as relações entre as velocidades discretas devem ser inteiras, Capítulo 6.

Um conjunto grande de velocidades discretas pode gerar problemas na aplicação de

condições de contorno mais simples e amplamente utilizadas com os LBMs devido a natureza lagrangiana do algoritmo, e.g., a condição de bounce-back pode não ser aplicável, Capítulo 7. Alguns métodos alternativos aqui mostrados não apresentam este problema, já que a evolução do algoritmo depende apenas da informação dos nós imediatamente mais próximos ao ponto sendo resolvido.

Neste trabalho será considerada a aplicação dos métodos de diferenças finitas na discretização do modelo de colisão BGK, Equação 3.1. Os métodos de diferenças finitas foram utilizados aqui devido a sua simplicidade de aplicação em relação aos métodos de volumes e elementos finitos^[52, 53]. Os objetivos deste trabalho foram: i) avaliar o método de diferenças finitas como uma ferramenta para simular escoamentos não-isotérmicos e/ou a alto número de Knudsen através da equação de transporte de Boltzmann e ii) propor e avaliar condições de contorno adequadas a simulação de escoamentos não-isotérmicos.

5.4 Métodos de Diferenças Finitas

Cao e colaboradores^[35] foram os primeiros a propor métodos de diferenças finitas para resolver a equação de transporte de Boltzmann com um operador de colisão BGK. Apesar deles terem encontrado resultados promissores, os detalhes da implementação dos algoritmos não foi mostrado, especialmente os detalhes sobre as condições de contorno implementadas, os passos de tempo utilizados e a convergência do método.

Sofonea e Sekerka^[37] alguns anos mais tarde propuseram uma série de esquemas baseados nas velocidades características do problema, ξ_i , para discretizar a equação de Boltzmann e analisaram a influência dos erros de discretização nas equações encontradas através da análise de Chapman-Enskog até a primeira ordem do número de Knudsen em condições isotérmicas. O objetivo deles era criar métodos numéricos aplicáveis a escoamentos multifásicos onde a velocidade do som das diferentes fases pudesse ser ajustada livremente dentro de uma grande faixa de variação. Em trabalhos subsequentes^[21] eles efetivamente aplicaram os métodos de diferenças finitas a escoamentos multifásicos, testando também o esquema de limitadores de fluxo^[51] para reduzir o efeitos numéricos não-físicos eventualmente presentes nas simulações. Ambos os artigos discutem limitadamente as condições de contorno utilizadas e, para assegurar a convergência do método, utilizam passos de tempo excessivamente pequenos, criando dúvidas sobre a utilidade destes métodos.

Watari e Tsutahara^[38] propuseram um modelo de múltiplas velocidade para simular escoamentos não isotérmicos. Apesar de seus resultados serem bastante bons, eles não discorrem sobre pontos importantes do método. As condições de contorno utilizadas por

eles não são detalhadas e não é claro, por exemplo, se o esquema utilizado por eles conserva a massa. Os parâmetros utilizados nas simulações não são, algumas vezes, mostrados, e.g., o número de pontos do domínio discreto. Estes parâmetros são muito importantes para avaliar o método numérico que eles empregaram, que é semelhante ao esquema upwind de segunda ordem mostrado na seção abaixo, já que eles podem afetar de maneira importante os erros numéricos do método.

Neste capítulo serão apresentados duas classes diferentes de métodos. Os primeiros métodos tem sua discretização espacial e temporal realizadas de forma desacoplada, gerando um grupo de métodos para aproximar a derivada temporal e a espacial que são mais tarde reunidos para formar a equação de evolução do método como um todo. O objetivo destes métodos, neste trabalho, é resolver a equação de Boltzmann com modelo de colisão BGK para escoamentos não-isotérmicos.

Na segunda classe de métodos as discretizações do espaço e do tempo são realizadas de forma acoplada, semelhante à realizada no esquema de colisão e propagação. Seu propósito é aumentar a ordem do erro na discretização da derivada material em relação ao esquema de colisão e propagação. Estes métodos serão analisados através da expansão de Chapman-Enskog na Seção 5.7 e mais tarde serão empregados na solução de escoamentos a alto número de Knudsen no Capítulo 8.

5.5 Discretizações Desacopladas

5.5.1 Discretização do Tempo

A discretização temporal foi realizada considerando os métodos mostrados abaixo^[54].

Esquema de upwind de primeira ordem,

$$\partial_t f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\delta t} + O[\delta t]. \quad (5.20)$$

Esquema de Runge-Kutta de segunda ordem,

$$\begin{aligned} \partial_t f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau} \\ f\left(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{2} R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \\ f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \delta t R\left(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Esquema de Runge-Kutta de quarta ordem,

$$\begin{aligned}
\partial_t f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau} \\
f_{(1)}\left(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{2} R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \\
f_{(2)}\left(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{2} R\left(f_{(1)}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) \\
f_{(3)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \delta t R\left(f_{(2)}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) \\
f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{6} \left(R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + 2R\left(f_{(1)}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) + \right. \\
&\quad \left. 2R\left(f_{(2)}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) + R(f_{(3)}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) \right). \quad (5.22)
\end{aligned}$$

5.5.2 Discretização Espacial

A derivada espacial é avaliada na direção da velocidade molecular $\boldsymbol{\xi}$, que será discretizada posteriormente, utilizando os seguintes esquemas:

Esquema upwind de primeira ordem,

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f)_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t} = \frac{f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \Delta t)}{\Delta t} + O[\Delta t]. \quad (5.23)$$

Esquema upwind de segunda ordem,

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f)_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t} = \frac{3f(\mathbf{x}) - 4f(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \Delta t) + f(\mathbf{x} - 2\boldsymbol{\xi} \Delta t)}{2\Delta t} + O[\Delta t^2]. \quad (5.24)$$

Esquema upwind de terceira ordem,

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f)_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t} = \frac{2f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \Delta t) + 3f(\mathbf{x}) - 6f(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \Delta t) + f(\mathbf{x} - 2\boldsymbol{\xi} \Delta t)}{6\Delta t} + O[\Delta t^3]. \quad (5.25)$$

Esquema de diferenças centrais de segunda ordem,

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f)_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t} = \frac{f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \Delta t) - f(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \Delta t)}{2\Delta t} + O[\Delta t^2]. \quad (5.26)$$

Esquema de diferenças centrais de quarta ordem,

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f)_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t} = \frac{-f(\mathbf{x} + 2\boldsymbol{\xi} \Delta t) + 8f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \Delta t) - 8f(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \Delta t) + f(\mathbf{x} - 2\boldsymbol{\xi} \Delta t)}{12\Delta t} + O[\Delta t^4]. \quad (5.27)$$

Onde $\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f)_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t}$ representa o produto escalar entre a velocidade molecular e o gradi-

ente de f no ponto $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ e

$$\Delta t = \frac{\delta x}{|\boldsymbol{\xi}|}, \quad (5.28)$$

onde δx é a menor distância entre dois nós da malha na direção da velocidade molecular $\boldsymbol{\xi}$. É importante notar que Δt não é igual ao passo de tempo do método e não necessariamente é igual para cada velocidade discreta $\boldsymbol{\xi}$.

Note também que, no caso do número de Courant, CFL, ser diferente de um e depender da velocidade através de Δt , tem-se

$$CFL = \frac{|\boldsymbol{\xi}\delta t|}{\delta x} = \frac{|\boldsymbol{\xi}\delta t|}{|\boldsymbol{\xi}\Delta t(\boldsymbol{\xi})|} = \frac{\delta t}{\Delta t(\boldsymbol{\xi})}. \quad (5.29)$$

Os métodos numéricos utilizando as discretizações acima são compostos de um esquema de discretização temporal e um esquema de discretização espacial reunidos, e.g., um método que aplicada esquemas de primeira ordem para as derivadas temporal e espacial é

$$\begin{aligned} (\partial_t f + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f)_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t} &= \frac{f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\delta t} + \frac{f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}\Delta t, \boldsymbol{\xi}, t)}{\Delta t} \\ &= \frac{f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau} + O[\Delta t, \delta t] \end{aligned} \quad (5.30)$$

5.6 Discretização da Derivada Material

O esquema de colisão e propagação pode ser visto como uma aproximação upwind para a derivada material de f , i.e., $\partial_t f + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f$, ao longo da velocidade característica $\boldsymbol{\xi}$. Neste trabalho os métodos de Runge-Kutta^[54] descritos abaixo foram aplicados seguindo a mesma velocidade característica. As principais desvantagens deste método são o seu custo computacional bastante alto e a dificuldade em aplicar as condições de contorno.

Esquema de Runge-Kutta de segunda ordem,

$$\begin{aligned} \frac{Df(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{Dt} &= R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau} \\ f\left(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{2}R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \\ f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \delta t R\left(f, \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Esquema de Runge-Kutta de quarta ordem,

$$\begin{aligned}
\frac{Df(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{Dt} &= R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau} \\
f_{(1)}\left(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{2}R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \\
f_{(2)}\left(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{2}R\left(f_{(1)}, \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) \\
f_{(3)}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \delta t R\left(f_{(2)}, \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) \\
f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) &= f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{6}\left(R(f, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + 2R\left(f_{(1)}, \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) + \right. \\
&\quad \left. 2R\left(f_{(2)}, \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) + R(f_{(3)}, \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t)\right). \tag{5.32}
\end{aligned}$$

5.7 Análise de Chapman-Enskog

5.7.1 Discretizações Desacopladas do Espaço e do Tempo

Tomando a Equação 5.30 e expandindo cada termo em séries de Taylor ao redor do ponto $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ chega-se a

$$\begin{aligned}
\partial_t f + \xi_\alpha \partial_\alpha f &= \frac{f^{eq} - f}{\tau} + \\
\frac{\delta t}{2} \partial_t \partial_t f + \frac{\delta t^2}{6} \partial_t \partial_t \partial_t f + \frac{\Delta t}{2} \xi_\alpha \xi_\beta \partial_\alpha \partial_\beta f + \frac{\Delta t^2}{6} \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma \partial_\alpha \partial_\beta \partial_\gamma f + O[\delta t^3, \Delta t^3] \tag{5.33}
\end{aligned}$$

Na expansão de Chapman-Enskog mostrada na Seção 5.1.3, os erros numéricos do método foram incluídos na análise de maneira a prever os seus efeitos nas correções em diversas ordens do número de Knudsen. Isto podia ser realizado porque o parâmetro δt que multiplicava os erros é constante para cada velocidade molecular ξ , permitindo a integração dos erros ou, no espaço discreto, a quadratura dos erros no espaço de velocidades. Neste caso, todavia, os parâmetros que multiplicam os erros em relação à derivada espacial são proporcionais a potências de Δt que, como foi visto na Seção 5.5.2, depende de cada velocidade molecular. Desta forma, o efeito numérico nas equações macroscópicas não pode ser previsto neste caso através da análise de Chapman-Enskog.

Apesar desta ser uma importante desvantagem destes métodos, e.g., no esquema de colisão e propagação o erro nos coeficientes de transporte na primeira ordem de Knudsen é da mesma ordem de magnitude dos coeficientes de transporte obtidos, tornando a aplicação deste método muitíssimo limitada se estes erros não pudessem ser previstos, esta desvantagem não impede a sua aplicação, já que se conhecem as equações que este

modelo deve seguir no caso contínuo, que foram derivadas no Capítulo 2. O erro causado pela adoção destas equações como representativas dos métodos numéricos acima será analisado na Seção 8.1.2.3 através de simulações numéricas e comparação com a análise de Chapman-Enskog no espaço contínuo.

5.7.2 Runge-Kutta de Ordem δt^2

De maneira a realizar a análise de Chapman-Enskog deste método, Eqs. 5.34 e 5.35, a distribuição de equilíbrio na sua segunda etapa, $f^{eq}(\mathbf{x}', \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2})$, deve ser escrita em termos da densidade, velocidade e temperatura do gás modelado no tempo $t + \frac{\delta t}{2}$. Estas variáveis são funções da distribuição $f(\mathbf{x}', \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2})$, calculada na primeira etapa do método. Isto pode ser feito facilmente, devido às não linearidades da distribuição de equilíbrio em relação à função distribuição, somente quando a relação entre a distribuição de equilíbrio e a função distribuição é muito simples, e.g., esta relação é linear quando o caso de um fenômeno puramente difusivo, Seções 3.2.1.1 e 3.2.2.1, é considerado.

Nesta seção a análise de Chapman-Enskog do esquema de Runge-Kutta de segunda ordem para a derivada material será realizada para um gás onde a massa é conservada microscopicamente, mas a velocidade é tomada como igual a zero e a temperatura constante na distribuição de equilíbrio. Considerando a forma explícita do esquema de Runge-Kutta de segunda ordem,

$$f\left(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta t}{2} \left(\frac{f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau} \right), \quad (5.34)$$

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \delta t \left(\frac{f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}) - f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2})}{\tau} \right) \quad (5.35)$$

onde

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = n(\mathbf{x}, t) \frac{\exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi}}{2RT}\right)}{(2\pi RT)^{D/2}}, \quad (5.36)$$

e

$$n(\mathbf{x}, t) = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}', t) d\boldsymbol{\xi}' = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}', t) d\boldsymbol{\xi}'. \quad (5.37)$$

Utilizando as duas relações acima, a distribuição de equilíbrio no tempo $t + \frac{\delta t}{2}$ pode ser escrita como

$$f^{eq}\left(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2}\right) = \left(\int f\left(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}', t + \frac{\delta t}{2}\right) d\boldsymbol{\xi}' \right) \frac{\exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi}}{2RT}\right)}{(2\pi RT)^{D/2}}. \quad (5.38)$$

Substituindo a primeira etapa do algoritmo de Runge-Kutta, Equação 5.34, na equação acima e expandindo cada termo do integrando em séries de Taylor em torno do ponto

$(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}', t),$

$$f^{eq} \left(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \frac{\delta t}{2}, \boldsymbol{\xi}, t + \frac{\delta t}{2} \right) = \left(\int \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta t^n}{2^n n!} (\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')^n : \boldsymbol{\nabla}^n f + \right. \right. \quad (5.39)$$

$$\left. \left. \frac{\delta t}{2\tau} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta t^n}{2^n n!} (\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')^n : \boldsymbol{\nabla}^n (f^{eq} - f) \right) \right) d\boldsymbol{\xi}' \right) \frac{\exp \left(-\frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}}{2RT} \right)}{(2\pi RT)^{D/2}},$$

onde $\boldsymbol{\xi} : \boldsymbol{\nabla}$ é igual a $\xi_\alpha \partial_\alpha$, $(\boldsymbol{\xi})^2 : \boldsymbol{\nabla}^2$ é igual a $\xi_\alpha \xi_\beta \partial_\alpha \partial_\beta$ e assim por diante.

Tomando a segunda etapa do algoritmo de Runge-Kutta, Equação 5.35, substituindo a Equação 5.39 e a primeira parte do algoritmo nela e expandindo o termo esquerdo da equação resultante em séries de Taylor em torno do ponto $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, obtém-se

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tau \delta t^{n-1}}{n!} \frac{D^n f}{Dt^n} = \left(\int \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta t^n}{2^n n!} (\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')^n : \boldsymbol{\nabla}^n f \right. \right. \quad (5.40)$$

$$\left. \left. + \frac{\delta t}{2\tau} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta t^n}{2^n n!} (\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')^n : \boldsymbol{\nabla}^n (f^{eq} - f) \right) \right) d\boldsymbol{\xi}' \right) \frac{\exp \left(-\frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}}{2RT} \right)}{(2\pi RT)^{D/2}} - f - \frac{\delta t}{2} \left(\frac{f^{eq} - f}{\tau} \right).$$

Que é a equação característica do método no tempo t , no ponto $\mathbf{x}$. Adimensionalizando a equação acima da maneira usual, Seção 3.1.1, obtém-se

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\delta t}{\tau} \right)^{n-1} \frac{Kn^n}{n!} \frac{D^n f}{Dt^{*n}} = \left(\int \left(\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\delta t}{\tau} \right)^n \frac{Kn^n}{2^n n!} (\boldsymbol{\xi}^* - \boldsymbol{\xi}')^n : \boldsymbol{\nabla}^{*n} f \right. \right. \quad (5.41)$$

$$\left. \left. + \frac{\delta t}{2\tau} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\delta t}{\tau} \right)^n \frac{Kn^n}{2^n n!} (\boldsymbol{\xi}^* - \boldsymbol{\xi}')^n : \boldsymbol{\nabla}^{*n} (f^{eq} - f) \right) \right) d\boldsymbol{\xi}' \right) \frac{\exp \left(-\frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}}{2RT} \right)}{(2\pi RT)^{D/2}}$$

$$+ f^{eq} - f - \frac{\delta t}{2} \left(\frac{f^{eq} - f}{\tau} \right).$$

Ao expandir f e a derivada temporal adimensionalizada ∂_t^* em potências do número de Knudsen e separar os termos de acordo com a ordem da potência do número de Knudsen resultante, Seção 3.1.1, obtém-se na ordem zero a seguinte expressão,

$$\partial_0 f^{eq} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) \boldsymbol{\xi}^* \cdot \boldsymbol{\nabla}^* f^{eq} = f^{(1)} \left(\frac{\delta t}{2\tau} - 1 \right), \quad (5.42)$$

e na ordem primeira de Knudsen a seguinte,

$$\left(\frac{\delta t}{\tau} \right) \frac{1}{2!} (\partial_0 + \boldsymbol{\xi}^* \cdot \boldsymbol{\nabla}^*) (\partial_0 + \boldsymbol{\xi}^* \cdot \boldsymbol{\nabla}^*) f^{eq} + (\partial_0 + \boldsymbol{\xi}^* \cdot \boldsymbol{\nabla}^*) f^{(1)} + \partial_1 f^{eq} = \quad (5.43)$$

$$\left(\int \left(\left(\frac{\delta t}{\tau} \right)^2 \frac{1}{2^2 2!} (\boldsymbol{\xi}^* - \boldsymbol{\xi}') (\boldsymbol{\xi}^* - \boldsymbol{\xi}') : \boldsymbol{\nabla}^* \boldsymbol{\nabla}^* f^{eq} + \left(\frac{\delta t}{\tau} \right) \frac{1}{2} (\boldsymbol{\xi}^* - \boldsymbol{\xi}') \cdot \boldsymbol{\nabla}^* f^{(1)} \right. \right.$$

$$\left. \left. + \left(\frac{\delta t}{2\tau} \right) \left(\frac{\delta t}{\tau} \right) \frac{1}{2} (\boldsymbol{\xi}^* - \boldsymbol{\xi}') \cdot \boldsymbol{\nabla}^* (-f^{(1)}) \right) d\boldsymbol{\xi}' \right) \frac{\exp \left(-\frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}}{2RT} \right)}{(2\pi RT)^{D/2}} + f^{(2)} \left(\frac{\delta t}{2\tau} - 1 \right).$$

Como pode ser observado através da inspeção das equações acima, a complexidade da análise de Chapman-Enskog cresce muito rapidamente quando altas ordens do número de Knudsen são consideradas nos métodos de Runge-Kutta. Neste trabalho esta análise só pôde ser realizada quando um sistema algébrico computacional (o software Mathematica®) foi utilizado e, mesmo assim, somente quando a distribuição de equilíbrio dependia linearmente da função distribuição.

Na Tabela 9, as equações obtidas pela análise estão resumidas para o caso unidimensional. O caso bidimensional foi testado posteriormente admitindo que os coeficientes de transporte eram os mesmos e que a derivada de segunda ordem $\partial_x \partial_x$ poderia ser substituída pelo Laplaciano ∇^2 . Os resultados numéricos encontrados em uma e duas dimensões confirmaram a forma dos coeficientes de transporte obtida pela análise, Seção 8.1.

Note na tabela abaixo que os erros numéricos nos coeficientes de transporte em relação ao modelo contínuo, Tabela 1, em diferentes ordens do número de Knudsen são de segunda ordem em relação ao tempo e são sempre positivos, i.e., a difusividade numérica é sempre positiva neste método.

Equação de Balanço de Massa	
Kn^0	$\partial_t \rho = 0$
Kn^1 and Kn^2	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho$
Kn^3 and Kn^4	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 \frac{\left(1 - \frac{\delta t}{\tau} + \frac{3\delta t^2}{4\tau^2} - \frac{\delta t^3}{8\tau^3}\right)}{\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right)^2} RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho$ $\approx \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho \left(1 + \frac{\delta t^2}{2\tau^2} + \frac{3\delta t^3}{8\tau^3} + \frac{\delta t^4}{4\tau^4} + \frac{5\delta t^5}{32\tau^5} + \dots\right)$
Kn^5 and Kn^6	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 \frac{\left(1 - \frac{\delta t}{\tau} + \frac{3\delta t^2}{4\tau^2} - \frac{\delta t^3}{8\tau^3}\right)}{\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right)^2} RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho$ $+ 4\tau^5 \frac{\left(1 - \frac{2\delta t}{\tau} + \frac{7\delta t^2}{3\tau^2} - \frac{151\delta t^3}{96\tau^3} + \frac{143\delta t^4}{192\tau^4} - \frac{13\delta t^5}{64\tau^5} + \dots\right)}{\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right)^4} RT^3 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho$ $\approx \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho \left(1 + \frac{\delta t^2}{2\tau^2} + \frac{3\delta t^3}{8\tau^3} + \frac{\delta t^4}{4\tau^4} + \frac{5\delta t^5}{32\tau^5} + \dots\right)$ $+ 4\tau^5 RT^3 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho \left(1 + \frac{5\delta t^2}{6\tau^2} + \frac{19\delta t^3}{32\tau^3} + \frac{119\delta t^4}{192\tau^4} + \frac{9\delta t^5}{16\tau^5} + \dots\right)$

Tabela 9: Resultados da análise de Chapman-Enskog do esquema de Runge-Kutta de ordem δt^2 , considerando um fenômeno puramente difusivo.

5.7.3 Runge-Kutta de Ordem δt^4

A análise de Chapman-Enskog deste método segue a mesma linha da análise da seção anterior, i.e., o último passo do método é escrito em uma função dos passos anteriores, sendo a distribuição de equilíbrio f^{eq} , que depende somente da densidade, e as funções distribuição $f_{(1)}$, $f_{(2)}$ e $f_{(3)}$ escritas em termos da função distribuição f . Os resultados finais da análise são mostrados na Tabela 10 em uma dimensão. Estes resultados podem ser generalizados para mais de uma dimensão se as derivadas espaciais de segunda ordem $\partial_x \partial_x$ forem substituídas pelo Laplaciano ∇^2 .

Os coeficientes de transporte aparentes obtidos pela análise são sempre maiores do que os coeficientes de transporte do contínuo, Tabela 1, como acontecia com o método de Runge-Kutta de ordem δt^2 . Neste método, todavia, os erros são de quarta ordem em relação a δt , conforme o esperado. Todos os resultados mostrados aqui foram testados numericamente na Seção 8.1.

Equação de Balanço de Massa	
Kn^0	$\partial_t \rho = 0$
Kn^1 and Kn^2	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho$
Kn^3 and Kn^4	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 \frac{\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{6\tau^2} - \frac{\delta t^3}{24\tau^3} + \frac{\delta t^4}{48\tau^4} - \frac{\delta t^5}{192\tau^5} + \frac{\delta t^6}{1152\tau^6}\right)}{\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{6\tau^2} - \frac{\delta t^3}{24\tau^3}\right)} RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho$ $\approx \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho \left(1 + \frac{\delta t^4}{48\tau^4} + \frac{\delta t^5}{192\tau^5} + \frac{\delta t^8}{4608\tau^8} + \dots\right)$
Kn^5 and Kn^6	$\partial_t \rho = \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 \frac{\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{6\tau^2} - \frac{\delta t^3}{24\tau^3} + \frac{\delta t^4}{48\tau^4} - \frac{\delta t^5}{192\tau^5} + \frac{\delta t^6}{1152\tau^6}\right)}{\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{6\tau^2} - \frac{\delta t^3}{24\tau^3}\right)} RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho$ $+ 4\tau^5 \frac{\left(1 - \frac{3\delta t}{2\tau} + \frac{5\delta t^2}{4\tau^2} - \frac{3\delta t^3}{4\tau^3} + \frac{71\delta t^4}{192\tau^4} - \frac{109\delta t^5}{768\tau^5} + \dots\right)}{\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{6\tau^2} - \frac{\delta t^3}{24\tau^3}\right)^3} RT^3 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho$ $\approx \tau RT \partial_x \partial_x \rho + \tau^3 RT^2 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho \left(1 + \frac{\delta t^4}{48\tau^4} + \frac{\delta t^5}{192\tau^5} + \frac{\delta t^8}{4608\tau^8} + \dots\right)$ $+ 4\tau^5 RT^3 \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \partial_x \rho \left(1 + \frac{7\delta t^4}{192\tau^4} + \frac{7\delta t^5}{256\tau^5} + \frac{13\delta t^6}{1152\tau^6} + \frac{19\delta t^7}{9216\tau^7} + \dots\right)$

Tabela 10: Resultados da análise de Chapman-Enskog do esquema de Runge-Kutta de ordem δt^4 , considerando um fenômeno puramente difusivo.

6 *Discretização do Espaço de Velocidades*

Nos últimos capítulos os modelos de colisão e os métodos de lattice Boltzmann foram derivados assumindo que o espaço de velocidades era contínuo. Isto foi realizado de forma a simplificar a discussão sobre a física dos modelos de colisão derivados e separar os erros numéricos causados pela discretização do espaço físico dos erros numéricos causados pela discretização do espaço de velocidades.

Quando métodos mesoscópicos como os aqui mencionados são utilizados, todavia, a discretização do espaço de velocidades precisa ser realizada de alguma maneira. De maneira a proceder com esta discretização é importante i) entender como um espaço discreto de velocidades pode influenciar a obtenção dos modelos de colisão e dos LBMs e ii) estabelecer uma condição de acurácia em relação a esta discretização, de forma que modelos progressivamente mais exatos possam ser obtidos sistematicamente.

Uma análise cuidadosa dos modelos de colisão derivados neste trabalho, Capítulo 2, mostra que estes modelos dependem somente dos momentos da função distribuição f e da distribuição de equilíbrio f^{eq} em relação às crescentes ordens da velocidade molecular ξ . A derivada material de f no espaço físico, por sua vez, é determinada uma vez que uma velocidade molecular qualquer é fixada. Desta forma, se os momentos de f e f^{eq} em um espaço discreto de velocidades, determinados através da quadratura de f e f^{eq} multiplicados por ordens crescentes da velocidade molecular ξ , forem iguais a estes momentos no espaço contínuo de velocidades, o modelo discreto de Boltzmann será idêntico ao modelo contínuo.

Todavia, a representação de todos os momentos das funções distribuição no espaço discreto de velocidades não é possível, já que isto demandaria o emprego de um número infinito de velocidades moleculares. Para que a ordem dos momentos que devem ser representados fielmente no espaço discreto de velocidades diminua, tornando viável a resolução do problema de quadratura, é preciso que um limite em relação às ordens dos momentos representados seja estabelecido sistematicamente.

A análise de Chapman-Enskog é utilizada para determinar este limite^[1, 2]. A expansão de Chapman-Enskog resulta em uma hierarquia de equações para cada ordem do número de Knudsen, onde cada uma delas relaciona a correção de ordem n da função distribuição às ordens até $(n-1)$ dos operadores temporais e da derivada espacial aplicados até a ordem $(n-1)$ da correção para a função distribuição. Neste procedimento o termo de ordem zero na expansão de f em ordens do número de Knudsen é a distribuição de equilíbrio. As correções subsequentes para f podem ser escritas recursivamente em termos das menores ordens até que cada correção para f é escrita em termos de operadores temporais e derivadas espaciais aplicados à distribuição de equilíbrio, reduzindo a quadratura de f à quadratura destes operadores aplicados à distribuição de equilíbrio.

Shan e colaboradores^[1] mostraram que, considerando o modelo de colisão BGK, estes operadores contêm até a ordem n da velocidade molecular ξ multiplicando a distribuição de equilíbrio em uma expansão de ordem n em relação ao número de Knudsen. Uma análise similiar aplicada ao modelo TRT, Seção 2.2.3, mostra que a expansão de ordem n do número de Knudsen contêm até a potência $(n+1)$ da velocidade molecular multiplicando a distribuição de equilíbrio f^{eq} .^[28]

Além disso, nas Secs. 3.1.2 e 3.3 foi demonstrado que, na obtenção da equação de balanço de massa, quantidade de movimento e energia, cada equação na hierarquia mencionada acima precisa ser multiplicada por 1, ξ and ξ^2 antes de ser integrada no espaço de velocidades. Desta maneira, se um dado algoritmo é projetado para simular o comportamento de um fluido até a ordem n do número de Knudsen, a quadratura dos momentos da distribuição de equilíbrio precisa ser exata no espaço discreto até a potência de ordem $(m+p)$, onde m está relacionado a análise de escala (é igual a n para o modelo de colisão BGK) e p está relacionado às equações de balanço que um fluido deve obedecer, sendo igual a zero, um e dois nos balanços de massa, quantidade de movimento e energia respectivamente.

No Capítulo 5 foram derivadas discretizações espaciais e temporais. Uma análise dos métodos derivados mostra que alguns deles são dependentes da discretização do espaço de velocidades, já que eles foram discretizados ao longo da velocidade característica da derivada material na equação de transporte de Boltzmann, i.e., a velocidade molecular no espaço de fases.

Por exemplo, as discretizações da derivada espacial mostradas na Seção 5.5.2 serão consideradas aqui. Nestes métodos a derivada espacial da função no ponto $\mathbf{x}$ é avaliada utilizando os valores desta função nos pontos $\mathbf{x} + 2\xi\Delta t$, $\mathbf{x} + \xi\Delta t$, $\mathbf{x}$, $\mathbf{x} - \xi\Delta t$ e $\mathbf{x} - 2\xi\Delta t$. Esquecendo a discussão sobre as condições de contorno do método por enquanto, se $\mathbf{x}$ é um ponto do espaço físico, todos os pontos $\mathbf{x} + 2\xi\Delta t$, $\mathbf{x} + \xi\Delta t$, $\mathbf{x}$, $\mathbf{x} - \xi\Delta t$ e $\mathbf{x} - 2\xi\Delta t$

também devem ser pontos do espaço discreto ou algum tipo de esquema de interpolação deve ser aplicado para avaliar a derivada espacial.

Note que o parâmetro Δt , que não deve ser confundido com o passo de tempo do método, δt , Seção 5.5.2, pode ser diferente para cada velocidade discreta ξ nos métodos de diferenças finitas considerados. De um ponto de vista prático, como será mostrado no final deste capítulo, as redes obtidas para serem utilizadas por estes métodos têm alguma flexibilidade na escolha das razões entre os módulos das velocidades discretas utilizadas, sendo conhecidas como redes não space-filling.

Podem ser criados ainda esquemas numéricos cuja derivada espacial é estimada utilizando pontos em direções não coincidentes com às velocidades moleculares discretas. Estas redes não space-filling, devido a grande liberdade de escolha dos módulos e direções das velocidades discretas que a compõe, podem representar momentos de alta ordem com um número bastante reduzido de velocidades mas, por serem bastante complicadas de implementar numericamente, foram estudadas apenas teoricamente.

Em alguns métodos, todavia, o parâmetro Δt deve ser constante e numericamente igual a δt , e.g., Equação 5.4. Neste caso, se $\mathbf{x}$ é um ponto do espaço físico discreto longe do contorno, cada um dos pontos $\mathbf{x} + \xi_i \delta t$ e $\mathbf{x} + (\xi_i + \xi_j) \delta t$, onde i e j são índices para cada uma das velocidades moleculares discretas, que são acessíveis a partir de $\mathbf{x}$ em um e dois passos de tempo respectivamente devem ser também pontos do espaço físico discreto. Esta restrição limita as redes utilizadas por estes métodos a redes regulares, chamadas de space-filling.

Neste capítulo será mostrado como distribuições de equilíbrio discretas e redes space-filling ou não space-filling podem ser obtidas considerando todos os aspectos descritos acima, utilizando a quadratura com abscissas prescritas^[2]. Ao final do capítulo será discutida a forma dos erros numéricos esperados quando redes de baixa ordem são utilizadas para simular escoamentos que demandam redes de alta ordem.

6.1 Determinação da Distribuição de Equilíbrio em um Espaço Discreto

A discretização do espaço de velocidades é realizada de forma que todos os momentos da distribuição de equilíbrio do contínuo até determinada ordem sejam corretamente representados no espaço discretizado pela quadratura da distribuição de equilíbrio escrita neste espaço. É desejável e esperado que esta distribuição seja construída de maneira que quando o número de velocidades discretas crescer ou quando a ordem até a qual os mo-

mentos de f^{eq} são representados no espaço discreto aumentar, a distribuição de equilíbrio discreta se aproxime cada vez mais da distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann do contínuo.

Nos modelos de lattice gas, a etapa de colisão era realizada de maneira empírica considerando uma rede dada a priori, Seção 4.3. Esta rede era determinada pela imposição, em modelos isotérmicos, de isotropia de quarta ordem dos tensores formados pela multiplicação dos vetores da rede, assegurando desta forma que o termo viscoso da equação de Navier-Stokes era corretamente recuperado mais tarde, quando a análise de Chapman-Enskog do modelo era realizada^[29].

Chen e colaboradores^[46] e Qian e colaboradores^[25], já no âmbito dos LBMs, expandiram a distribuição de equilíbrio em uma série de potências da velocidade macroscópica do fluido, determinando os coeficientes da expansão a posteriori através da expansão de Chapman-Enskog, de forma que as equações de Navier-Stokes fossem corretamente recuperadas em primeira ordem do número de Knudsen. Esta formulação, muito adequada para o caso isotérmico, falhou em prover modelos adequados para escoamentos não isotérmicos e acabou por criar o mito de que os métodos de lattice Boltzmann não seriam adequados para descrever escoamentos não isotérmicos ou a alto número de Knudsen.

Mais tarde, He e Luo^[36] e Abe^[39], procurando por uma conexão teórica mais consistente entre a equação de transporte de Boltzmann e os métodos de lattice Boltzmann, reconheceram que a f^{eq} discreta era uma expansão de baixa velocidade da distribuição de equilíbrio do contínuo e, realizando a discretização do espaço de velocidades através da comparação da quadratura de Gauss-Hermite dos momentos de f^{eq} no espaço discreto e da integração de f^{eq} no espaço contínuo, chegaram a conjuntos de velocidades discretas bastante conhecidos na comunidade de lattice Boltzmann. Apesar da formulação empregada por eles ser sistemática, novos modelos, que permitissem a simulação de escoamentos não isotérmicos e/ou a alto número de Knudsen, não foram obtidos através desta análise.

Shan e He^[40] melhoraram a descrição da distribuição de equilíbrio através da sua expansão em polinômios de Hermite, relacionando os métodos de lattice Boltzmann ao sistema de treze momentos de Grad^[23]. Shan e colaboradores^[1], alguns anos depois, estenderam este trabalho, determinando condições suficientes para o método de lattice Boltzmann descrever um certo escoamento em diversas ordens do número de Knudsen.

Philippi e colaboradores^[2], em paralelo ao trabalho de Shan e colaboradores^[1], encontraram as menores redes space-filling que poderiam representar momentos crescentes da distribuição de equilíbrio no espaço discreto através de uma quadratura de abscissas prescritas. Estas redes foram testadas numericamente mais tarde^[18, 55, 56], provando ser

muito estáveis em uma ampla faixa de parâmetros^[28]. Neste capítulo a discretização do espaço de velocidades realizada por eles será apresentada com detalhes.

Uma outra corrente de pesquisadores^[13] partiu do princípio que a distribuição de equilíbrio discreta deveria ser aquela que fosse um mínimo da função H no espaço de fases discreto quando a densidade, velocidade e temperatura do gás são fixados. Neste caso a f^{eq} no espaço contínuo e a f^{eq} no espaço discreto precisam ter alguma correlação somente no limite em que o número de pontos discretos do espaço de fases tende ao infinito. Não obstante, as redes e as distribuições de equilíbrio obtidas através deste método têm apresentado uma semelhança cada vez maior com as redes obtidas através do método das abscissas prescritas, e.g., Chikatamarla e Karlin^[57], indicando que a quadratura com abscissas prescritas poderia ser utilizada para representar a função H .

6.2 Métodos de Boltzmann para Escoamentos Não-Isotérmicos

Desde que os LBMs se mostram uma boa ferramenta para a simulação de escoamentos isotérmicos houveram tentativas de estender estes métodos a escoamentos não isotérmicos. Estas tentativas, a princípio, consistiam em estender a expansão da distribuição de equilíbrio a uma ou mais ordens adicionais e fazer os coeficientes da expansão dependentes também da temperatura^[38, 58–60].

Alexander e colaboradores^[58] expandiram a distribuição de equilíbrio até a terceira ordem em relação à velocidade macroscópica do gás considerado. Os coeficientes desta expansão foram determinados a posteriori de forma que as equações macroscópicas obtidas correspondessem às equações de Navier-Stokes-Fourier escritas para um escoamento não isotérmico. Os resultados numéricos apresentados por este método foram apenas razoáveis, os parâmetros e condições de contorno utilizados nas simulações realizadas por eles foram discutidos com poucos detalhes e o intervalo em que o método é estável não ficou claro.

Chen e colaboradores^[59] expandiram a distribuição de equilíbrio até a quarta ordem em relação à velocidade macroscópica do gás considerado, com coeficientes novamente determinados a posteriori através da análise de Chapman-Enskog. Foram consideradas, neste trabalho, redes de várias velocidades para a descrição dos momentos de alta ordem da distribuição de equilíbrio. Testes com este modelo revelaram uma grande dificuldade em estabelecer parâmetros computacionais de modo que as simulações convergissem.

Pavlo e colaboradores^[60] reconheceram que redes com um maior número de veloci-

dades eram necessárias para simular escoamentos não isotérmicos, mas confundiram a necessidade de recuperar momentos de alta ordem com a necessidade de impor a isotropia dos tensores formados pela multiplicação dos vetores da rede até alta ordem. Esta confusão resulta do fato de que a recuperação de momentos de alta ordem de f^{eq} leva à condição de isotropia da rede, mas o contrário não acontece. Os resultados numéricos apresentados por eles apresentam pequena faixa de estabilidade, resultante possivelmente do fato de que a interpolação que eles precisam realizar para adequar a rede, dependente da temperatura, ao espaço físico discreto cria grupos de distribuições negativas invariavelmente.

Watari e Tsutahara^[38] reconheceram que tensores polinomiais de até quarta ordem precisavam ser representados no espaço discreto para que o conjunto completo das equações de Navier-Stokes-Fourier seja corretamente recuperado em primeira ordem de Knudsen. Para determinar os conjuntos de velocidades discretas adequadas para resolver o problema de quadratura eles realizam a expansão de f^{eq} em ordens da velocidade molecular com coeficientes dependentes da temperatura, consideraram uma rede com múltiplas velocidades e, depois de encontrar pesos adequados à quadratura, utilizaram um parâmetro livre resultante da derivação para aumentar a estabilidade do algoritmo.

As redes encontradas por eles, excessivamente grandes, i.e., 29 e 77 velocidades discretas são utilizadas para representar momentos de até quarta ordem de forma incompleta em duas e três dimensões, não foram obtidas de forma sistemática. As condições de contorno utilizadas por eles e os efeitos numéricos provavelmente presentes no algoritmo, que mescla um esquema de Euler na discretização temporal e um algoritmo upwind de segunda ordem na discretização espacial, não são mencionados neste artigo ou em outros subsequentes.

Paralelamente a esta abordagem, uma série de pesquisadores optou por desenvolver métodos que resolvessem a equação da energia de forma independente da resolução da equação de Boltzmann, frequentemente modificando as distribuições de moléculas encontradas pela inclusão de termos-fonte dependentes da resolução da equação da energia, determinados a posteriori via análise de Chapman-Enskog^[27, 61]. Este método, apesar de apresentar excelentes resultados e de ter se tornado popular através do software PowerFLOW®, duplica a informação que já faz parte da função distribuição e deveria ser consequência direta do modelo de colisão empregado.

A partir dos trabalhos de Shan e colaboradores^[1, 40] e Philippi e colaboradores^[2], uma série de novas distribuições de equilíbrio no espaço discreto e redes foram obtidas através da expansão da distribuição de equilíbrio do espaço contínuo em polinômios de Hermite, com posterior quadratura dos momentos de ordem crescente. Estes métodos provaram

ser superiores aos existentes em termos de estabilidade^[28], além de manterem a conexão com a f^{eq} do contínuo, desejável por diversas razões já discutidas no Capítulo 5.

6.3 Quadratura da Distribuição de Equilíbrio com Abscissas Prescritas

Uma condição necessária para que os métodos discretos de Boltzmann sejam representativos da equação de transporte de Boltzmann no contínuo com um certo operador de colisão até uma determinada ordem do número de Knudsen é que as integrais da distribuição de equilíbrio sejam calculadas de forma exata pela seguinte quadratura

$$\int f^{eq} \psi(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = \sum_i w_i f_i^{eq} \psi(\boldsymbol{\xi}_i), \quad (6.1)$$

para todos os momentos de interesse, $\psi(\boldsymbol{\xi})$, Seção 3.1.2. Na equação acima w_i é um peso relacionado a velocidade discreta $\boldsymbol{\xi}_i$.

De maneira a proceder com esta derivação é útil adimensionalizar o espaço de fases. Como a f^{eq} tem unidade de número de moléculas por unidade de velocidade e volume, dois números característicos são necessários. Considerando uma dimensão do espaço físico característica L e uma velocidade molecular característica $\sqrt{RT_0}$, onde T_0 é uma temperatura característica, a distribuição de equilíbrio, Equação 2.31, pode ser escrita como

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{f^{eq*}\left(\frac{\mathbf{x}}{L}, \frac{\boldsymbol{\xi}}{\sqrt{RT_0}}, \frac{t\sqrt{RT_0}}{L}\right)}{L^D RT_0^{D/2}} = \frac{n(\mathbf{x}, t)}{(2\pi RT(\mathbf{x}, t))^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2RT(\mathbf{x}, t)}\right) \quad (6.2)$$

onde f^{eq*} é uma distribuição de equilíbrio adimensionalizada que pode ser escrita como

$$f^{eq*}(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\xi}_0, t_0) = \frac{n^*(\mathbf{x}_0, t_0)}{(2\pi(\theta(\mathbf{x}_0, t_0) + 1))^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi}_0 - \mathbf{u}_0(\mathbf{x}_0, t_0))^2}{2(\theta(\mathbf{x}_0, t_0) + 1)}\right), \quad (6.3)$$

onde as variáveis $\mathbf{x}$, $\boldsymbol{\xi}$, t , $n(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ e $T(\mathbf{x}, t)$ foram substituídas pelas expressões $L\mathbf{x}_0$, $\sqrt{RT_0}\boldsymbol{\xi}_0$, $\frac{t_0 L}{\sqrt{RT_0}}$, $\frac{n^*(\mathbf{x}_0, t_0)}{L^D}$, $\sqrt{RT_0}\mathbf{u}_0(\mathbf{x}_0, t_0)$ e $(\theta(\mathbf{x}_0, t_0) + 1)T_0$, respectivamente.

A distribuição acima, f^{eq*} , pode ser expandida em polinômios de Hermite como segue

$$f^{eq*}(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\xi}_0, t_0) = \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{(2\pi)^{D/2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{eq, \alpha\beta\gamma\dots}^{*(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) \mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_0), \quad (6.4)$$

onde o peso $e^{-\xi_0^2/2}$ foi incluído para fazer a derivação mais simples e $a_{eq, \alpha\beta\gamma\dots}^{*(n)}$ é dado por, Apêndice A,

$$a_{eq, \alpha\beta\gamma\dots}^{*(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) = \int f^{eq*}(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\xi}_0, t_0) \mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_0) d\boldsymbol{\xi}_0. \quad (6.5)$$

A base de polinômios de Hermite foi escolhida por uma série de razões: i) a expansão

em séries de Taylor de f^{eq} com centro em uma velocidade macroscópica igual a zero e em uma temperatura de referência T_0 dá origem aos polinômios tensoriais de Hermite multiplicados por coeficientes iguais aos momentos de f^{eq} , Equação 6.5, ii) o truncamento de termos de alta ordem na expansão em polinômios de Hermite não altera o valor dos momentos de baixa ordem de f^{eq} , iii) na Teoria Cinética dos Gases os polinômios de Hermite foram explorados extensivamente, e.g., por Grad^[23], que relacionou os primeiros treze primeiros momentos da equação de transporte de Boltzmann a equações diferenciais parciais, o sistema de treze momentos de Grad.

Em resumo, quando a Equação 6.1 é submetida às mudanças de variáveis propostas, ela torna-se simplesmente

$$\int f^{eq*} \psi(\xi_0) d\xi_0 = \sum_i w_i f_i^{eq*} \psi(\xi_{0i}). \quad (6.6)$$

De maneira a encontrar os pesos w_i e as abscissas ξ_{0i} que fazem a equação acima válida para todos os momentos $\psi(\xi_0)$, é útil expandir $\psi(\xi_0)$ em polinômios de Hermite, Apêndice A,

$$\psi(\xi_0) = \sum_{p=0}^m b_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(p)} \mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(p)}(\xi_0), \quad (6.7)$$

e utilizar a Equação 6.4 para obter

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^m \frac{b_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(p)}}{n!} a_{eq,\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{*(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) \int \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{(2\pi)^{D/2}} \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_0) \mathcal{H}_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(p)}(\xi_0) d\xi_0 = \\ \sum_i \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^m \frac{b_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(p)}}{n!} a_{eq,\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{*(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) w_i \frac{e^{-\xi_{0i}^2/2}}{(2\pi)^{D/2}} \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_{0i}) \mathcal{H}_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(p)}(\xi_{0i}). \end{aligned} \quad (6.8)$$

Se esta análise for restringida ao caso em que o momento genérico $\psi(\xi_0)$ coincide com um polinômio de Hermite, sem perda de generalidade, já que qualquer momento pode ser escrito como uma soma de polinômios de Hermite, tem-se

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{eq,\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{*(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) \int \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{(2\pi)^{D/2}} \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_0) \mathcal{H}_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(m)}(\xi_0) d\xi_0 = \\ \sum_i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{eq,\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{*(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) w_i \frac{e^{-\xi_{0i}^2/2}}{(2\pi)^{D/2}} \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_{0i}) \mathcal{H}_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(m)}(\xi_{0i}). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Como os polinômios de Hermite são ortogonais com relação ao produto interno acima e os coeficientes $a_{eq}^{*(n)}$ são independentes uns dos outros, deve-se ter

$$\int \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{(2\pi)^{D/2}} \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_0) \mathcal{H}_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(m)}(\xi_0) d\xi_0 = \sum_i W_i \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_{0i}) \mathcal{H}_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(m)}(\xi_{0i}), \quad (6.10)$$

onde W_i é igual a $w_i \frac{e^{-\xi_{0i}^2/2}}{(2\pi)^{D/2}}$, para todo polinômio $\mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_{0i})$ de ordem menor ou igual

à ordem de interesse, definida de acordo com o tipo de problema que se está tentando resolver, Seção 3.1.2.

Em Philippi e colaboradores^[2] foi demonstrado que a correta representação da norma dos polinômios de Hermite no espaço discreto de velocidades garante a sua ortogonalidade neste espaço com relação ao produto interno dado pela Equação 6.10 se eles forem independentes e a rede for de Bravais^[30],

$$\int \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{(2\pi)^{D/2}} \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_0)^2 d\xi_0 = \sum_i W_i \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\xi_{0i})^2. \quad (6.11)$$

Para que esta quadratura seja completada é preciso definir as abscissas ξ_{0i} . Isto é realizado através da associação de sub-conjuntos prescritos de velocidades de mesmo módulo que respeitem da melhor forma possível as simetrias da malha, possuindo pesos, W_i , e módulos, a_i , comuns,

$$|\xi_{0i}| = \frac{|\xi_i|}{\sqrt{RT_0}} = a_i \quad (6.12)$$

Na simulação de algoritmos acoplados, e.g., Seções 5.1.1 e 5.6, as discretizações espacial, temporal e do espaço de velocidades não são independentes, i.e., o número de Courant é sempre constante e igual a um, Seção 5.19. Neste caso é preciso estabelecer uma relação a priori entre os módulos a_i de cada um dos sub-conjuntos de vetores que formarão a rede completa para assegurar que esta rede será space-filling.

Considere os dois sub-conjuntos de velocidades $\{\{a_2\}, \{-a_2\}\}$ e $\{\{a_1\}, \{-a_1\}\}$ em uma dimensão, por exemplo. Fazendo-se $a_2 = 2a_1$, obtém-se a rede space-filling formada pelos vetores $\{\{2a_1\}, \{a_1\}, \{-a_1\}, \{-2a_1\}\}$. De maneira geral, todo sub-conjunto de velocidades adicionado a uma rede terá módulo dependente de apenas um parâmetro quando esta rede for space-filling. Neste trabalho este parâmetro será o módulo do primeiro sub-conjunto, que conecta um nó ao seu vizinho mais próximo.

Como $a_1 = \frac{|\xi_1|}{\sqrt{RT_0}}$ e $|\xi_1| = \frac{\delta x}{\delta t}$, onde δx é a menor distância entre dois nós da rede e δt é o passo de tempo do algoritmo,

$$a \equiv a_1 = \frac{\delta x / \delta t}{\sqrt{RT_0}}, \quad (6.13)$$

onde a é também chamado de fator de escala^[2], definido em uma rede space-filling. Uma vez que este fator de escala é determinado, obtém-se a relação entre o passo de tempo, a discretização da malha de simulação e a constante T_0 .

A distribuição de equilíbrio discreta encontrada através deste procedimento tem então

a forma, Equação 6.4,

$$f_i^{eq} = W_i \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_{eq, \alpha\beta\gamma\dots}^{*(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) \mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}(\xi_{0i}), \quad (6.14)$$

onde N é a ordem do truncamento desta série.

6.4 Quadratura Unidimensional

Apesar de problemas unidimensionais serem bastante limitados e não terem grande importância prática, o estudo destas redes pode trazer um grande entendimento em temas importantes relacionados à construção de conjuntos de velocidades discretas pelo método de quadratura e no efeito da inclusão de momentos de alta ordem na distribuição de equilíbrio, como será mostrado nesta seção e na Seção 8.2.

Considere, por exemplo, o conjunto de abscissas de valores: $\{a, 0, -a\}$, característico de uma rede space-filling de três velocidades. Para manter a norma do momento de ordem zero, um, dois e três neste espaço, faz-se:

$$\int \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{\sqrt{2\pi}} d\xi_0 = \sum_i W_i, \quad (6.15)$$

$$\int \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{\sqrt{2\pi}} (\xi_0)^2 d\xi_0 = \sum_i W_i (\xi_{0i})^2, \quad (6.16)$$

$$\int \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{\sqrt{2\pi}} (\xi_0^2 - 1)^2 d\xi_0 = \sum_i W_i (\xi_{0i}^2 - 1)^2, \quad (6.17)$$

$$\int \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{\sqrt{2\pi}} (\xi_0^3 - 3\xi_0)^2 d\xi_0 = \sum_i W_i (\xi_{0i}^3 - 3\xi_{0i})^2. \quad (6.18)$$

Onde os polinômios $\mathcal{H}^{(0)}$, $\mathcal{H}_x^{(1)}$, $\mathcal{H}_{xx}^{(2)}$ e $\mathcal{H}_{xxx}^{(3)}$, Apêndice A, foram substituídos na Equação 6.11. Note que existem três incógnitas e quatro equações no sistema acima. Resolvendo primeiramente as equações correspondentes às ordens zero, um e dois, obtém-se

$$a = \sqrt{3}, \quad W_0 = 2/3, \quad W_1 = 1/6. \quad (6.19)$$

Através da substituição destes valores na equação correspondente ao momento de terceira ordem, observa-se que ela é insolúvel. Para tornar possível a solução deste sistema até a terceira ordem é necessário adicionar mais uma incógnita a ele. Isto se faz com a adição de mais um sub-conjunto de velocidades moleculares a rede. Se as redes são space-filling, a adição de mais um conjunto de velocidades adiciona uma incógnita ao conjunto de equações, o peso da rede adicionada. Se o esquema é não space-filling a adição de mais uma velocidade molecular ao sistema faz com que ele ganhe duas incógnitas para

serem trabalhadas, o peso relacionado a cada direção e o módulo da velocidade molecular adicionada.

A Tabela 11 mostra algumas redes space-filling e não space-filling adequadas para simulações em uma dimensão em diversas ordens, obtidas pela inclusão sistemática de sub-conjuntos de velocidades à rede completa de modo a tornar a solução do problema da quadratura possível. As redes não space-filling são sempre denotadas por um n . A Tabela 15, que contem os pesos, as velocidades moleculares e os fatores de escala das redes space-filling obtidas neste trabalho encontra-se no Apêndice B.1.

Tabela 11: Redes Unidimensionais

Momento	Space-filling	Referências	Não space-filling	Referências
ξ^2	D1Q3	[57]	D1Q3	[57]
ξ^3	D1V5	Tabela 12, [57]	D1V4n	[57]
ξ^4	D1V7	Tabela 15	D1V5n	[57]
ξ^5	D1V9	Tabela 15	D1V6n	[57]
ξ^6	D1V11	Tabela 15	D1V7n	[57]
ξ^7	D1V13	Tabela 15	D1V8n	[57]
ξ^8	D1V15	Tabela 15	D1V9n	[57]

Redes mínimas não space-filling foram encontradas primeiramente por Chikatamarla e Karlin^[57] utilizando uma quadratura de Gauss-Hermite de abscissas não prescritas, na qual a forma dos vetores ξ_{0i} que satisfazem a condição de norma e ortogonalidade, Equação 6.11, é calculada analiticamente. O sistema de equações obtido por eles é solúvel apenas em uma dimensão e as redes obtidas através dele são sempre não space-filling, com exceção da rede D1Q3.

No mesmo trabalho, estes autores apresentaram diferentes soluções para o problema de encontrar uma rede space-filling com cinco velocidades que represente momentos da distribuição de equilíbrio de até terceira ordem, não encontrando por tentativa e erro, todavia, nenhuma rede com velocidades $\{0, \pm 1, \pm 2\}$ e pesos reais e positivos W_i que pudesse representar momentos de quarta ordem. No presente trabalho, o método das abscissas prescritas foi aplicado a uma rede genérica formada pelas velocidades $\{0, \pm a, \pm b\}$. Os resultados desta análise estão resumidos na Tabela 12.

Tabela 12: Rede D1V5.

	W_0	W_1	W_2	a
$\{0, \pm a, \pm 2a\}$	sem solução			
$\{0, \pm a, \pm 3a\}$	$7,446420 \times 10^{-2}$	$4,185854 \times 10^{-1}$	$4,418248 \times 10^{-2}$	$7,826711 \times 10^{-1}$
$\{0, \pm a, \pm 3a\}$	$6,366469 \times 10^{-1}$	$1,814146 \times 10^{-1}$	$2,619607 \times 10^{-4}$	$1,649472$
$\{0, \pm a, \pm 4a\}$	$6,513812 \times 10^{-1}$	$1,742737 \times 10^{-1}$	$3,575170 \times 10^{-5}$	$1,691054$
$\{0, \pm 2a, \pm 5a\}$	$3,104390 \times 10^{-1}$	$3,099684 \times 10^{-1}$	$3,481213 \times 10^{-2}$	$4,867720 \times 10^{-1}$
$\{0, \pm 2a, \pm 5a\}$	$6,167610 \times 10^{-1}$	$1,905078 \times 10^{-1}$	$1,111679 \times 10^{-3}$	$7,956463 \times 10^{-1}$
$\{0, \pm a, \pm b\}$	$\frac{2(b^4 - 6b^2 + 3)}{3b^2(b^2 - 5)}$	$\frac{(b^2 - 3)^3}{6(b^6 - 11b^4 + 45b^2 - 75)}$	$\frac{3}{b^2(b^4 - 6b^2 + 15)}$	$\sqrt{3 + \frac{6}{3 - b^2}}$

Os pesos e a velocidade a obtidos dependem apenas do parâmetro b . Eles precisam ser reais e positivos para que a rede seja uma solução válida para o problema de quadratura. Desta forma o parâmetro b é restrito a valores maiores ou iguais a $\sqrt{3 + \sqrt{6}}$. A razão entre as duas velocidades da rede pode ser escrita como

$$\frac{b}{a} = \frac{b\sqrt{(b^2 - 3)}}{\sqrt{3(b^2 - 5)}}. \quad (6.20)$$

Esta função apresenta um mínimo ($b/a \approx 2,107$) quando $b = \sqrt{5 + \sqrt{10}}$. Isto significa que a razão entre b e a precisa ser ao menos maior do que 2,107 para que o sistema tenha uma solução válida. Existem duas soluções possíveis para o problema da quadratura quando a razão entre as duas velocidades é menor do que $\sqrt{2} + \sqrt{3}$ e apenas uma solução possível quando a razão é maior do que esta, Tabela 12. Se o parâmetro b for escolhido de forma que os momentos de quarta ordem sejam corretamente representados no espaço discreto, a rede D1V5n é obtida. Quando o parâmetro b é escolhido que maneira a fazer o peso $W_0 = 0$, a rede D1V4n é obtida, [57].

6.5 Quadratura Bidimensional

Em um problema unidimensional a direção dos vetores que compõe a rede é limitada a valores positivos ou negativos somente. Quando mais de uma dimensão é considerada, as direções das velocidades adicionadas ao conjunto final discretizado pode ser qualquer uma. Frequentemente, todavia, as direções das velocidades pertencentes a cada sub-conjunto são escolhidas de forma a manter as simetrias da rede em relação à reflexão especular deste conjunto em torno dos eixos e a sua rotação em noventa graus.

6.5.1 Redes Space-Filling

6.5.1.1 Redes de Segunda Ordem

Uma rede de primeira ordem pode ser construída facilmente em duas dimensões através do conjunto de vetores,

$$\{\{a, 0\}, \{-a, 0\}, \{0, a\}, \{0, -a\}\} \quad (6.21)$$

Quando o peso e o fator de escala são iguais a $1/4$ e 1 , respectivamente, ver Equação 6.11. Observe que nesta ordem existem três equações a serem resolvidas, referentes aos polinômios $\mathcal{H}^{(0)}$, $\mathcal{H}_x^{(1)}$ e $\mathcal{H}_y^{(1)}$, mas $\mathcal{H}_x^{(1)}$ e $\mathcal{H}_y^{(1)}$ são iguais devido a simetria da rede em relação à troca de índices, de forma que apenas duas são independentes. As duas novas equações que são adicionadas à este sistema em segunda ordem, referentes aos polinômios $\mathcal{H}_{xx}^{(2)}$ e $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}$, exigem a inclusão de mais dois sub-conjuntos de velocidades à rede.

Considere então, de uma forma mais geral, a construção de um grupo de sub-conjuntos de quatro velocidades de acordo com a figura abaixo.

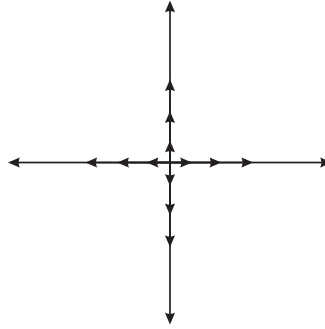


Figura 5: Exemplo de rede formada por velocidades discretas res- tritas às direções principais.

Montando um sistema de equações para resolver este problema em ordens crescentes em relação aos momentos de f^{eq} , observa-se que o momento discreto $\xi_x \xi_y$ é zero em cada uma das velocidades desta rede. Desta maneira este tipo de construção não pode assegurar a condição de norma do polinômio de Hermite $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}$, não sendo adequado para representar todo o conjunto de momentos de segunda ordem.

Poderia-se sugerir que a norma do polinômio $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}$ seria corretamente recuperada se este conjunto de vetores fosse rotacionado por algum ângulo qualquer, fazendo com que o momento em questão não fosse zero. De fato, existem ângulos de rotação que podem fazer todas as normas dos polinômios de Hermite de até segunda ordem no espaço discreto equivalentes às normas destes polinômios no espaço contínuo, e.g., quando a rede é rotacionada em $22,5^\circ$. Todavia, pode ser demonstrado que o polinômio $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}(\xi_{0i})$ pode

ser escrito como

$$\mathcal{H}_{xy}^{(2)}(\xi_{0i}) = \frac{\tan(2\alpha)}{2} \mathcal{H}_{xx}^{(2)}(\xi_{0i}) - \frac{\tan(2\alpha)}{2} \mathcal{H}_{yy}^{(2)}(\xi_{0i}), \quad (6.22)$$

quando a rede é rotacionada por um ângulo α , tornando impossível resolver a condição de ortogonalidade deste polinômio neste tipo de rede.

De modo a resolver esta quadratura, considere uma rede forma por dois sub-conjuntos de velocidades rotacionados em $\pi/4$,

$$\{\{0, 0\}, \{a, 0\}, \{-a, 0\}, \{0, a\}, \{0, -a\}, \{a, a\}, \{-a, a\}, \{-a, -a\}, \{a, -a\}\}, \quad (6.23)$$

representada na figura abaixo,

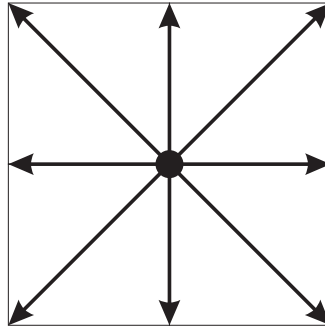


Figura 6: D2Q9

As condições de norma, Equação 6.11, quando aplicadas ao conjunto de vetores da Equação 6.23, geram o seguinte sistema

$$W_0 + 4W_1 + 4W_2 = 1, \quad \mathcal{H}^{(0)}, \quad (6.24)$$

$$2a^2W_1 + 4a^2W_2 = 1, \quad \mathcal{H}_x^{(1)} \text{ e } \mathcal{H}_y^{(1)}, \quad (6.25)$$

$$W_0 + 2W_1 + 2(a^2 - 1)^2W_1 + 4(a^2 - 1)^2W_2 = 2, \quad \mathcal{H}_{xx}^{(2)} \text{ e } \mathcal{H}_{yy}^{(2)}, \quad (6.26)$$

$$4a^4W_2 = 1, \quad \mathcal{H}_{xy}^{(2)}, \quad (6.27)$$

que possui solução quando os pesos W_0 , W_1 e W_2 e o fator de escala a são iguais a $4/9$, $1/9$, $1/36$ e $\sqrt{2}$, respectivamente.

6.5.1.2 Redes de Terceira Ordem

De maneira a se obter uma rede de terceira ordem é natural adicionar a ela sub-conjuntos de vetores de módulo $2a$ na direção axial e $2\sqrt{2}a$ na direção diagonal para que as equações relativas aos polinômios $\mathcal{H}_{xxx}^{(3)}$ e $\mathcal{H}_{xxy}^{(3)}$ possam ser resolvidas. No entanto, quando isso é realizado, nenhuma solução com pesos reais positivos é encontrada.

A inclusão de mais um sub-conjunto de vetores, de módulo $3a$, a esta rede torna o sistema indeterminado com um parâmetro livre. Este parâmetro pode ser utilizado para zerar o peso relativo à velocidade $2a$, procedimento que é equivalente a excluí-la do conjunto de velocidades discretas, que volta a possuir 17 velocidades. A figura abaixo ilustra esta rede, cujas velocidades e pesos podem ser encontrados na Tabela 17 do Apêndice B.2.1,

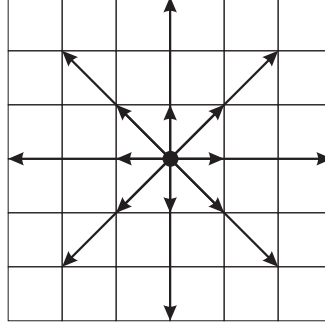


Figura 7: D2V17

6.5.1.3 Redes de Quarta Ordem

Com o objetivo de se obter uma rede de quarta ordem, mais três sub-conjuntos de velocidades precisam ser incluídos no grupo correspondente à rede de terceira ordem, cada um deles gerando uma incógnita com a função de representar a norma dos polinômios $\mathcal{H}_{xxx}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{xxy}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{xyy}^{(4)}$, respectivamente, no espaço discreto. Devido à simplicidade de tratamento do método e aplicação das condições de contorno em redes compostas apenas por velocidades nas direções principal e diagonal, e.g., a condição de bounce-back só pode ser aplicada em redes deste tipo, é natural que se procure por elas nesta quadratura.

Infelizmente, neste caso, não importa quantos sub-conjuntos de velocidades sejam adicionadas à rede, $\mathcal{H}_{xxy}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{xyy}^{(4)}$ sempre serão idênticos ponto a ponto no espaço discreto de velocidades. Desta forma, a condição de ortogonalidade destes dois tensores não pode ser atendida ao menos que se adicione ao conjunto de vetores da rede sub-conjuntos de velocidades que contenham vetores não alinhados com as direções principais e diagonais da malha. Neste trabalho, seguindo o artigo de Philippi e colaboradores^[2], foram adicionados os vetores de forma $(\pm 1, \pm 2)$ e $(\pm 2, \pm 1)$ ao conjunto de vetores dado. A rede obtida pela solução do sistema resultante está ilustrada abaixo,

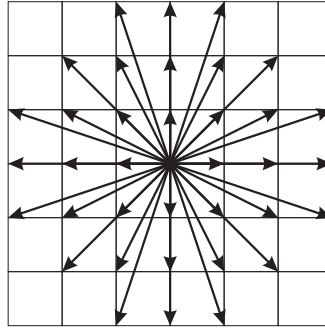


Figura 8: D2V37

enquanto seus pesos e velocidades encontram-se na Tabela 19 do Apêndice B.2.1.

6.5.1.4 Redes de Quarta Ordem Incompletas

Na Seção 3.1.2 foi discutido que, em alguns casos, a representação do conjunto completo de momentos de quarta ordem no espaço discreto, $\xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma \xi_\delta$, é desnecessária, sendo imprescindível apenas representar a contração destes momentos de forma $\xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta$. Para que estes momentos sejam recuperados é suficiente que as somas $\mathcal{H}_{xxxx}^{(4)} + \mathcal{H}_{xxyy}^{(4)}$, $\mathcal{H}_{xxxy}^{(4)} + \mathcal{H}_{xyyy}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{xxyy}^{(4)} + \mathcal{H}_{yyyy}^{(4)}$ sejam linearmente independentes e ortogonais entre elas e entre elas e os polinômios de Hermite de mais baixa ordem e sua norma seja corretamente recuperada no espaço discreto de velocidades.

Neste caso, redes formadas por sub-conjuntos de velocidades restritas às direções principal e diagonal são suficientes para representar os momentos. Ao buscar conjuntos de velocidades com esta forma, pode-se encontrar duas redes independentes de 25 velocidades, chamadas de w_1 e $w_6^{[2]}$, quando vetores de módulo máximo $4a$ e $3\sqrt{2}a$ são considerados nas direções principais e diagonais, respectivamente,

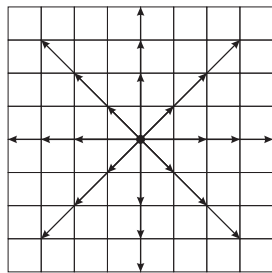


Figura 9: D2V25w1

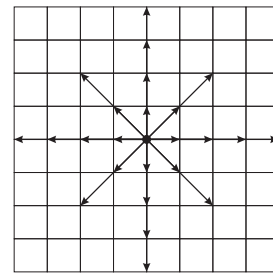


Figura 10: D2V25w6

Essas redes possuem três vantagens principais em relação às redes de quarta ordem completas, Seção 6.5.1.3, a de serem mais simples de programar, adaptarem-se melhor às condições de contorno e possuírem um número menor de velocidades.

Quando a ordem dos momentos que devem ser recuperados em uma quadratura aumenta e, com ela, o número e a variedade de sub-conjuntos de velocidades que precisam ser adicionados à rede completa para que esta quadratura seja solúvel, é comum que diferentes redes possam ser obtidas com aproximadamente o mesmo número de velocidades, como neste caso.

Testes realizados com as duas redes acima apresentaram resultados numéricos bastante similares, de modo que arbitrariamente optou-se pela utilização da rede mais compacta, i.e., com a menor razão entre o maior módulo de uma velocidade da rede e o menor, neste caso em particular ou em qualquer outro caso em que redes com aproximadamente o mesmo número de velocidades pudessem ser obtidas, e.g., Seção 6.5.2.3.

Note também que os pesos e o fator de escala obtidos nesta tese são ligeiramente diferentes daqueles utilizados por Siebert^[28] e Philippi e colaboradores^[2]. Isto se deve ao modo como os polinômios de Hermite foram definidos neste trabalho, Apêndice A, e à forma como foram determinados os polinômios de quarta ordem que fazem parte desta discretização.

6.5.1.5 Redes de Quinta Ordem

Escoamentos a alto número de Knudsen, Seções 3.2 e 8.5, ou com múltiplos tempos de relaxação, Seções 2.2.1 e 2.2.3, demandam a representação de momentos de alta ordem no espaço discreto. Seguindo procedimento semelhante ao adotado nas últimas seções, a seguinte rede de quinta ordem foi obtida,

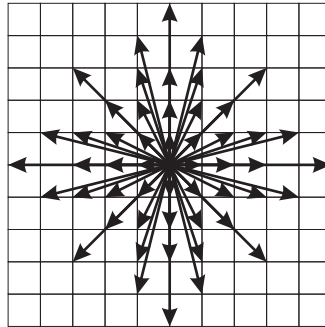


Figura 11: D2V53

Suas velocidades e pesos estão detalhados no Apêndice B.2.1, Tabela 20. Quando momentos de alta ordem, n , são considerados na discretização do espaço de velocidades, o número de velocidades discretas obtidas cresce rapidamente devido à inclusão de $(n + 1)$ equações independentes ao sistema da quadratura a cada momento adicionado e ao aumento da complexidade dos sub-conjuntos de velocidades que devem ser adicionados à rede para tornar este sistema solúvel.

6.5.1.6 Redes de Sexta Ordem

A menor rede encontrada neste trabalho para representar momentos de até sexta ordem encontra-se abaixo. Os pesos e velocidades desta rede estão detalhados no Apêndice B.2.1, Tabela 21.

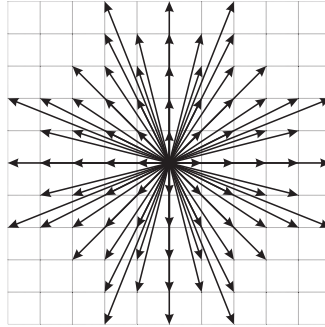


Figura 12: D2V81

Foi observado, neste caso, que o sistema de equações para a recuperação dos momentos de sexta ordem é solúvel somente quando velocidades fora das direções principais, diagonais e da forma (na, a) , onde n é um número inteiro, são incluídas na rede.

Quando a ordem dos momentos que devem ser representados no espaço discreto aumenta muito, os sistemas resultantes do procedimento de quadratura são cada vez mais difíceis de resolver devido à presença de um grande número de variáveis e de não linearidades. As soluções encontradas são frequentemente inválidas por incluírem pesos imaginários ou negativos.

Neste trabalho adotou-se a metodologia de se encontrar redes com um grande número de sub-conjuntos de velocidades, com pesos que pudessem ser anulados ou ajustados a posteriori. As diversas combinações de sub-conjuntos que possuem a mesma acurácia fazem com que seja difícil afirmar que uma rede qualquer encontrada assim seja a que tem o menor número de velocidades em determinada ordem. Todavia, após a procura exaustiva por soluções realizada, pode-se afirmar que este número de velocidades, 81, está bem próximo do mínimo nesta ordem.

Do ponto de vista prático, a adoção de redes com este número de velocidades em simulações cotidianas é limitada pelos seus grandes gastos de memória RAM e processamento, dificuldades de programação, problemas na definição e aplicação das condições de contorno e erros numéricos devido a multiplicação e soma de quantidades numéricas muito díspares, como as potências das componentes das velocidades moleculares e os pesos encontrados.

6.5.2 Redes Não Space-Filling

As restrições à obtenção de redes não space-filling dependem basicamente da discretização do espaço físico e temporal realizada. Se forem adotados algoritmos cujas discretizações espaço-temporal e de velocidades são totalmente desacopladas, redes compostas por velocidades discretas com direções e módulos arbitrários podem ser utilizadas desde que, obviamente, estas velocidades sejam suficientes para representar os momentos de f^{eq} até a ordem desejada, Seção 3.1.2.

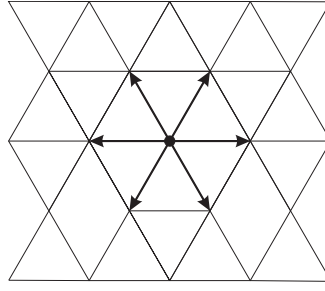
Todavia, existem discretizações espaço-temporais que exigem que as velocidades discretas estejam alinhadas a vetores que partem de um nó da malha e chegam aos nós vizinhos, limitando as escolhas das direções destas velocidades, mas permitindo ainda que haja liberdade de escolha do módulo de cada sub-conjunto de velocidades, Seção 5.5. Redes adequadas a cada um destes dois tipos de algoritmos serão apresentadas nas próximas seções.

Quando redes não space-filling são utilizadas é importante manter a razão entre o maior e o menor módulo de uma velocidade da rede a menor possível. Isto acontece porque o número de Courant por direção depende, em alguns métodos, do módulo da velocidade molecular em questão, Equação 5.29. Os algoritmos utilizados neste trabalho, quando o número de Courant é pequeno, tendem a apresentar grande difusividade numérica^[51], enquanto a Courant muito alto eles tendem a ser instáveis. Redes compactas garantem que estes algoritmos, quando aplicados às menores velocidades da rede, apresentem pequena difusividade numérica, enquanto mantêm a estabilidade nas maiores velocidades.

Ademais, redes compactas comumente possuem pesos maiores, minimizando os problemas com erros de arredondamento na determinação da distribuição de equilíbrio a alta ordem, e uma maior facilidade de manipulação das condições de contorno. Deste modo serão apresentadas nas próximas seções, sempre que possível, alternativas às menores redes encontradas, com uma razão entre o maior e o menor módulo dos vetores da rede menor.

6.5.2.1 Redes de Segunda Ordem

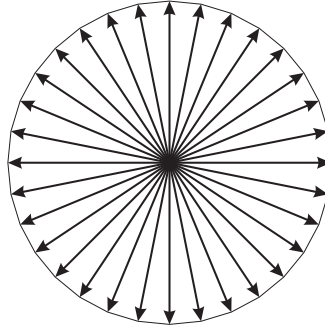
Para que momentos de f^{eq} até segunda ordem sejam representados no espaço discreto, é necessário que a rede tenha pelo menos 7 velocidades (um sub-conjunto hexagonal e uma distribuição de velocidade zero), formando o seguinte conjunto de vetores space-filling,

**Figura 13:** D2Q7

Esta rede é uma solução do problema da quadratura até segunda ordem quando os pesos W_0 e W_1 e o fator de escala a são iguais a $1/2$, $1/12$ e 2 , respectivamente. Mesmo sendo space-filling, esta rede foi incluída nesta seção por ser a menor solução possível para o sistema de quadratura em segunda ordem, para redes space-filling ou não. No passado ela foi bastante utilizada nos modelos de lattice gas, mas com o tempo foi sendo esquecida devido ao desconforto de se utilizar um algoritmo escrito para uma rede hexagonal quando havia a possibilidade de escrevê-lo para uma rede quadrada, a D2Q9.

6.5.2.2 Redes de Terceira Ordem

Se for considerada a seguinte rede na tentativa de representar polinômios de Hermite de terceira ordem,

**Figura 14:** D2V33n

serão obtidas as seguintes equações,

$$W_0 + 32W_1 = 1, \quad \mathcal{H}^{(0)}, \quad (6.28)$$

$$16a^2W_1 = 1, \quad \mathcal{H}_x^{(1)} \text{ e } \mathcal{H}_y^{(1)}, \quad (6.29)$$

$$W_0 + 4(3a^4 - 8a^2 + 8)W_1 = 2, \quad \mathcal{H}_{xx}^{(2)} \text{ e } \mathcal{H}_{yy}^{(2)}, \quad (6.30)$$

$$4a^4W_1 = 1, \quad \mathcal{H}_{xy}^{(2)}, \quad (6.31)$$

$$a^2(5a^4 - 36a^2 + 72)W_1 = 3, \quad \mathcal{H}_{xxx}^{(3)} \text{ e } \mathcal{H}_{yyy}^{(3)}, \quad (6.32)$$

$$a^2(a^4 - 4a^2 + 8)W_1 = 1, \quad \mathcal{H}_{xxy}^{(3)} \text{ e } \mathcal{H}_{xyy}^{(3)}. \quad (6.33)$$

Estas equações têm solução até segunda ordem quando W_0 , W_1 e a são iguais a $1/2$, $1/64$ e 2 , respectivamente. Entretanto, não importa quantas direções sejam adicionadas a este sub-conjunto, não existe solução para o sistema acima ao menos que se incorporem sub-conjuntos de velocidades a esta rede com módulo diferente de zero e a .

Uma rede composta por dois sub-conjuntos quadrados defasados de 45° , análoga a rede D2Q9, Figura 6, possui uma variável livre que pode ser ajustada para recuperar parte dos polinômios de terceira ordem. Todavia, como são duas as equações independentes adicionadas a este sistema neste caso, correspondentes aos polinômios de Hermite $\mathcal{H}_{xxx}^{(3)}$ e $\mathcal{H}_{xy}^{(3)}$, ele permanece insolúvel. A inclusão de mais um sub-conjunto de quatro velocidades alinhado a direção principal ou a diagonal faz com que ele se torne solúvel, restando ainda no sistema um parâmetro livre que pode ser utilizado para zerar o peso correspondente à velocidade nula.

As redes obtidas, mostradas nas figuras abaixo, diferem entre si por uma rotação de 45° ,

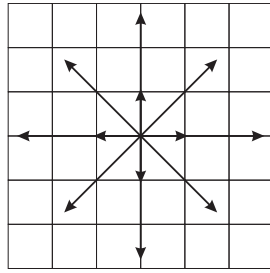


Figura 15: D2V12₁

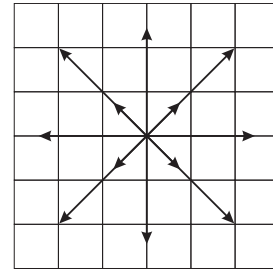
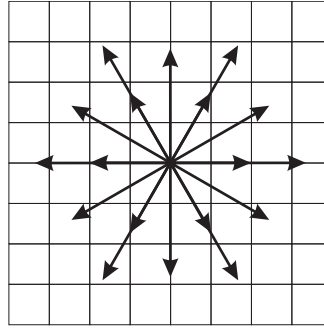


Figura 16: D2V12₂

Seus pesos e vetores estão detalhados no Apêndice B.2.2, Tabela 22.

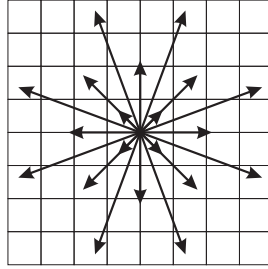
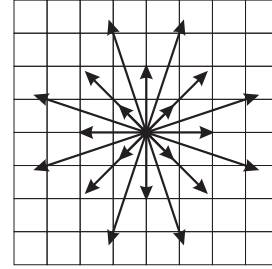
6.5.2.3 Redes de Quarta Ordem

A menor rede de quarta ordem encontrada através da quadratura de abscissas prescritas foi a D2V19n, Apêndice B.2.2, Tabela 24, formada pela composição de três redes hexagonais e uma velocidade nula. Esta rede, entretanto, possui geometria complicada de trabalhar quando uma malha cartesiana é utilizada, limitando sua aplicação a algoritmos cujas discretizações espaço-temporal e de velocidades são realizadas de maneira totalmente desacoplada. A razão entre o módulo da maior e da menor velocidade, $\approx 2,154$, todavia, é bastante favorável.

**Figura 17:** D2V19n

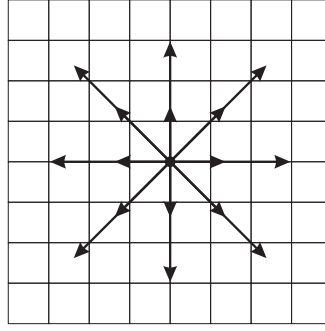
A menor rede encontrada neste trabalho que possui simetria em relação a troca de eixos foi a D2V20, Apêndice B.2.2, Tabela 25. Esta rede, cuja maior razão entre seus módulos de velocidade é $\approx 4,081$, possui um sub-conjunto de velocidades, o maior deles, com relação entre as componentes x e y irracional, limitando sua aplicação a algoritmos cujas discretizações espaço-temporal e de velocidades são realizadas de forma totalmente desacoplada.

A inclusão de uma distribuição de moléculas com velocidade nula a esta rede torna a escolha da sua geometria mais flexível. Neste trabalho, ao ser adicionada esta velocidade à rede, formou-se a D2V21, Apêndice B.2.2, Tabela 26, cuja razão entre o maior e o menor módulo de seu conjunto de velocidades é 2,998 e cujos vetores estão alinhados aos vetores que ligam os nós da rede aos seus vizinhos mais próximos, conforme a figura abaixo.

**Figura 18:** D2V20n**Figura 19:** D2V21n

6.5.2.4 Redes de Quarta Ordem Incompletas

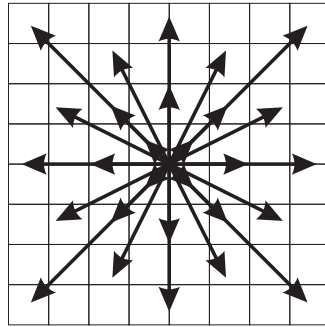
Limitando as velocidades moleculares discretas às direções principais e diagonais de uma malha cartesiana por conveniência, foi encontrada a seguinte rede não space-filling de quarta ordem incompleta,

**Figura 20:** D2V17n

No processo de obtenção desta rede um parâmetro permanece livre para ser ajustado. Infelizmente este parâmetro não pode ser utilizado para anular qualquer peso correspondente a um sub-conjunto da rede pois isto faz com que os outros pesos se tornem imaginários ou negativos. Desta forma, optou-se por ajustar este parâmetro de modo a fazer com que a rede fosse a mais compacta possível, com os pesos e velocidades listados na Tabela 23, Apêndice B.2.2.

6.5.2.5 Redes de Quinta Ordem

Seguindo procedimento semelhante ao adotado nas últimas seções, a seguinte rede de quinta ordem foi obtida^[47],

**Figura 21:** D2V28n

Esta rede foi desenvolvida para tornar possível a aplicação de algoritmos cuja discretização espacial pressupõe a utilização do valor de $f(\xi_i)$ em nós na direção das velocidades, como pode ser observado na figura acima e na definição dos pesos, Apêndice B.2.2, Tabela 27. Possivelmente redes um pouco menores poderiam ser obtidas se esta condição fosse relaxada.

Observe que a diferença do número de velocidades entre as redes não space-filling e as redes space-filling se torna bastante importante a medida que a ordem dos momentos recuperados aumenta, e.g., em terceira, quarta e quinta ordens, 17, 37 e 53 velocidades

são necessárias a quadratura de redes space-filling e 12, 19 e 28 velocidades a de redes não space-filling, respectivamente.

6.5.2.6 Outras Redes

Diversas outras redes não space-filling podem ser obtidas se sub-conjuntos formados por vetores ligando o centro de polígonos regulares aos seus vértices forem utilizados. Neste trabalho diversas redes formadas por polígonos semelhantes foram construídas com o intuito de estudar os requerimentos geométricos do problema de quadratura aqui posto.

Na Seção 6.5.1.1 foi considerada a composição espacial de diversas redes quadradas em uma mesma direção, Figura 5, e foi observado que, qualquer que seja o número de sub-conjuntos de velocidades adicionados a uma rede, o conjunto de vetores resultante jamais será capaz de representar todos os momentos de segunda ordem de f^{eq} . Pode ser demonstrado, contudo, que apenas uma rede quadrada e uma distribuição de moléculas parada já são suficientes para representar os momentos de primeira ordem.

A rede D2Q7, Figura 13, formada por apenas um hexágono e uma distribuição de moléculas com velocidade nula é suficiente para representar momentos de segunda ordem de f^{eq} , mas qualquer quantidade de redes hexagonais adicionadas a ela em uma direção alinhada a principal, de forma análoga a rede mostrada na Figura 5, resulta em um sistema sem solução em terceira ordem. Ao se aumentar o número de direções de cada sub-conjunto, todavia, pode-se deduzir uma rede formada por dois octógonos que é suficiente para representar os momentos de terceira ordem.

Na tabela abaixo é mostrado o número mínimo de polígonos (redes) de até doze lados que devem ser sobrepostos para que o sistema da quadratura seja solúvel até determinada ordem.

Tabela 13: Redes não space-filling, formadas por polígonos regulares, suficientes para a quadratura dos momentos listados em 2D.

	quadrados	hexágonos	octógonos	decágonos	dodecágonos
ξ_α	1 rede	1 rede	1 rede	1 rede	1 rede
$\xi_\alpha \xi_\beta$	sem solução	1 rede	1 rede	1 rede	1 rede
$\xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma$	sem solução	sem solução	2 redes	2 redes	2 redes
$\xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma \xi_\delta$	sem solução	sem solução	sem solução	2 redes	2 redes
$\xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma \xi_\delta \xi_\epsilon$	sem solução	sem solução	sem solução	sem solução	3 redes
$\xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma \xi_\delta \xi_\epsilon \xi_\zeta$	sem solução	sem solução	sem solução	sem solução	sem solução

A impossibilidade de solução nos casos mostrados segue do limite de isotropia dos tensores formados pela multiplicação dos vetores das redes mostradas. De modo a recuperar momentos de ordem n por uma certa discretização, redes que possuem isotropia de ordem mínima $2n$ são necessárias. Foi observado neste trabalho que sub-conjuntos formados pelos vértices de polígonos regulares de $2n$ lados possuem isotropia de ordem $2n - 1$, não sendo portanto suficientes para representar momentos de ordem n .

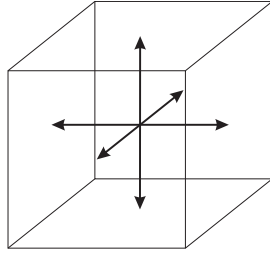
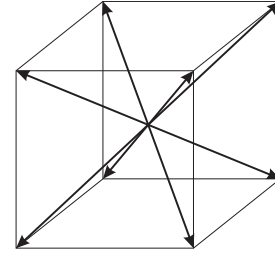
Composições de sub-conjuntos deslocados entre si por um ângulo de $180^\circ/lados$ graus, e.g., sub-conjuntos quadrados deslocados entre si de 45° nas Figs. 6, 7, 9 e 20, entre outras, se comportam, em relação a isotropia, como redes formadas por polígonos regulares com duas vezes mais lados que os sub-conjuntos que as formam, fazendo com que a solução do problema de quadratura seja possível com um número menor de direções, e.g., fazendo com que a rede D2V19n seja uma solução possível para a quadratura de quarta ordem, Figura 17, mesmo que com qualquer composição de redes hexagonais não seja possível recuperar momentos nem de terceira ordem.

Outras redes adequadas a quadratura de momentos de diferentes ordens foram obtidas por diversos autores^[62]. Não existe notícia de sua aplicação aos métodos de lattice Boltzmann.

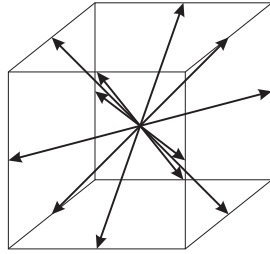
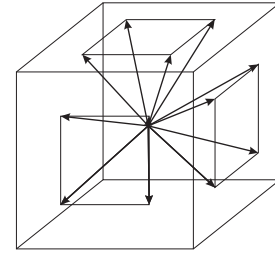
6.6 Quadratura Tridimensional

A adição de mais uma dimensão ao sistema da quadratura provoca uma nova avalanche de possibilidades de escolha dos conjuntos de velocidades que formarão o espaço discreto. Todavia, esta grande variedade deve ser limitada de alguma forma para que somente soluções de valor prático significativo sejam obtidas. Decidiu-se, com este objetivo, limitar a busca de soluções para o problema da quadratura tridimensional apenas aos sub-conjuntos de velocidades mostrados nesta seção.

Na figura abaixo estão relacionados um sub-conjunto de velocidades tridimensionais correspondente aos vetores alinhados com as direções principais de um conjunto de coordenadas cartesianas, D3V6, e um sub-conjunto correspondente às diagonais de um cubo com centro na origem deste mesmo sistema de coordenadas, D3V8,

**Figura 22:** D3V6**Figura 23:** D3V8

Na figura abaixo estão relacionados um sub-conjunto de velocidades tridimensionais correspondente aos vetores paralelos às diagonais das faces do cubo acima mencionado, D3V12, com centro na origem, e outro sub-conjunto de velocidades de forma $(\pm 2a, \pm a, 0)$, D3V24,

**Figura 24:** D3V12**Figura 25:** D3V24

6.6.1 Redes Space-Filling

6.6.1.1 Redes de Segunda Ordem

A combinação do sub-conjunto D3V6 com os sub-conjuntos D3V8 e D3V12 dá origem às redes D3Q15 e D3Q19, Tabelas 28 e 29 do Apêndice B.3.1, respectivamente. Estas redes são amplamente utilizadas na simulação de escoamentos isotérmicos através dos métodos de lattice Boltzmann. Observe que a projeção de ambas estas redes em duas dimensões em planos normais às direções principais desta rede tem como resultado a D2Q9.

6.6.1.2 Redes de Terceira Ordem

Em três dimensões o número de equações aumenta mais rapidamente do que em duas. No caso de redes de terceira ordem o polinômio de Hermite $\mathcal{H}_{xyz}^{(3)}$ precisa também ter sua norma preservada, o que adiciona uma equação a mais ao sistema da quadratura em terceira ordem (em relação ao caso bidimensional). A menor rede obtida através da solução deste sistema possui três sub-conjuntos D3V6, um D3V8, um D3V12 e uma velocidade nula, tem 39 velocidades e projeção em duas dimensões com 21 velocidades, Tabela 30 do Apêndice B.3.1.

A rede D2V17, menor rede space-filling de terceira ordem em duas dimensões, Seção 6.5.1.2, é uma projeção de uma rede tridimensional de 41 velocidades formada por duas redes D3V6, duas redes D3V8 e uma rede D3V12, Tabela 31 do Apêndice B.3.1.

6.6.1.3 Redes de Quarta Ordem

Os pares de polinômios $\mathcal{H}_{xxy}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{xyy}^{(4)}$, $\mathcal{H}_{xxz}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{xzz}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{yyz}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{yzz}^{(4)}$ são idênticos pontos a ponto quando redes formadas apenas pela combinação dos sub-conjuntos D3V6, D3V8 e D3V12 são construídas, de forma análoga ao que acontecia em duas dimensões, Seção 6.5.1.3. Para que uma rede de quarta ordem completa possa ser obtida, é necessário que seja incluído no sistema da quadratura um sub-conjunto de velocidades que possua vetores não alinhados com as direções principais, com as diagonais de um cubo e de suas faces, e.g., Figura 25.

Neste trabalho foi obtida uma rede de 107 velocidades em quarta ordem, Tabela 33 do Apêndice B.3.1, composta por uma velocidade nula, três sub-conjuntos D3V6, dois D3V8, dois D3V12 e dois D3V24. A grande quantidade de combinações possíveis entre os diversos sub-conjuntos que compõem uma rede nesta ordem impede que se estabeleça com precisão o número mínimo de velocidades que esta rede pode possuir. Espera-se, todavia, que se uma rede menor que esta for encontrada, sua diferença em relação a rede de 107 velocidades será pequena.

Devido ao grande número e à variedade de vetores que compõe redes desta ordem, são previstas grandes dificuldades na definição e aplicação de condições de contorno que assegurem a continuidade de temperatura e velocidade nas fronteiras sólidas do domínio de simulação.

6.6.1.4 Redes de Quarta Ordem Incompletas

De forma análoga ao realizado na Seção 6.5.1.4, foram somadas duas a duas todas as combinações de conjuntos de polinômios de Hermite de forma $\mathcal{H}_{iii}^{(4)}$ e $\mathcal{H}_{ijj}^{(4)}$ para formar a base de polinômios discretos que poderia solucionar esta quadratura.

Equações que garantiam a norma e ortogonalidade da soma de cada um destes conjuntos foram incluídas no sistema da quadratura. Diversas combinações de redes foram procuradas de modo a minimizar o conjunto de velocidades desta ordem, capaz de simular o conjunto completo das equações de balanço até a primeira ordem de Knudsen, i.e., as equações de Navier-Stokes-Fourier.

A menor rede encontrada através deste procedimento possui 59 velocidades e é com-

posta por três sub-conjuntos D3V6, dois D3V8, dois D3V12 e uma partícula parada, Tabela 32 do Apêndice B.3.1, ou seja, não possui velocidades desalinhadas às direções principais, diagonais do cubo e das faces, conforme desejado, de forma análoga ao caso bidimensional, Seção 6.5.1.4.

6.6.2 Redes Não Space-Filling

De forma geral, sub-conjuntos de velocidades inspirados em composições de tetraedros, dodecaedros ou icosaedros poderiam ser procurados com o objetivo de minimizar o número de velocidades das redes obtidas. Decidiu-se, todavia, limitar a procura aos sub-conjuntos de redes mostrados na seção anterior de forma a facilitar a implementação numérica dos conjuntos encontrados. Redes formadas pela composições de tetraedros, dodecaedros ou icosaedros podem ser encontradas em Cools^[62] e suas referências.

6.6.2.1 Redes de Segunda Ordem

Como exemplo de uma rede de segunda ordem não-space-filling formada por um icosaedro, tem-se a rede D3V13^[47]. Esta rede não é simples de representar e programar, possuindo pequeno ganho em relação ao número de velocidades quando comparada com as redes D3Q15 e D3Q19, Seção 6.5.1.6, de muito maior valor prático.

6.6.2.2 Redes de Terceira Ordem

Observou-se, ao resolver o sistema da quadratura de terceira ordem tridimensional, que necessariamente ele precisa conter três subconjuntos distintos de velocidades. O menor destes conjuntos, formado por um sub-conjunto D3V6, um D3V8, um D3V12 e uma distribuição de moléculas parada, forma a rede mínima D3V27n, Tabela 34 do Apêndice B.3.2.

6.6.2.3 Redes de Quarta Ordem

Uma rede de 52 velocidades^[47] pode ser obtida pela resolução da quadratura nesta ordem. Todavia, como esta rede possui uma razão entre o maior e o menor módulo das velocidades de seu conjunto de $\approx 7,538$, sua aplicação a certos algoritmos é limitada, Seção 6.5.2. Quando uma velocidade nula é adicionada a este conjunto de forma a criar um parâmetro livre (o peso relacionado a esta velocidade) para ajustar esta razão, pode-se obter uma rede de 53 velocidades cuja razão entre o maior e o menor módulo das velocidades de seu conjunto é $\approx 3,317$, Tabela 36 do Apêndice B.3.2.

6.6.2.4 Redes de Quarta Ordem Incompletas

A menor rede encontrada neste trabalho que pode simular problemas não isotérmicos em três dimensões possui 33 velocidades, Tabela 35 do Apêndice B.3.2, sendo formada por dois sub-conjuntos de 6 velocidades, um de 8 e um de 12, além de uma velocidade nula.

O pequeno número de velocidades desta rede é um grande atrativo para sua aplicação. Note que a menor rede space-filling de quarta ordem incompleta aqui mostrada tem quase o dobro de velocidades, 59, Seção 6.6.1.4, e uma rede tridimensional de mesma ordem encontrada por Watari e Tsutahara^[38] é composta por 77 velocidades.

6.7 Efeitos do Truncamento da Função Distribuição de Equilíbrio

Neste trabalho, até a presente seção, considerou-se que a partir do momento em que se definia o nível de detalhamento da descrição de um fluido em um sistema, se estabelecia uma condição mínima de representação dos momentos da distribuição de equilíbrio no espaço discreto que não poderia ser violada, Seção 3.1.2. Nesta seção será considerado o caso em que esta condição mínima não é obedecida e erros são incorporados às equações de balanço. O objetivo deste estudo é entender a natureza dos erros adicionados e sua importância.

Para fazer a análise dos erros supracitados, deve ser realizada a análise de Chapman-Enskog em cada rede individualmente. Os momentos de ordem alta que são necessários à análise, mesmo que espúrios, são computados, através de um quadratura, diretamente da distribuição de equilíbrio discreta truncada até uma ordem mais baixa. As equações obtidas desta maneira devem ter os erros relacionados à discretização do espaço de velocidades incorporados.

Nas três próximas seções três redes diferentes serão analisadas em relação a seus erros de alta ordem quando fenômenos puramente difusivos, D1Q3, fenômenos isotérmicos, D2Q9, e fenômenos não-isotérmicos, D2V17, são simulados com um esquema de colisão e propagação. No Capítulo 8 estas mesmas redes serão analisadas do ponto de vista prático, através de simulações, de modo que fiquem mais claros os erros numéricos cometidos quando elas são utilizadas.

6.7.1 D1Q3

Em um domínio unidimensional, quando apenas três velocidades são utilizadas para representar o espaço de velocidades em um fenômeno puramente difusivo, obtém-se as mesmas equações de quando o espaço de velocidades não foi discretizado, Tabela 7, até quarta ordem de Knudsen. Isso acontece porque o problema é muito limitado e termos não lineares não são observados. Em ordens mais altas a forma das equações com e sem erros é muito semelhante, mas os coeficientes de transporte são bastante diferentes,

$$\begin{aligned} \partial_t \rho = & \tau \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) RT \nabla^2 \rho + \tau^3 \left(1 - \frac{3\delta t}{2\tau} + \frac{\delta t^2}{2\tau^2} \right) RT^2 \nabla^2 (\nabla^2 \rho) \\ & - 2\tau^5 \left(1 - \frac{5\delta t}{2\tau} + \frac{7\delta t^2}{3\tau^2} - \frac{\delta t^3}{\tau^3} + \frac{7\delta t^4}{24\tau^4} - \frac{\delta t^5}{240\tau^5} \right) RT^3 \nabla^2 (\nabla^2 (\nabla^2 \rho)). \end{aligned} \quad (6.34)$$

Note que o coeficiente de transporte de quinta ordem é negativo devido à contabilização do erro na análise, o que pode causar instabilidade se este termo se tornar importante, i.e., se o número de Knudsen do escoamento for muito alto. Foram também observados termos desta natureza quando outras redes, em escoamentos mais complexos fisicamente, foram utilizadas.

6.7.2 D2Q9

A rede D2Q9 e suas equivalentes em três dimensões, a D3Q15 e a D3Q19, todas de segunda ordem, são as redes mais utilizadas com o LBM para a simulação de escoamentos isotérmicos até a primeira ordem de Knudsen, fenômeno que exige a preservação de momentos de f^{eq} de até terceira ordem no espaço discreto.

Neste cenário a equação de balanço de massa, conforme foi demonstrado no Capítulo 3, não deve conter nenhum termo espúrio, já que sua derivação exige, até a primeira ordem, apenas a preservação dos momentos de ordem zero, um e dois de f^{eq} .

A equação de balanço de quantidade de movimento, entretanto, deve apresentar alguma discrepância. Se a análise de Chapman-Enskog for realizada considerando os momentos obtidos diretamente da rede D2Q9 com distribuição de equilíbrio truncada até segunda ordem, pode-se obter

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho RT \delta_{\alpha\beta}) = \\ \left(\tau - \frac{\delta t}{2} \right) (\partial_\beta (\rho RT (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)) - \partial_\beta \partial_\gamma (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)). \end{aligned} \quad (6.35)$$

Comparando este resultado com a Tabela 8 da Seção 5.1.3, pode-se observar a presença, na equação acima, do termo espúrio $\partial_\beta \partial_\gamma (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)$, cuja magnitude é importante somente

quando a velocidade do escoamento é grande. Como este método é frequentemente utilizado para a simulação de escoamentos incompressíveis, o que já pressupõe a utilização de baixas velocidades, Seção 3.1.3, este erro pode ser considerado aceitável. As redes D3Q15 e D3Q19 apresentam termos espúrios semelhantes.

Se for adotada uma distribuição de equilíbrio cuja temperatura não é constante, na tentativa de simular um escoamento não-isotérmico, verificar-se-á uma discrepância entre a equação da energia do LBM, Equação 3.47, e a equação de energia escrita para a rede D2Q9 mesmo em ordem zero^[28], de forma que uma rede como esta dificilmente poderá ser considerada confiável para a simulação de um fenômeno não-isotérmico.

6.7.3 D2V17

De forma a recuperar o conjunto completo de equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia até a primeira ordem do número de Knudsen é necessário que momentos de quarta ordem sejam corretamente representados, Seção 3.1.2. Se uma rede de terceira ordem é utilizada, momentos de quarta ordem serão incorretamente avaliados, causando erros na equação de balanço de energia que serão proporcionais a θ_0^2 , $\theta_0 u_0^2$, u_0^4 e suas derivadas, Equação 6.3. Siebert^[28] obteve a forma exata desta equação em sua tese.

A aplicabilidade desta rede a problemas não-isotérmicos não é clara pela análise simples da equação obtida. É necessário analisar o problema sendo resolvido de forma a garantir que os termos espúrios que fazem parte da equação de balanço de energia do método sejam realmente desprezíveis. Na Seção 8.1 esta rede será testada em problemas simples para comparação dos coeficientes de transporte aparente e teórico do método. A análise de seus limites de estabilidade numérica foi realizada por Siebert^[28].

Devido à dificuldade em analisar os erros exatos que foram cometidos em modelos mais complexos e à falta de generalidade que é comum destas análises, o TRT não foi analisado através da expansão de Chapman-Enskog. Da mesma forma que o caso analisado nesta seção, o TRT foi simulado com redes de diferentes ordens com o objetivo de verificar os coeficientes de transporte teóricos do método.

No próximo capítulo serão apresentadas as principais condições de contorno utilizadas no método de Boltzmann para redes e suas limitações.

7 *Condições Iniciais e de Contorno*

As condições de contorno nos métodos de lattice Boltzmann dependem principalmente do objetivo do método, i.e., que tipo de fenômeno físico quer-se representar.

Frequentemente o objetivo do usuário do método é encontrar uma solução para as equações de Navier-Stokes-Fourier em um dado problema. Neste caso as condições de contorno devem garantir a continuidade de velocidade e temperatura nas imediações das fronteiras sólidas do sistema, ou seja, nenhum tipo de efeito de escorregamento nas proximidades das fronteiras sólidas é esperado. Em alguns casos a solução encontrada através dos métodos de lattice Boltzmann pode assim ser validada através de sua comparação com soluções numéricas encontradas por outros algoritmos que estejam resolvendo diretamente as equações de Navier-Stokes-Fourier.

Neste cenário um dado problema tem geralmente condições de contorno relacionadas a pressão, temperatura, velocidade e/ou suas derivadas. Como todas estas quantidades são relacionadas à quadratura da função distribuição na fronteira, é esperado que o problema seja indeterminado por conta do infinito número de maneiras de arranjar as distribuições na fronteira com a mesma resposta em escala macroscópica.

Entretanto, se em determinado fenômeno a interação entre o fluido e as fronteiras sólidas é importante, as condições de contorno devem ser projetadas para modelar diretamente esta interação, de forma que cada partícula que chega à fronteira siga um caminho determinístico ao se afastar dela. Neste caso, quando o número de Knudsen do escoamento é alto, efeitos físicos diversos podem ser observados nas imediações da parede^[5, 6, 9], fazendo com que a solução encontrada através da aplicação do LBM possa ser validada apenas através de sua comparação direta com experimentos.

Todavia, quando o número de Knudsen tende a zero normalmente a condição de continuidade ou não-escorregamento de velocidade e temperatura nas imediações das fronteiras sólidas é observada experimentalmente. Da mesma maneira, quando um modelo qualquer de interação entre as moléculas do fluido e das paredes é aplicado ao LBM, espera-se que

a Knudsen baixo não haja escorregamento. Desta forma muitas vezes é admitida uma condição de contorno nas fronteiras sólidas baseada na interação das moléculas do fluido e da parede mesmo quando o objetivo do método é solucionar um problema a baixo número de Knudsen, evitando assim a sua indeterminação.

Neste capítulo os modelos mais comuns de interação das moléculas de um fluido com as fronteiras sólidas de um domínio, muitos deles com raízes na Teoria Cinética dos Gases, serão mostrados. Um breve resumo de como estes modelos são aplicados aos métodos numéricos mostrados nesta tese será realizado em sequência.

No LBM, como a variável sendo resolvida é a distribuição de moléculas, pode-se ter um problema indeterminado ao serem utilizados somente os campos de densidade, velocidade e temperatura para a determinação da condição inicial do sistema, de maneira análoga ao que ocorre com as condições de contorno. Quando o número de Knudsen é baixo comumente considera-se a distribuição de equilíbrio ponto a ponto uma boa estimativa da condição inicial e a indeterminação supracitada é eliminada. Quando o número de Knudsen é alto, todavia, a evolução do sistema no tempo pode ser bastante sensível às diferentes formas da distribuição de moléculas tomadas como condição inicial, Seção 8.1.2. Na Seção 7.3 uma alternativa à utilização da distribuição de equilíbrio como condição inicial do sistema será apresentada.

7.1 Modelos de Interação das Moléculas de um Fluido com as Fronteiras Sólidas de um Sistema

7.1.1 Reflexão Especular

Nesta condição de contorno as moléculas que atingem uma parede em determinado ponto retornam ao fluido com uma velocidade molecular igual à velocidade normal à parede na direção dela e uma velocidade tangencial não alterada,



Figura 26: Distribuições de moléculas refletidas especularmente.

Pode ser observado que a ausência de interação entre estas moléculas e a parede na direção tangencial a ela faz com que haja escorregamento puro destas junto a parede. Esta condição pode ser utilizada em fenômenos que mantêm uma simetria especular,

diminuindo o tamanho da malha necessária para resolver este tipo de problema, ou em associação com a condição de bounce-back para criar condições de velocidade não-nula nas fronteiras sólidas. Como cada distribuição de moléculas mantém o módulo de sua velocidade depois de interagir com a parede, o fluxo de calor, Equação 2.59, resultante da aplicação desta condição é sempre nulo.

7.1.2 Condição de Bounce-Back

Nesta condição de contorno as moléculas que atingem uma parede sólida em determinado ponto retornam ao fluido com o mesmo módulo de velocidade com que a atingem, mas na direção contrária^[15],



Figura 27: Condição de contorno de Bounce-Back.

Neste caso as partículas são refletidas de modo que a velocidade macroscópica registrada na parede é zero quando o número de Knudsen é baixo, Seção 8.5. Esta é a condição de contorno mais simples de ser implementada em uma rede regular formada por vetores limitados às direções principais e diagonais da malha, sendo amplamente utilizada em uma variedade de problemas fluidodinâmicos, especialmente em simulações de fenômenos isotérmicos.

O fluxo de calor, Equação 2.59, resultante de sua aplicação é nulo devido a conservação do módulo de sua velocidade antes e depois da interação com a parede, limitando bastante a aplicação desta condição quando fenômenos não-isotérmicos são considerados.

7.1.3 Condição de Equilíbrio ou Difusa

Nesta condição de contorno as partículas que atingem uma parede qualquer retornam ao fluido com uma distribuição de moléculas correspondente a distribuição de equilíbrio com a temperatura e velocidade da parede, i.e., admite-se que as moléculas do fluido que interagem com a parede entram em equilíbrio com ela,



Figura 28: Condição de contorno de equilíbrio ou difusa.

Diversas formulações para esta condição de contorno foram adotadas por diferentes autores^[21, 63]. Sua aplicação ao LBM é útil na imposição de uma condição de contorno de temperatura e velocidades constantes nas fronteiras sólidas em fenômenos não isotérmicos ou de imposição de velocidade em escoamentos isotérmicos. Apenas no limite de baixo número de Knudsen essa condição de contorno não apresenta escorregamento em relação a velocidade e a temperatura.

7.1.4 Reconstrução da Função Distribuição nas Fronteiras

Generalizando a condição de equilíbrio apresentada na seção anterior, pode-se escrever uma função distribuição f em um método de lattice Boltzmann como uma soma de duas distribuições, uma f^{eq} dependente dos momentos de baixa ordem de f , i.e., densidade, velocidade e temperatura, e uma f^{neq} dependente dos momentos de alta ordem de f , i.e., tensão viscosa, fluxo de calor, ...,

$$f_i = f_i^{eq} + f_i^{neq} = \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_n^{eq}(\rho, u_\alpha, T) \mathcal{H}_n(\xi_{oi}) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} a_n^{neq}(\tau_{\alpha\beta}, q_\alpha, \dots) \mathcal{H}_n(\xi_{oi}). \quad (7.1)$$

Neste caso a temperatura e a velocidade do fluido na fronteira sólida são impostos frequentemente pela condição de contorno. Os momentos de alta ordem são determinados através da extrapolação dos dados dos sítios mais próximos à fronteira e a densidade é determinada pela resolução da equação de balanço de massa ou quantidade de movimento ou também por extrapolação.

Eventualmente pode-se impor como condição de contorno na fronteira sólida o fluxo de calor ou a tensão viscosa, extrapolando-se a partir da região de fluido próxima à fronteira o valor da temperatura ou da velocidade macroscópica quando necessário.

7.2 Aplicação de Condições de Contorno aos LBMs

As condições de contorno nos métodos de lattice Boltzmann são fundamentais para a resolução da maioria dos problemas de interesse em engenharia.

Diversas formulações baseadas nos modelos físicos/matemáticos acima foram propostas para impor esta velocidade quando fenômenos isotérmicos são representados, umas com o objetivo de evitar o escorregamento nas imediações da parede de modo a simular o escoamento a baixo número de Knudsen e outras com o objetivo de representar com mais acurácia a interação entre as paredes sólidas e o fluido, de maneira a representar melhor o escoamento a alto número de Knudsen^[21, 63].

No esquema de colisão e propagação em um problema isotérmico, por exemplo, impõe-se velocidade macroscópica do fluido na fronteira sólida como nula quando se acompanha uma distribuição de moléculas durante sua etapa de propagação e inverte-se sua velocidade todas as vezes que esta distribuição interage com as fronteiras sólidas de um certo domínio, i.e., aplica-se a condição de bounce-back intuitivamente.

Para impor uma velocidade não-nula a parede, Zou e He^[64] propuseram um modelo em que a distribuição de não-equilíbrio era refletida obedecendo a condição de bounce-back, mas a distribuição de equilíbrio era determinada de acordo com a velocidade macroscópica que se queria impor.

Estas condições, de aplicação trivial quando o esquema de colisão e propagação é utilizado, fizeram muito sucesso entre projetistas cujo objetivo era simular a equação de Navier-Stokes em geometrias complexas, e.g., a indústria automobilística e áreas ligadas a simulação de escoamentos em meios porosos^[15, 19, 64].

Em problemas não isotérmicos foram testadas inicialmente condições similares às dos problemas isotérmicos. O resultado, entretanto, foi menos animador, já que, em geral, elas foram formuladas em bases empíricas, considerando frequentemente o LBM como um método lagrangiano, de forma que estas condições são frequentemente restritas à rede utilizada pelo método ou, o que é mais grave nas aplicações aqui consideradas, simplesmente não foram projetadas para serem aplicadas a situações em que o balanço de energia na fronteira é importante.

As mais simples delas, i.e., as de bounce-back e de reflexão especular, por exemplo, representam muito bem um fluxo de calor nulo nas fronteiras do sistema, mas falham em representar um fluxo de calor constante diferente de zero ou temperatura fixa devido à limitação de seu modelo, onde cada uma das distribuições de moléculas conserva seu módulo de velocidade durante a sua interação com as fronteiras sólidas do domínio.

Além disso, o uso de um grande número de velocidades discretas dificulta o acompanhamento de todas as suas distribuições individualmente, e em alguns casos pode até mesmo impedir que condições de natureza essencialmente lagrangiana sejam aplicadas, pois as partículas que interagem com a parede podem retornar a um ponto do domínio

simplesmente inexistente. Ademais, diferentes distribuições de moléculas chegam a diferentes pontos das fronteiras sólidas em tempos diversos, dificultando a contabilização das propriedades macroscópicas do fluido nas fronteiras.

Percebe-se que, Seção 2.42, o módulo das velocidades das distribuições de moléculas que interagem com as paredes sólidas deve mudar de alguma forma ou então, o que faz mais sentido físico, elas devem ser refletidas em diversas direções com diferentes módulos de velocidade para que algum fluxo de calor seja observado nesta interação, e.g., Figura 28.

Ao mesmo tempo, ao final da interação fluido/parede, as moléculas do fluido devem adquirir a velocidade média da parede ou uma velocidade próxima a esta quando existe escorregamento. A combinação destes dois efeitos físicos é bastante difícil de modelar simplesmente pela consideração de como algumas poucas distribuições de moléculas estão interagindo com a parede. É mais simples, principalmente do ponto de vista teórico, considerar este problema no espaço contínuo de velocidades.

Desta maneira, considera-se que as condições de contorno modeladas pensando no LBM de um ponto de vista essencialmente lagrangiano passaram a não ser suficientes para representar o processo de interação das partículas com as paredes quando fenômenos não isotérmicos são simulados. Uma alternativa que pode ser utilizada para resolver este problema é reconstruir a distribuição de moléculas na fronteira a partir do conhecimento de seus momentos, Seção 7.1.4.

McNamara e colaboradores^[65] fez isso pela primeira vez criando sítios-fantasma na parede sólida conectando os nós do domínio e as direções de propagação da rede. Os momentos conhecidos destes sítios-fantasma (velocidade e temperatura) foram diretamente substituídos na distribuição de equilíbrio, enquanto os momentos não conhecidos (densidade, tensão, fluxo de calor, ...) foram extrapolados utilizando um esquema de diferenças finitas.

As distribuições encontradas foram propagadas de acordo com o esquema de colisão e propagação usual. Os resultados encontrados por eles e, mais tarde, também por Watari e Tsutahara^[38] utilizando o mesmo esquema, mostram excelente continuidade dos valores das variáveis macroscópicas do problema nas imediações das fronteiras sólidas.

Todavia, conforme esperado de um esquema tão simples de imposição da densidade, foi observado que a massa não se conservava na grande maioria dos testes realizados. Nas simulações realizadas durante este trabalho foram observados erros da ordem de até 10% em relação à massa total inicial, McNamara e colaboradores^[65], em suas simulações, acusam um erro menor do que 1% enquanto Watari e Tsutahara ignoraram este problema.

Para impor esta condição nos métodos de diferenças finitas utilizados nesta tese, exatamente no ponto limite entre o fluido e a parede sólida é alocado o último nó de fluido do domínio. Neste ponto os momentos de alta ordem desconhecidos da função distribuição até a ordem da rede utilizada nas simulações são determinados no sítio a partir da informação dos fluidos mais próximos à fronteira, utilizando um esquema de extrapolação.

Para determinar a densidade do fluido na fronteira, diversas alternativas podem ser utilizadas. O modo mais simples de se determinar esta densidade é através da extrapolação do valor da densidade dos sítios vizinhos, McNamara e colaboradores^[65]. Nesta tese, todavia, diversos outros modos foram testados,

- resolver o balanço de massa no sítio da fronteira contabilizando todas as distribuições de moléculas entrando e saindo do último sítio, i.e., utilizando um esquema de volumes finitos cuja entrada são as distribuições de moléculas nos sítios próximos a fronteira e cuja saída é a densidade na parede que conserva a massa do sistema.
- resolver a equação de balanço de massa do contínuo utilizando um esquema de volumes finitos nas imediações do contorno.
- resolver a equação de balanço de massa do contínuo utilizando um esquema Runge-Kutta de segunda ordem nas imediações do contorno.
- considerar que $dP/dx = 0$ onde x é a direção normal a fronteira, condição comum na solução da equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis. Esta condição foi utilizada em escoamentos isotérmicos como teste.
- resolver a equação de Navier-Stokes nos sítios da fronteira para um fluido compressível de modo a obter a pressão na fronteira.

Certamente é interessante manter a consistência do modelo desenvolvido, i.e., é muito melhor que a condição utilizada se baseie apenas nas distribuições de moléculas no contorno, sem a necessidade de se recorrer às equações de balanço macroscópicas para se fazer isso. Todavia, uma vez que as primeiras alternativas falharam em conservar a massa no contorno, optou-se pela diversificação dos métodos.

Nenhuma destas tentativas manteve a conservação da massa no sistema. Apesar de uns métodos comprometerem mais ou menos esta conservação e a estabilidade do algoritmo, nenhum deles foi considerado adequado para a simulação de escoamentos de fluidos. Desta forma, o esquema de McNamara e colaboradores^[65] foi mantido nas simulações do Capítulo 8 apenas para que o algoritmo numérico do LBM pudesse ser avaliado.

Pensou-se então que talvez os esquemas de diferenças finitas é que provocassem este problema de falta de conservação da massa. Todavia, testes em redes periódicas com grandes gradientes não mostraram nenhum problema de conservação nem da massa, nem da quantidade de movimento, nem da energia, pelo menos não globalmente. Ademais, alguns dos métodos aqui utilizados poderiam ter sido derivados a partir de uma formulação conservativa em volumes finitos.^[51]

7.3 Condições Iniciais

Comumente são utilizadas como condição inicial de um domínio de simulação nos métodos de lattice Boltzmann uma distribuição de equilíbrio ajustada com os dados de densidade, velocidade e temperatura do fenômeno considerado, i.e., $f = f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, T)$. Em problemas a alto número de Knudsen, todavia, a evolução do método de lattice Boltzmann no tempo pode ser muito sensível à condição inicial utilizada, Seção 8.1.2, de forma que passa a ser mandatório para a correta descrição da evolução do sistema nesta escala que uma aproximação de ordem mais alta em relação a Knudsen seja adotada para a distribuição de moléculas inicial^[66].

A distribuição de moléculas f em um ponto pode ser escrita e calculada como, Seção 3.1.1, Equação 3.8,^[66]

$$f = f^{eq} + Knf^{(1)} + Kn^2f^{(2)} + Kn^3f^{(3)} + Kn^4f^{(4)} + \dots \quad (7.2)$$

Uma vez que todo o campo de densidade, velocidade e temperatura é dado, espera-se que f possa ser calculado a partir de suas diferentes correções em relação ao número de Knudsen, $f^{(n)}$, uma vez que elas dependem apenas das derivadas das distribuições de ordens mais baixas, o que, quando escrito recursivamente, significa que elas dependem apenas da distribuição de equilíbrio e suas derivadas de diversas ordens.

Considere, por exemplo, a análise de Chapman-Enskog do esquema de colisão e propagação, Equação 5.6, e admita que o espaço de velocidades não foi ainda discretizado (em espaços discretizados a extensão da análise é trivial). Neste caso as diferentes correções

nas diversas ordens de Knudsen podem ser escritas como,

$$f^{eq} = \frac{n}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right) \quad (7.3)$$

$$\begin{aligned} f^{(1)} &= -\partial_0 f^{eq} - \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{eq} \\ &= -(\partial_0 \rho) \frac{\partial f^{eq}}{\partial \rho} - (\partial_0 \mathbf{u}) \cdot \frac{\partial f^{eq}}{\partial \mathbf{u}} - (\partial_0 T) \frac{\partial f^{eq}}{\partial T} - \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{eq} \end{aligned} \quad (7.4)$$

$$\begin{aligned} f^{(2)} &= -\partial_1 f^{eq} - \partial_0 f^{(1)} - \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*} f^{(1)} \\ &= -(\partial_1 \rho) \frac{\partial f^{eq}}{\partial \rho} - (\partial_1 \mathbf{u}) \cdot \frac{\partial f^{eq}}{\partial \mathbf{u}} - (\partial_1 T) \frac{\partial f^{eq}}{\partial T} \\ &\quad + (\partial_0 + \xi_\alpha^* \partial_{\alpha^*}) \left((\partial_0 \rho) \frac{\partial f^{eq}}{\partial \rho} + (\partial_0 \mathbf{u}) \cdot \frac{\partial f^{eq}}{\partial \mathbf{u}} + (\partial_0 T) \frac{\partial f^{eq}}{\partial T} + \xi_{\beta^*} \partial_{\beta^*} f^{eq} \right) \end{aligned} \quad (7.5)$$

onde, naturalmente, todas as distribuições mostradas dependem de $\mathbf{x}$, $\boldsymbol{\xi}$ e t e a densidade, velocidade e temperatura dependem de $\boldsymbol{\xi}$ e t . Uma vez que a análise de Chapman-Enskog é realizada, todos os termos da equação acima podem ser avaliados, lembrando que a derivada temporal e a espacial são comutativas, mas os operadores temporais não o são^[26].

No método de Runge-Kutta de segunda ordem estas mesmas distribuições podem ser calculadas através das Eqs. 5.43 e 5.42, baseadas na Equação 5.41.

8 *Resultados*

No decorrer dos capítulos iniciais desta tese uma série de questões foram formuladas sobre o comportamento dos métodos de lattice Boltzmann quando diferentes discretizações espaço-temporais e do espaço de velocidades são aplicadas a diferentes modelos de colisão em ordens crescentes do número de Knudsen.

No âmbito teórico, a análise de Chapman-Enskog foi utilizada extensivamente para prever o comportamento do fluido nestas diferentes escalas. O objetivo primeiro deste capítulo é validar as análises realizadas através da simulação de fenômenos físicos simplificados, eliminando qualquer influência das condições de contorno pela utilização de malhas periódicas, Seções 8.1 e 8.2.

Existem casos, todavia, que a análise de Chapman-Enskog não é facilmente aplicada, Seções 5.5 e 5.6, pois os erros relacionados à discretização espaço-temporal do método não podem ser somados de maneira simples para que sua influência seja determinada analiticamente. Nestes casos é preciso que os coeficientes de transporte do fluido simulado sejam estimados de alguma outra forma, e.g., através da análise de Chapman-Enskog destes modelos de colisão no espaço contínuo, Capítulo 3, e comparados com os resultados das simulações de modo a avaliar sua acurácia. Este é o segundo objetivo deste capítulo.

Ao final deste capítulo algumas simulações com aplicação prática mais evidente foram realizadas de forma a analisar o comportamento do LBM em situações de baixo número de Knudsen. O objetivo aqui foi avaliar o LBM como uma ferramenta para simular escoamentos não-isotérmicos com foco em suas características mais peculiares, de maneira a tornar possível sua comparação com outros métodos numéricos desenvolvidos para a simulação de problemas na escala das equações de Navier-Stokes. Dentro deste objetivo serão salientados os principais desvios esperados entre a solução das equações de Navier-Stokes e a solução da equação de transporte de Boltzmann quando o número de Knudsen é finito.

8.1 Medição dos Coeficientes de Transporte

8.1.1 Difusão de um Degrau

8.1.1.1 Formulação do Problema

Uma forma simples de testar a acurácia da análise de Chapman-Enskog em relação a sua previsão dos coeficientes de transporte dos fluidos simulados e à estabilidade numérica dos métodos desenvolvidos é medir a difusividade de densidade, quantidade de movimento ou energia em um domínio unidimensional em equilíbrio mecânico, alinhado com uma certa direção x e dividido em duas câmaras com densidades, velocidades na direção y ou temperaturas diferentes, representadas pela função genérica $g(x, t)$ de acordo com a figura abaixo,

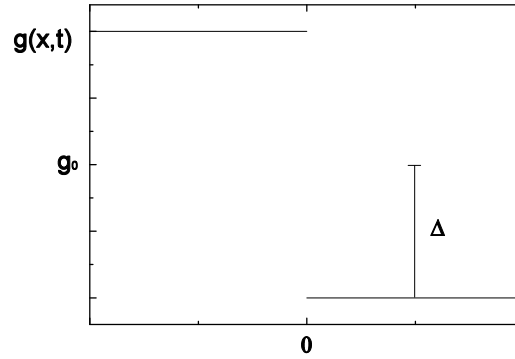


Figura 29: Difusão de um degrau de uma propriedade.

A evolução temporal da difusão deste degrau pode ser medida e, através dela, determinados o valor da difusividade de massa em fenômenos puramente difusivos, a viscosidade cinemática quando o degrau se refere à velocidade do fluido na direção y e esta velocidade é pequena ou a difusividade térmica quando o degrau é formado por duas temperaturas diferentes.

Admitindo que a equação abaixo é representativa deste fenômeno,

$$\frac{\partial g(x, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 g(x, t)}{\partial x^2}, \quad (8.1)$$

pode-se obter, quando as seguintes condições de contorno são impostas:

$$g(x, 0) = g_0 + \Delta, \quad \forall x < 0, \quad g(x, 0) = g_0 - \Delta, \quad \forall x > 0, \quad (8.2)$$

$$g(-\infty, t) = g_0 + \Delta, \quad g(0, t) = g_0, \quad g(\infty, t) = g_0 - \Delta, \quad (8.3)$$

a solução analítica abaixo,

$$g(x, t) = g_0 - \Delta \operatorname{Erf} \left[\frac{x}{2(\alpha t)^{1/2}} \right], \quad (8.4)$$

onde Erf é a função erro. O coeficiente de difusividade α pode ser medido através do ajuste da equação acima à função $g(x, t)$ determinada através de simulação.

De modo a garantir que esta solução seja representativa das simulações realizadas, utiliza-se uma malha bastante extensa e periódica, eliminando completamente a influência das condições de contorno do método na solução encontrada em troca de um tempo de processamento maior.

8.1.1.2 Validação da Análise de Chapman-Enskog no Esquema de Colisão e Propagação

Inicialmente foram medidos os coeficientes de transporte em um escoamento não-isotérmico representado por um esquema de colisão e propagação, Seção 5.1.3, Eqs. 5.16 e 5.17, quando $\tau = \tau_1 = \tau_2 = 1$. Na figura abaixo são mostradas as relações entre a viscosidade cinemática e $\theta = \frac{RT}{RT_0} - 1$, Seção 6.3, e entre a difusividade térmica e θ quando as redes D2V17, D2V25w6 e D2V37 são empregadas,

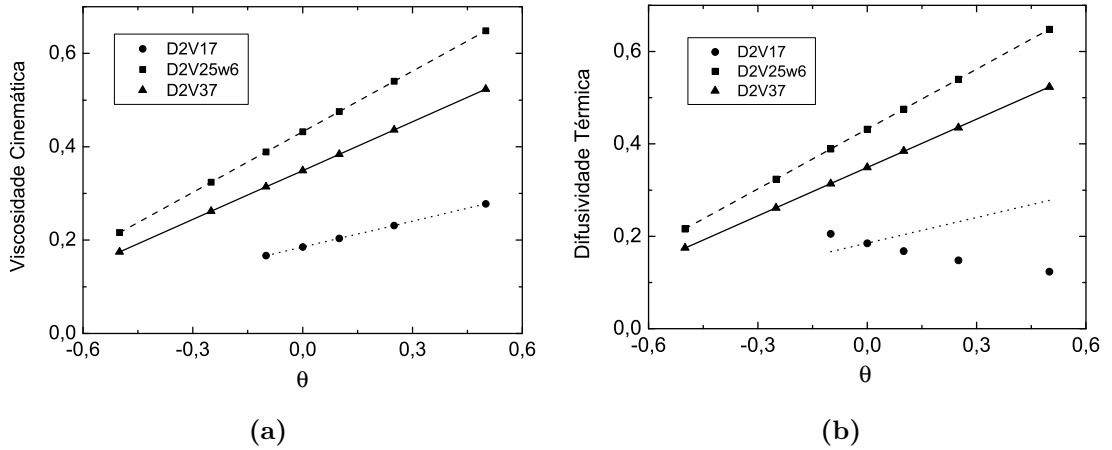


Figura 30: Coeficientes de transporte medidos em diferentes redes utilizando o esquema de colisão e propagação. Os pontos são resultados de simulações numéricas e as linhas a previsão realizada pela análise de Chapman-Enskog.

Ambos estes coeficientes de transporte foram medidos em unidades de rede. Note que o fator de escala nas diferentes redes foi definido pela relação $a = \frac{\delta x / \delta t}{\sqrt{RT_0}}$, Equação 6.13. Quando $\delta x = 1$ e $\delta t = 1$ (em unidades de rede), pode-se encontrar RT_0 a partir do fator de escala a determinado pelo processo de discretização do espaço de velocidades, Seção

6.3. Como este fator é característico de cada rede, Apêndice B.2, existe uma pequena diferença entre os valores dos coeficientes de transporte em cada uma delas quando um mesmo θ é utilizado, Seção 5.1.3.

Analisando os gráficos acima percebe-se que as redes D2V25w6 e D2V37 apresentam grande concordância entre os resultados numéricos e analíticos, tendência que se repetiu quando as redes D2V53 e D2V81 foram testadas. Entretanto, a rede D2V17 apresenta grande discrepância entre os resultados das simulações e os resultados analíticos no caso da difusividade térmica. Esta discrepância é explicada pelo modo como foi realizada a análise de Chapman-Enskog, Seção 5.1.3, que admitiu que todos os momentos de até quarta ordem eram iguais no espaço discreto e no espaço contínuo.

Siebert^[28] mostrou que quando esta análise é realizada considerando os momentos de f^{eq} discretos especialmente para a rede D2V17, Seção 6.7.3, pode-se prever com exatidão a dependência da difusividade térmica em relação a temperatura, corrigindo o resultado analítico mostrado acima. Ainda assim, a equação de balanço de energia para a rede D2V17 em primeira ordem de Knudsen apresenta diversos termos espúrios que podem influenciar significativamente o comportamento do fluido simulado em baixa ordem de Knudsen.

A dependência dos coeficientes de transporte deste fluido em função do tempo de relaxação τ quando $\theta = 0$ é mostrada na figura abaixo, Eqs. 5.16 e 5.17,

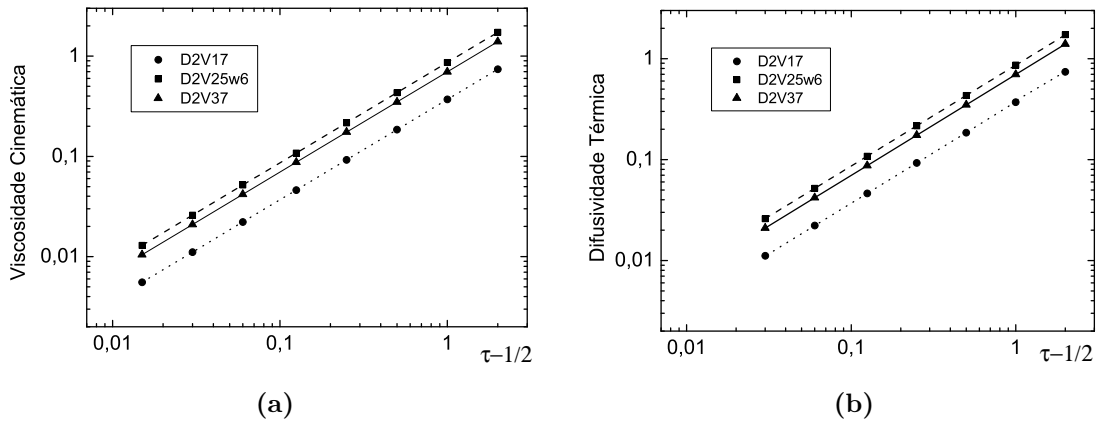


Figura 31: Coeficientes de transporte medidos em diferentes redes utilizando o esquema de colisão e propagação. Os pontos são resultados de simulações numéricas e as linhas a previsão realizada pela análise de Chapman-Enskog.

Esta comparação mostrou uma excelente concordância entre os resultados numéricos e analíticos em uma ampla faixa de parâmetros. Diferenças entre os coeficientes medidos

e os teóricos foram observadas apenas quando a viscosidade ou a difusividade térmica era muito baixa, causando problemas de instabilidade nos métodos devido à dissipação muito lenta dos erros numéricos, ou quando este coeficiente de transporte era muito alto e efeitos físicos relacionados a um número de Knudsen finito se tornavam importantes.

Nie e colaboradores^[67] mediram a viscosidade cinemática de um fluido quando eram utilizadas, em um escoamento isotérmico, as redes D2V9 e D2V17, em uma condição de velocidade na direção x constante e não nula. Os resultados encontrados por eles chamam a atenção pela constatação da quebra de invariância galileana nas simulações realizadas com a rede D2Q9. Conforme discutido na Seção 6.7.2, esta quebra é esperada quando a velocidade de translação do domínio cresce, aumentando o erro relacionado à discretização do espaço de velocidades na equação de balanço de quantidade de movimento do método a baixo número de Knudsen.

Os mesmos testes foram realizados em um modelo de colisão TRT utilizando um esquema de colisão e propagação. A excelente concordância entre os resultados analíticos e numéricos em redes de alta ordem valida a análise de Chapman-Enskog realizada, Seção 5.2. No gráfico abaixo é mostrada a variação da viscosidade cinemática em função do número de Prandtl quando a difusividade térmica do fluido simulado é constante,

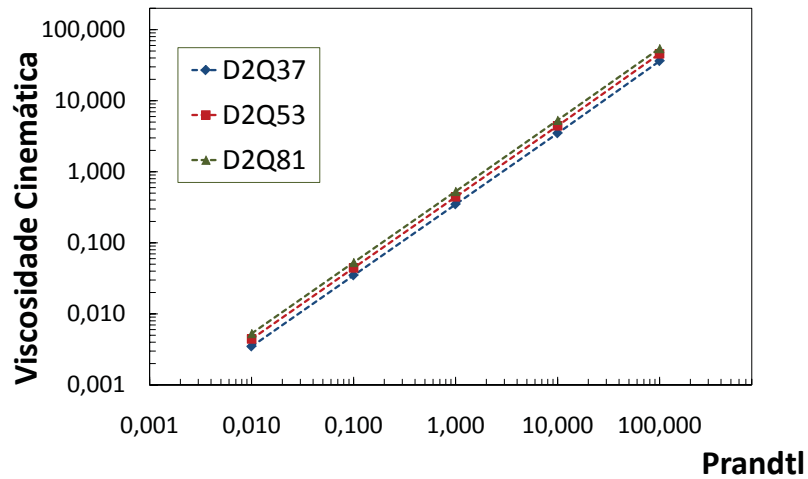


Figura 32: Viscosidade cinemática medida em relação ao número de Prandtl do fluido, comparada a previsão analítica realizada (retas).

Note que como os dois fenômenos difusivos aqui mostrados, i.e., difusão da quantidade de movimento e da energia, têm escalas temporais diferentes quando o número de Prandtl é diferente de um, são esperados efeitos relacionados a instabilidades numéricas a baixo coeficiente de transporte e efeitos de número de Knudsen finito a alto coeficiente de transporte em duas escalas.

8.1.2 Difusão de uma Onda Sinusoidal

8.1.2.1 Formulação do Problema

O problema acima é bastante útil para comparar os resultados da análise de Chapman-Enskog e os coeficientes de transporte aparentes medidos nas simulações quando efeitos dispersivos estão presentes nos métodos numéricos utilizados. Existe porém uma forma alternativa de realizar esta medição que pode ser implementada numericamente com uma grande facilidade, automatizando o cálculo destes coeficientes.

Considere a difusão de uma propriedade $g(x, t)$ regida pela equação abaixo,

$$\frac{\partial g(x, t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^{\infty} A_i \frac{\partial^{2i} g(x, t)}{\partial x^{2i}}, \quad (8.5)$$

Onde A_i são coeficientes de difusividade relacionados às derivadas espaciais de ordem $2i$. A equação acima foi assim definida para que os resultados das análises de Chapman-Enskog resumidos nas Tabelas 7, 9 e 10 pudessem ser devidamente testados. Se o domínio de solução desta equação for periódico, pode-se expandir a função $g(x, t)$ em séries de Fourier como

$$g(x, t) = a_0(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n(t) \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) + b_n(t) \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right), \quad (8.6)$$

onde L é o comprimento do domínio. Substituindo a equação acima na Equação 8.5 e utilizando as propriedades de ortogonalidade das séries de Fourier, pode-se resolver a equação resultante quando condições iniciais apropriadas são fornecidas. Considerando a onda sinusoidal abaixo como condição inicial,

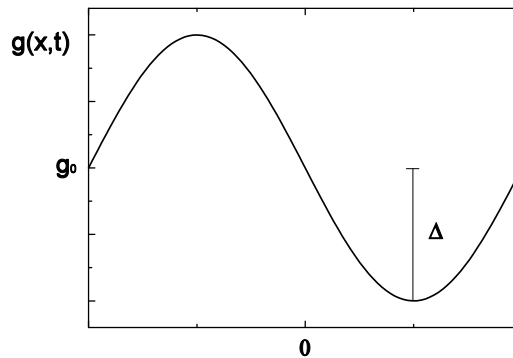


Figura 33: Difusão de uma onda sinusoidal.

onde Δ é o desvio máximo entre $g(x, t)$ e a média de $g(x, t)$ no domínio, g_0 , pode-se

obter

$$a_0(t) = g_0, \quad (8.7)$$

$$a_n(t) = 0 \quad \forall n, \quad (8.8)$$

$$b_1(t) = \Delta \exp \left(\sum_{i=1}^{\infty} (-1)^i A_i \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{2i} t \right), \quad (8.9)$$

$$b_n(t) = 0 \quad \forall n \neq 1, \quad (8.10)$$

ou seja,

$$g(x, t) = g_0 + \Delta \exp \left(\sum_{i=1}^{\infty} (-1)^i A_i \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{2i} t \right) \sin \left(\frac{2\pi x}{L} \right). \quad (8.11)$$

Esta equação pode ser rearranjada da seguinte forma,

$$\alpha = \frac{1}{t} \ln \left(\frac{\Delta \sin \left(\frac{2\pi x}{L} \right)}{g(x, t) - g_0} \right), \quad (8.12)$$

onde $\alpha = \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{(i-1)} A_i \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{2i}$.

Através da equação acima pode ser encontrada a difusividade α da propriedade $g(x, t)$ em função ao tempo se $g(x, t)$ permanecer com a forma de um seno, o que aconteceu sempre que este algoritmo numérico era convergente. Para que isto seja realizado considera-se teoricamente que a cada passo de tempo uma nova rede foi iniciada com um novo Δ correspondente ao valor de $g(x, t) - g_0$ no ponto $x = L/4$, de forma que a equação acima pode ser escrita como

$$\alpha = \frac{1}{\delta t} \ln \left(\frac{g(L/4, t) - g_0}{g(L/4, t + \delta t) - g_0} \right), \quad (8.13)$$

onde δt é o passo de tempo do método e a difusividade é medida exatamente no ponto de pico da onda sinusoidal.

8.1.2.2 Validação da Análise de Chapman-Enskog em Alta Ordem de Kn

Considerando um fenômeno puramente difusivo, a rede D1V11, de sexta ordem, Tabela 11, foi utilizada em conjunto com um esquema de Runge-Kutta de segunda ordem para a derivada material, Seção 5.6, para simular a difusão de massa com condição inicial de distribuição sinusoidal em uma malha composta por 1024 nós. A análise de Chapman-Enskog deste método considerando os momentos de f^{eq} desta rede até a ordem 11 do número de Knudsen foi realizada.

Nos gráficos abaixo é mostrada a evolução temporal da difusividade mássica medida, i.e., α , em simulações cuja condição inicial é uma função sinusoidal da massa, sendo a função distribuição no início destas simulações determinada pela Equação 7.2 da Seção

7.3, em aproximações de ordem zero, f_0 , até quatro, f_4 . São mostradas também nos gráficos abaixo as previsões teóricas dos valores de α em ordens crescentes do número de Knudsen, entre primeira, Kn_1 , e décima primeira ordens, Kn_{11} ,

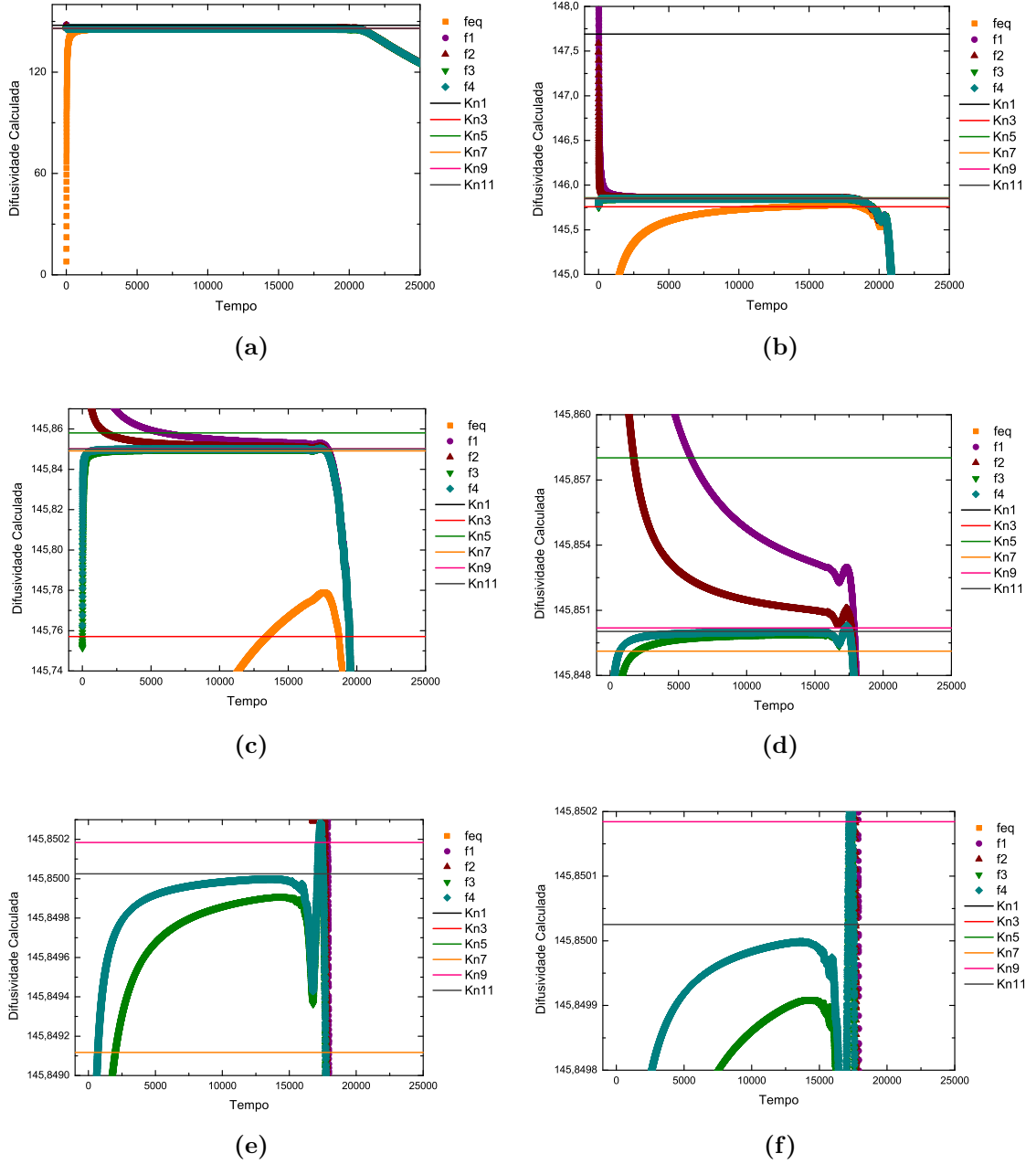


Figura 34: Medição da difusividade mássica em função do tempo em um fenômeno puramente difusivo simulado em uma rede D1V11 com um método de Runge-Kutta de segunda ordem considerando diferentes condições iniciais. Resultados da análise de Chapman-Enskog em ordens crescentes são também mostrados.

O número de Knudsen neste problema, determinado pela relação $Kn = \alpha/(Lc_S)$, Equação 3.7, foi tomado como igual a 0,016. Todos os gráficos acima mostrados referem-

se ao mesmo conjunto de simulações, com escala em y detalhada crescentemente.

Na Figura 34a percebe-se que de maneira geral todas as simulações realizadas convergem aproximadamente para um mesmo ponto. A partir do passo de tempo 20000, porém, todas elas tendem a desviar do patamar previsto. Isto acontece apenas porque a onda difundiu tanto que o erro de arredondamento do tipo real utilizado no algoritmo numérico passou a ser importante, ver Equação 8.13.

Na Figura 34b o gráfico é aproximado, no eixo y , para o intervalo entre 145 e 148. Percebe-se nitidamente que as simulações realizadas desviam da previsão teórica de primeira ordem de Knudsen, $Kn1$, neste gráfico. Pode ser observado também que as condições iniciais considerando termos de ordem mais alta em Knudsen convergem muito mais rapidamente para próximo dos valores teóricos previstos em alta ordem de Knudsen do que a condição inicial equivalente a distribuição de equilíbrio.

Nas Figs. 34c, 34d, 34e e 34f aumenta-se ainda mais a aproximação no eixo y para a região próxima da previsão teórica de ordem 11. Percebe-se com clareza que previsões teóricas em ordens subsequentes de aproximação em Knudsen aproximam-se com precisão crescente dos resultados das simulações realizadas. Além disso, percebe-se que quanto maior a ordem da distribuição de moléculas considerada como condição inicial, também maior é a rapidez com que a simulação converge para os valores teóricos previstos.

Estes mesmos testes foram realizados com o método de Runge-Kutta de quarta ordem, Seções 5.6 e 5.7.3, Tabela 10, e com o esquema de colisão e propagação, Seção 5.1.3, Tabela 7, utilizando tanto a rede D1V11 quanto a rede D1V3, Seção 6.7.1. Os resultados de todos estes testes confirmaram as conclusões acima discutidas e reafirmaram a importância da condição inicial da distribuição de moléculas na modelagem de um escoamento a número de Knudsen finito.

Quando é utilizado um esquema de colisão e propagação, neste caso, foi observado que quando o valor de τ é igual a δt as correções de alta ordem se anulam, ver Tabela 7. Foi verificado então através de simulação que a difusividade medida nesta situação realmente dependia somente da correção de primeira ordem e convergia para o valor teórico em poucos passos de simulação. Em determinadas situações, i.e., quando o objetivo é resolver um problema a baixo número de Knudsen, o ajuste dos parâmetros de determinados métodos pode ser realizado de forma que as correções de alta ordem em Knudsen sejam pequenas ou nulas, conforme foi realizado neste exemplo.

8.1.2.3 Coeficientes de Transporte em Métodos Numéricos Desacoplados

Depois de validada a análise de Chapman-Enskog nos exemplos de aplicação anteriores, procurou-se, no problema abaixo, avaliar a diferença entre os diversos métodos de diferenças finitas desacoplados, Seção 5.5.2, e o esquema de colisão e propagação. Como estes métodos não podem ser analisados facilmente através da expansão de Chapman-Enskog, Seção 5.7, considera-se que o fluido representado por eles tem os mesmos coeficientes de transporte do contínuo, Capítulo 3, e.g., no modelo BGK, a viscosidade cinemática é dada por $\nu = \tau RT$.

Inicialmente foi utilizado um esquema de Runge-Kutta de segunda ordem, Seção 5.5.2, para a discretização temporal, aplicado a uma rede D1V7, de quarta ordem, Tabela 11. Diversos esquemas de diferenças finitas foram utilizados para a discretização espacial da malha, cujo comprimento foi tomado como constante, $L = 1$. Para que todos os esquemas aqui descritos pudessem ser devidamente comparados, foi tomada uma mesma temperatura de referência $RT_0 = 1$ em todos eles.

Enquanto no esquema de colisão e propagação e nos esquemas de discretização da derivada material, Seção 5.6, o fator de escala de a é uma constante, já que a etapa de propagação das partículas deve levá-las exatamente a um nó da rede, nos métodos de diferenças finitas este valor pode ser ajustado, Seções 5.5.2 e 6.3, i.e., no esquema de colisão e propagação,

$$\xi_{0i} = \frac{\xi_i}{\sqrt{RT_0}} = a e_{0i} \quad (8.14)$$

onde e_{0i} são vetores cujas componentes são inteiras. Nos métodos de diferenças finitas isso não é necessário, de maneira que, neste problema,

$$CFL = \frac{Nx \delta t |\xi|}{L}. \quad (8.15)$$

Nas simulações aqui realizadas o passo de tempo do método, $\delta t = 0,001$, foi tomado como constante, de forma que quando Nx foi variado ajustou-se o valor de δx , já que ξ também é constante. Os resultados destas simulações estão resumidos na figura abaixo,

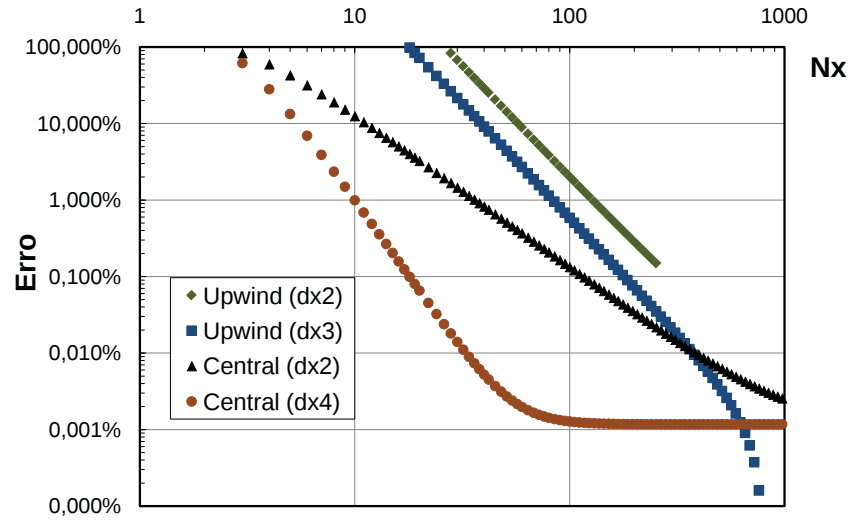


Figura 35: Comparação entre diversos esquemas de diferenças finitas para a discretização espacial quando é utilizado um esquema de Runge-Kutta de segunda ordem para a discretização temporal.

Os expoentes de variação do erro em relação ao número de pontos da rede foi 2, 9, 2, 983, 1, 969 e 3, 773 nos esquemas de upwind de ordem dois e três e nos esquemas de diferenças centrais de ordem dois e quatro respectivamente. Note que o erro nos esquemas de diferenças centrais foi menor do que os esquemas upwind em uma ampla faixa de valores, embora ambos apresentem erros bastante significativos em grande parte das simulações realizadas, erros estes que estão relacionados à grande difusão numérica característica destes esquemas^[51].

Pode ser observado ainda que o esquema de diferenças centrais de quarta ordem apresenta erro constante a partir de $N_x = 100$. A diferença entre os valores simulados e a previsão teórica, neste caso, pode estar relacionada a efeitos de alta ordem de Knudsen presentes nas simulações, mas não levados em conta na previsão teórica.

O mesmo experimento foi realizado com o método de Runge-Kutta de quarta ordem, Seção 5.5.2, e com passos de tempo menores. Os resultados não melhoraram significativamente em relação aos acima mostrados, indicando que os erros na discretização espacial são mais importantes do que os erros na discretização temporal. A estabilidade porém, foi maior, padrão que também se repetiu em outros testes realizados.

Para que estes resultados fossem comparados quantitativamente com o esquema de colisão e propagação foi escolhida esta mesma rede, D1V7, simulando-se um fluido de mesma difusividade térmica em duas situações com 100 pontos na malha e com 20 pontos na malha, respectivamente, utilizando diversos métodos diferentes,

Esquema de Colisão e Propagação	n_x	δt_{max}	CFL_{max}	Erro
Sem correção	20	0,04177	1,000	2078%
Sem correção	100	0,00835	1,000	48,31%
Com correção	20	0,04177	1,000	0,45%
Com correção	100	0,00835	1,000	0,16%
Runge-Kutta de Segunda Ordem	n_x	δt_{max}	CFL_{max}	Erro
Upwind de Primeira Ordem	20	0,00170	0,122	1193%
	100	0,00110	0,395	242%
Upwind de Segunda Ordem	20	0,00150	0,108	65,24%
	100	0,00080	0,287	0,73%
Upwind de Terceira Ordem	20	0,00180	0,129	19,52%
	100	0,00130	0,467	0,15%
Centrais de Segunda Ordem	20	0,00200	0,144	3,26%
	100	0,00190	0,682	0,14%
Centrais de Quarta Ordem	20	0,00200	0,144	0,08%
	100	0,00190	0,682	0,01%
Runge-Kutta de Quarta Ordem	n_x	δt_{max}	CFL_{max}	Erro
Upwind de Segunda Ordem	20	0,00210	0,151	65,24%
	100	0,00110	0,395	0,73%
Centrais de Segunda Ordem	20	0,00270	0,194	3,26%
	100	0,00260	0,934	0,14%

Tabela 14: Comparação entre os métodos de diferenças finitas desacoplados e o método de colisão e propagação, quando $Kn = 0,001$.

O tempo final em cada uma das simulações cujos resultados são mostrados na tabela acima foi o mesmo, apesar dos passos de tempo serem diferentes em cada esquema. São mostrados na tabela os passos de tempo máximos utilizados antes que o algoritmo se tornasse instável e o CFL_{max} relacionado a este tempo e a mais alta velocidade molecular

da rede. A coluna "Erro" se refere ao erro percentual entre a difusividade térmica teórica e a medida nas simulações.

Apesar do caso acima descrito ser bastante específico, suas conclusões são gerais, tendo sido observadas em diferentes simulações realizadas durante toda esta tese.

O número de Knudsen nestas simulações é igual a aproximadamente 0,001. Nesta escala são esperados efeitos de alta ordem apenas marginais, i.e., os erros numéricos relacionados a discretização do espaço e do tempo devem ser muito maiores que os efeitos relacionados a um alto número de Knudsen.

Em todas as simulações realizadas os passos de tempo no caso de uma rede composta por 20 sítios foi maior do que no caso da rede composta por 100 sítios. Isto acontece porque a instabilidade do método está muitas vezes ligadas a razão entre δx e δt . Note porém que o aumento de δx em cinco vezes não foi suficiente para aumentar o passo de tempo permitido em cada um dos métodos de diferenças finitas também em 5 vezes. O esquema de colisão de propagação é a única exceção a esta regra.

De maneira geral foi observado que o menor passo de tempo estável em cada método foi controlado principalmente pelo maior número de Courant. No esquema de colisão e propagação este número é constante e o método muito estável em uma ampla faixa de parâmetros.

Nos esquemas de colisão e propagação, se o erro nos coeficientes de transporte não tivesse sido previsto através da análise de Chapman-Enskog, seria dado pelas linhas "Sem correção". Perceba que sua magnitude é bastante grande e comparável ao esquema upwind de primeira ordem com Runge-Kutta de segunda ordem.

Todavia, em esquemas cuja etapa de advecção é exata, ou seja, nos esquemas baseados na discretização da derivada material, os erros numéricos podem ser determinados via análise de Chapman-Enskog e eventualmente podem ser incorporados na definição dos coeficientes de transporte. Esta vantagem, pelo que mostram os erros numéricos na tabela acima, é de vital importância para a simulação dos métodos de lattice Boltzmann. Os erros numéricos dos algoritmos desacoplados são aceitáveis apenas quando δx e δt são muito pequenos, limitando muito a utilização destes métodos.

8.2 Tubo de Choque de Sod

8.2.1 Formulação do Problema

O experimento do tubo de choque de Sod^[68, 69] funciona com dois compartimentos em um duto liso separados inicialmente por uma membrana fina. Nessas câmaras, como condição inicial, é imposta uma diferença de pressão. O esquema pode ser visualizado com mais clareza na figura abaixo. No tempo zero do experimento a membrana é retirada repentinamente permitindo que o fluido de maior pressão entre em contato com o de menor pressão gerando uma onda de compressão na direção do fluido de baixa pressão e, simultaneamente, uma onda de expansão que se move na direção da zona de alta pressão,

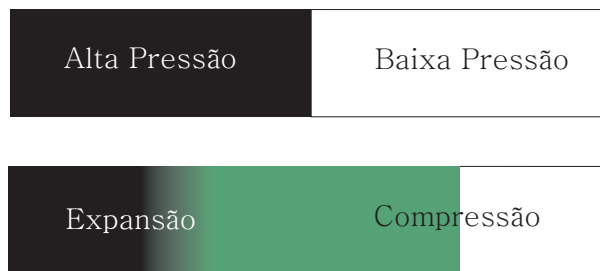


Figura 36: Tubo de choque de Sod.

A velocidade de propagação das ondas de choque é diferente, dado que a velocidade do som na rede depende da temperatura do fluido. Quanto maior a diferença entre as pressões, maior deve ser a diferença entre as temperaturas na região central do tubo de choque e conseqüentemente, maior deve ser a diferença entre as velocidades das ondas de compressão e expansão. A velocidades destas ondas podem ser previstas analiticamente através da equação de Euler^[69]. Variações infinitesimais de pressão dão origem a ondas que viajam a uma velocidade igual a velocidade do som no domínio^[69].

No contexto da simulação numérica de escoamentos compressíveis este problema é utilizado como um teste rigoroso de estabilidade e acurácia de um método devido aos seus grandes gradientes, que são fontes comuns de instabilidade, principalmente quando a razão entre as pressões simuladas é grande^[51]. Nestes problemas é comum também que transpareçam problemas de difusividade numérica nas discontinuidades presentes, difusão que muitas vezes é essencial para garantir a estabilidade do método numérico^[51].

8.2.2 Efeito da Recuperação de Momentos de Ordem Crescente da Distribuição de Equilíbrio

Inicialmente foi medida a velocidade do som em função de θ , Seção 6.3, em diferentes redes utilizando o esquema de colisão e propagação e considerando uma diferença de pressão entre as duas câmaras muito pequena (1,000001 e 1).

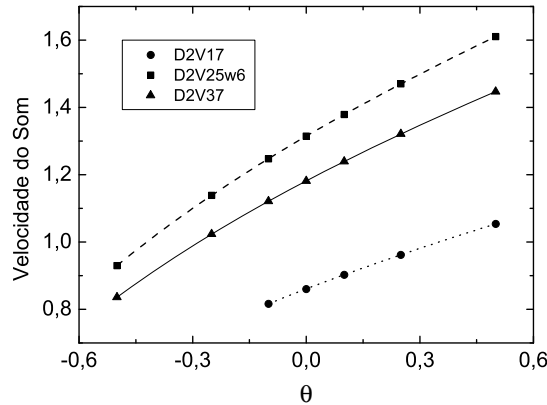
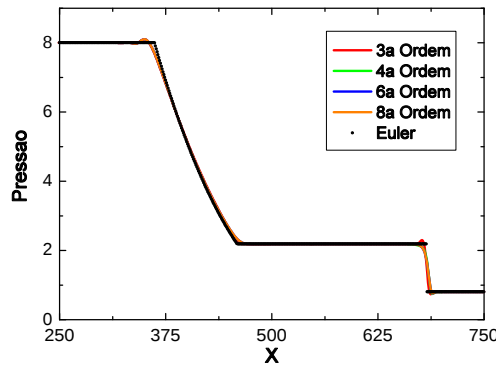


Figura 37: Medida da velocidade do som em um domínio com relação ao desvio da temperatura θ .

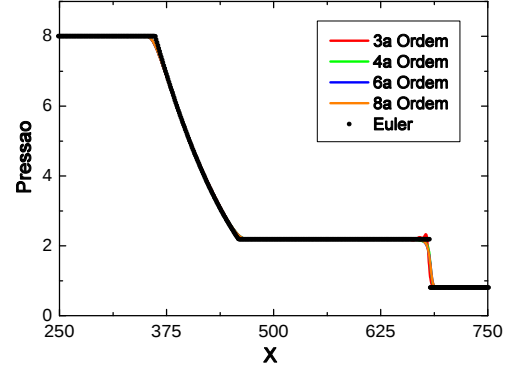
A previsão teórica acima representada pelas linhas concorda com os resultados das simulações até a ordem do erro de arredondamento das variáveis reais utilizadas.

No conjunto de simulações seguintes o tubo de choque de Sod foi utilizado para comparar redes de diversas ordens encontradas no Capítulo 6, i.e., as redes D1V4n, D1V5n, D1V7n e D1V9n, capazes de recuperar momentos de terceira, quarta, sexta e oitava ordem respectivamente, e estudar o efeito causado pelo refinamento de malha nos resultados encontrados. Foram utilizados nestas simulações um esquema de Runge-Kutta de segunda ordem e um esquema upwind de terceira ordem. Simulações nas redes bidimensionais D2V17, D2V37, D2V53 e D2V81 foram realizadas utilizando o esquema de colisão e propagação, apresentando resultados similares.

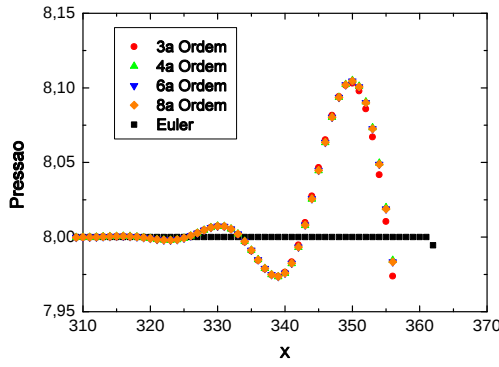
O tubo de choque, à esquerda, foi iniciado com uma densidade de 8 e uma temperatura igual a 1 e o domínio à direita foi iniciado com uma densidade de 1 e uma temperatura de 0,75, de forma que a razão entre as pressões a direita e a esquerda é igual a 10. As figuras abaixo mostram a distribuição de pressão no domínio quando duas discretizações espaço-temporal são utilizadas, a primeira (à esquerda) quatro vezes mais grosseira do que a segunda (à direita). Resultados em discretizações ainda mais finas mostram resultados similares aos resultados das Figs. 38b, 38d e 38f,



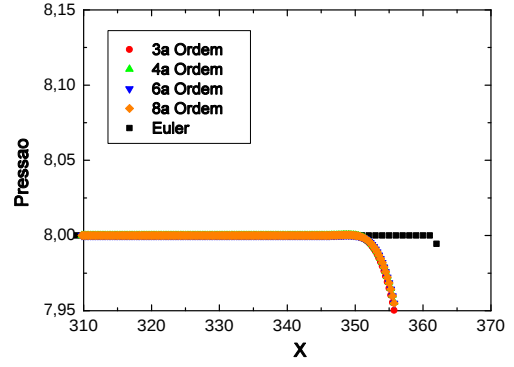
(a)



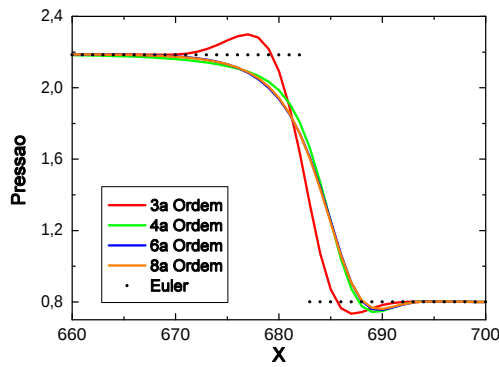
(b)



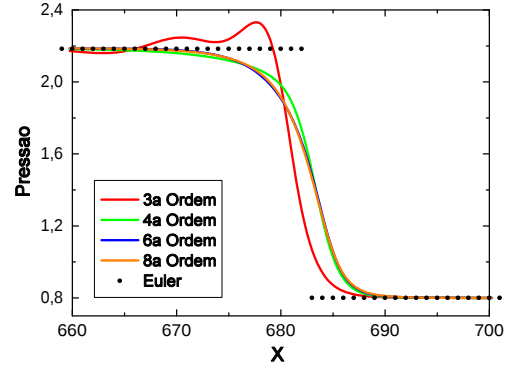
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 38: Simulação do tubo de choque utilizando duas discretizações espaço-temporais diferentes, em um domínio unidimensional.

Para que estas simulações pudessem ser realizadas foi adotado um mesmo valor para o fator de adimensionalização, RT_0 , em todas as redes utilizadas. Foram utilizados também mesmos valores de δx e δt em cada simulação.

Nas Figs. 38a, 38c e 38e podem ser observadas diversas instabilidades, que poderiam ter sido causados tanto pela discretização espaço-temporal quanto pela falha em representar corretamente a distribuição de equilíbrio no espaço discreto. Analisando a onda de expansão com detalhes, Figura 38c, pode ser observado que todas as redes utilizadas apresentaram o mesmo comportamento, sugerindo que o que causa as instabilidades não é a discretização do espaço de velocidades, mas sim a discretização espaço-temporal.

Quando a malha é refinada e o passo de tempo é diminuído, Figura 38d, esta expectativa é confirmada pelo desaparecimento das instabilidades, tanto na onda de expansão quando na onda de compressão, e.g., compare as Figs. 38e e 38f. A diferença entre a solução de Euler (pontilhada)^[69] e a solução da equação de Boltzmann mostrada se deve tanto a aspectos físicos do modelo, i.e., a difusividade térmica e os efeitos de alta ordem em Kn , quanto a possíveis erros no algoritmo, e.g., a difusividade numérica.

De qualquer forma, os resultados em ordens crescentes de Knudsen estão em excelente conformidade uns com os outros, exceto a rede D1V4n, de terceira ordem, e são muito estáveis para razões entre as pressões iniciais de até 50 se a temperatura média inicial e o passo de tempo forem diminuídos e a difusividade térmica for aumentada, ajudando a dissipar erros relacionados a dispersão numérica.

No esquema de colisão e propagação razões entre as pressões iniciais de até 8 são possíveis de simular. Esta diferença em termos de estabilidade pode estar ligada à alta difusividade numérica dos métodos de diferenças finitas desacoplados, que pode ajudar a difundir os erros numéricos dispersivos do método, responsáveis pelos problemas de instabilidade numérica. Redes de ordem mais alta, em todos os métodos, mostraram uma estabilidade numérica maior, ver Siebert^[28] para maiores detalhes.

Posteriormente o modelo de colisão a dois tempos de relaxação (TRT) também foi testado neste problema, quando foram simulados números de Prandtl entre 0,005 e 300. Novamente a um coeficiente de transporte baixo instabilidades eram mais comuns e a alto coeficiente de transporte efeitos de Knudsen finito eram observados, seja ele a viscosidade cinemática ou a difusividade térmica.

De modo a estudar a diferença entre a solução teórica e a simulação realizada nos perfis de onda mostrados acima, foi investigado com mais detalhes o perfil de temperatura e densidade destas ondas em um caso em que a difusividade térmica do modelo foi aumentada e a diferença de pressão entre as duas câmaras diminuída,

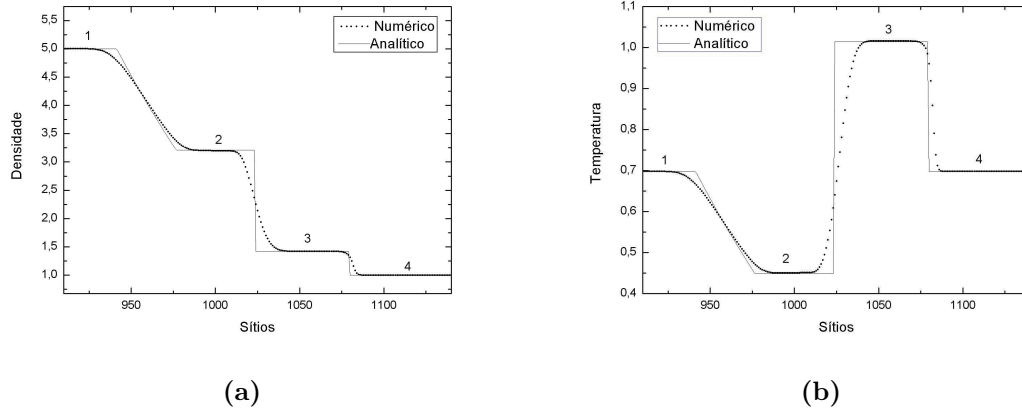


Figura 39: Distribuição de temperatura e densidade no problema do tubo de choque de Sod.

No centro do domínio, ponto inicial dos caminhos das ondas de pressão, existe uma diferença de temperaturas induzida pela formação destas ondas. Neste ponto, como a pressão está equilibrada, pode-se medir a difusividade térmica de modo análogo ao realizado na Seção 8.1.1.

As medições realizadas neste caso, considerando uma série de temperaturas médias e viscosidades diferentes, mostraram que a difusividade térmica no centro do domínio é semelhante àquela prevista pela análise de Chapman-Enskog. Diferenças idênticas às encontradas na Seção 8.1.1 foram aqui registradas. As mesmas medições, quando realizadas em simulações utilizando o esquema de colisão e propagação, apresentaram diferenças de menos de 1% em relação à previsão teórica.

Foi demonstrado, desta maneira, que a difusividade térmica no centro do tubo de choque está diretamente ligada à difusividade térmica do fluido que se está simulando. Nas ondas de expansão e compressão o mesmo efeito difusivo também está presente mas, nesta tese, estes efeitos não foram medidos nestes pontos. Note que a solução teórica mostrada considera um fluido de viscosidade e difusividade térmica nulos, por isso a diferença entre os perfis de onda.

8.3 Escoamento de Couette com Dissipação Viscosa

Neste problema, de solução bastante simples, podem ser analisadas as condições de contorno discutidas no capítulo anterior. Foi utilizado aqui novamente um esquema de Runge-Kutta de segunda ordem e um upwind de terceira ordem nos sítios distantes das fronteiras, Seção 7.2.

Utilizando as condições de contorno descritas no início da Seção 7.1.4, o escoamento de Couette entre duas placas planas infinitas a diferentes temperaturas e velocidades foi simulado utilizando a rede D2V17n, Seção 6.5.2.4. O número de Eckert, neste problema, é dado por

$$Ec = \frac{U^2}{C_V \Delta T}, \quad (8.16)$$

onde U é a velocidade da parede leste, C_V é o calor específico a volume constante e ΔT é a diferença de temperatura entre as duas paredes.

A velocidade foi tomada como igual a zero na parede oeste e, de acordo com o número de Eckert, diferente de zero na parede leste. Na parede oeste a temperatura é de 0,99 e na parede leste 1,01, em unidades de rede. As simulações foram realizadas utilizando números de Eckert entre 1 e 32 e os resultados foram resumidos nas Figs. 40a e 40b. Houve uma ótima concordância entre os resultados experimentais e os teóricos em toda a faixa do número de Eckert simulada, mesmo quando o número de pontos do domínio era muito pequeno e o número de Mach era alto. Nenhum escorregamento de velocidade ou temperatura foi registrado.

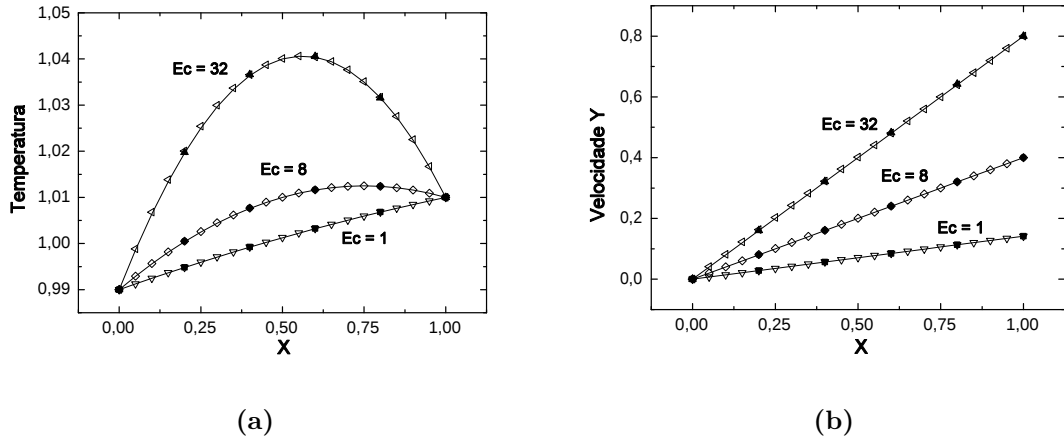


Figura 40: Escoamento de Couette. A temperatura a) e a velocidade b) são comparadas com a solução dada pelas equações de Navier-Stokes-Fourier. Os pontos correspondem as simulações realizadas através do LBM utilizando duas malhas diferentes, uma com cinco pontos e outra com vinte.

8.4 Cavity Quadrada com Tampa Deslizante

No problema da cavidade quadrada uma velocidade não-zero é imposta no topo de uma caixa fechada quadrada, Seção 7.1.4. Frequentemente este problema é utilizado para

comparação de diferentes métodos numéricos em mecânica dos fluidos, tanto em relação à precisão quanto em relação aos limites de estabilidade de cada método.

Neste teste um esquema de Runge-Kutta de segunda ordem foi utilizado em conjunto com um esquema upwind de terceira ordem. As simulações aqui mostradas utilizaram uma rede D2V17n e uma distribuição de equilíbrio isotérmica. Os resultados mostrados abaixo, quando $Re = 1000$, apresentam uma boa concordância com o trabalho de Ghia e colaboradores^[70],

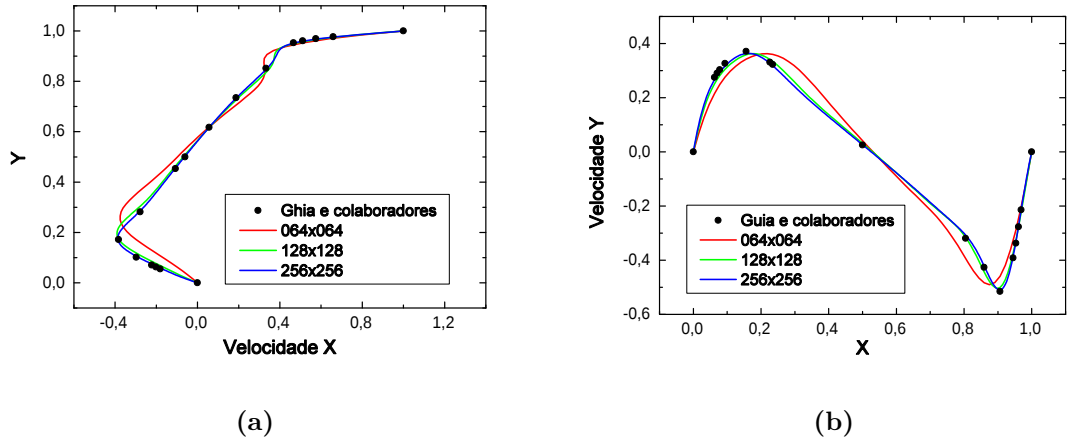


Figura 41: Escoamento em uma cavidade quadrada, $Re = 1000$. São mostradas a componente da velocidade na direção horizontal ao longo do eixo médio da cavidade $x = 0,5L$ e a componente vertical ao longo do eixo médio da cavidade $y = 0,5L$. A velocidade mostrada foi adimensionalizada pela velocidade máxima na malha.

Apesar destes resultados poderem ser considerados muito bons, eles foram obtidos somente quando um domínio bastante refinado e um pequeno passo de tempo foram utilizados, requerendo um número significativamente grande de passos de tempo para a convergência. Os métodos de lattice Boltzmann são caracterizados por simularem o regime transiente, sendo o regime permanente muito lentamente atingido em muitos casos.

Esta simulação foi realizada a diferentes números de Reynolds. Soluções a Reynolds mais baixo demoraram menos, exigiram uma discretização mais grosseira e foram mais acuradas do que no número de Reynolds mostrado, de 1000. Números de Reynolds mais altos exigiram passos de tempo significativamente menores para a convergência e uma discretização mais detalhada do espaço físico para que a solução fosse precisa.

Simulações realizadas através do esquema de colisão e propagação tenderam a apresentar uma convergência mais rápida, além de não sofrerem com a falha de conservação da massa quando condições mistas entre bounce-back e especular foram utilizadas como

condição de contorno na parede móvel.

A convergência mais rápida no esquema de colisão e propagação pode ser explicada pelo coeficiente de difusão negativo trazido pelo erro numérico proporcional a $-\delta t/2$ ^[37], Seção 5.1.3. Este efeito é absorvido da definição da viscosidade e da difusividade térmica, permitindo que simulações a número de Reynolds mais altos, com passos de tempo maiores quando comparados aos métodos de diferenças finitas de alta ordem, sejam realizadas estavelmente, já que a sobrerelaxação no termo de colisão leva a viscosidades que podem ser bastante baixas quando comparadas com as viscosidades dos métodos de diferenças finitas.

Mesmo assim existem situações em que o esquema de colisão e propagação não é estável por ser pouco flexível na escolha de seu passo de tempo. Nestes casos os métodos de diferenças finitas têm alguma vantagem em relação a ele, com a ressalva deste passo de tempo não poder ser ajustado a um valor excessivamente pequeno, tornando a difusão numérica no método muito grande e retardando o andamento das simulações de maneira excessiva.

8.5 Escoamentos em Meios Porosos

O objetivo deste estudo foi simular o escoamento a baixo número de Reynolds em estruturas porosas descritas através de microtomografia ou reconstruídas estatisticamente a partir de lâminas delgadas, utilizando o esquema de colisão e propagação para o cálculo da permeabilidade absoluta com posterior comparação direta dos resultados encontrados com medições laboratoriais.

Inicialmente foi simulado o escoamento de Poiseuille^[4] entre duas placas planas através da imposição de uma diferença de pressão entre a entrada e a saída do domínio. Diferença de pressão que foi imposta considerando um domínio periódico em que as três primeiras colunas de fluido eram submetidas a uma força de corpo. Quando o sistema atingiu a condição de regime permanente foi medida a diferença entre as pressões de entrada e saída do duto e o perfil de velocidade no seu centro na direção normal às placas.

Através da integração deste perfil foi calculada a vazão no duto e, quando esta vazão foi relacionada a diferença de pressão no domínio, pôde-se calcular o valor da permeabilidade absoluta. No gráfico abaixo, a esquerda, é mostrada a medição da permeabilidade absoluta realizada utilizando-se as redes D1Q9 e D2V17 em função do tempo de relaxação utilizado. A linha pontilhada se refere a sua previsão teórica,

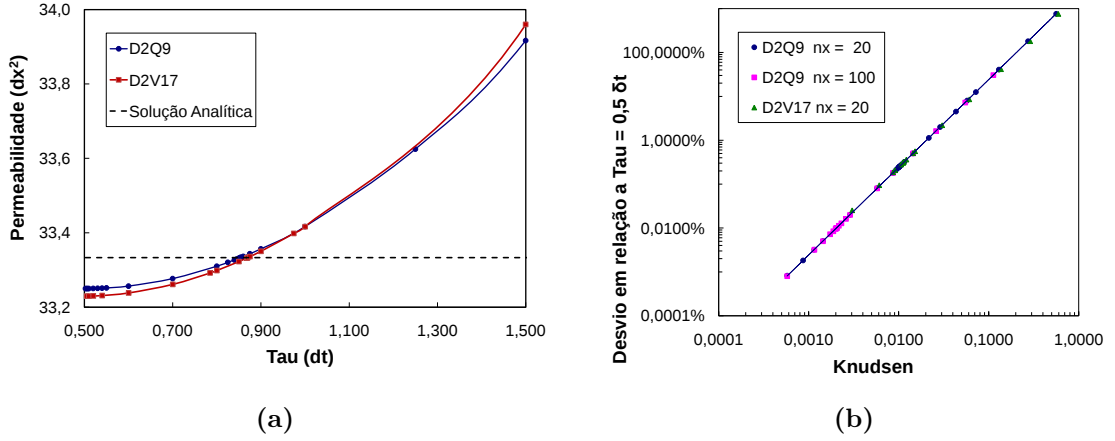


Figura 42: Permeabilidade absoluta medida em função do tempo de relaxação utilizado (esquerda). Diferença percentual entre a permeabilidade absoluta no limite de baixo Kn e esta permeabilidade medida a Kn finito (direita), definido como a razão entre Ma e Re ^[3].

No gráfico à direita é mostrado o desvio percentual entre a permeabilidade absoluta no limite de baixo número de Knudsen, i.e., quando $\tau \rightarrow 0,5\delta t$, e esta mesma permeabilidade medida a número de Reynolds finito. A escala de potência característica deste desvio foi medida e é igual a 2,000.

Pode ser observado também que existe um τ em que a diferença entre a previsão teórica da permeabilidade absoluta e as medições é nula. Este tempo de relaxação, entre 0,85 e 0,95, é utilizado algumas vezes em simulações a baixo número de Knudsen de maneira a minimizar os erros do método, aproximando a solução encontrada da solução das equações de Navier-Stokes^[71]. Seu valor depende da condição de contorno utilizada e da geometria do problema.

É interessante notar ainda que, Tabela 8, um dos termos de segunda ordem em relação ao número de Knudsen na equação de balanço de quantidade de movimento encontrada pela análise de Chapman-Enskog tem coeficiente de transporte igual a $\left(2\tau^2 - 2\tau\delta t + \frac{\delta t^2}{6}\right)$, que é igual a zero quando $\tau = \delta t \left(\frac{3+\sqrt{6}}{6}\right)$, i.e., $\tau \approx 0,908\delta t$, valor muito próximo ao erro nulo neste problema.

A número de Knudsen baixo os valores medidos nas simulações realizadas não convergiram exatamente para o valor teórico de permeabilidade absoluta. Este desvio pode estar ligado tanto à condição de contorno utilizada quanto ao modelo BGK representado pelo esquema de colisão e propagação. Note que mesmo quando $\tau \rightarrow 0,5\delta t$ e, desta forma, a viscosidade cinemática tende a zero, existem termos em alta ordem de Knudsen que

não se anulam e podem, eventualmente, ser importantes neste caso, e.g., na Tabela 8, em segunda ordem de Knudsen, o termo proporcional a δt^2 .

Os desvios aqui registrados devido à física do modelo a número de Knudsen finito são indesejáveis na simulação de escoamentos em meios porosos a baixo número de Reynolds. Pan e colaboradores^[72] sugerem a utilização de métodos de lattice Boltzmann a múltiplos tempos de relaxação para diminuir estes desvios.

Tendo estudado o comportamento do método no escoamento de Poiseuille, foram realizadas então várias simulações do escoamento em um meio poroso obtido através da binarização de uma imagem microtomográfica deste meio, de resolução $3,81\mu m$. Trata-se de um arenito de afloramento Botucatu.

Os resultados da figura abaixo mostram a permeabilidade absoluta medida em função do número de Knudsen nesta série de experimentos,

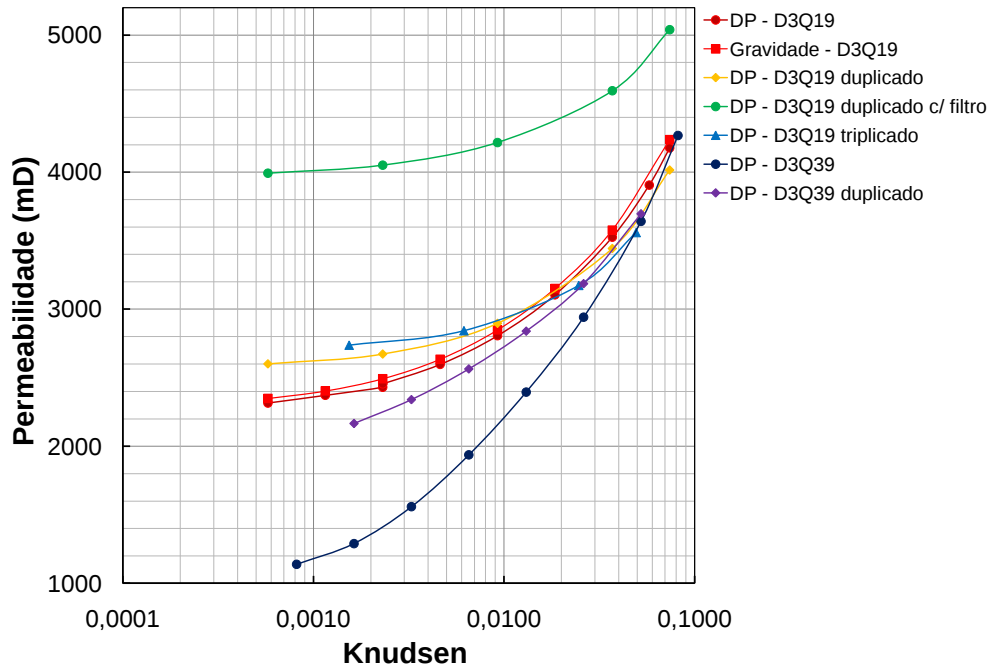


Figura 43: Permeabilidade absoluta medida em função de Kn .

Foram utilizadas primeiramente duas forças motrizes diferentes neste escoamento, uma força de corpo (gravidade) e uma diferença de pressão (DP). Como não foram encontradas diferenças significativas entre os resultados destas simulações, ver figura acima, optou-se pela aplicação de uma diferença de pressão nos experimentos numéricos subsequentes.

Os resultados em vermelho escuro, da simulação deste escoamento utilizando uma rede D3Q19, de segunda ordem, em uma malha formada por $150 \times 150 \times 150$ sítios servem de base de comparação para todos os resultados encontrados posteriormente. Devido ao

grande número de nós destas malhas, todas as simulações foram realizadas utilizando processamento paralelo em um cluster de 16 processadores de propriedade do LMPT/UFSC.

Os resultados em amarelo são referentes a simulação de um escoamento em um meio em que todos os voxels foram duplicados de tamanho em todas as direções, de maneira que a discretização do meio ficasse mais fina, com o custo de 8x a memória gasta no primeiro caso e tempo de processamento consideravelmente maior (apesar do tempo de processamento no LBM ser linear em relação ao número de sítios de fluido, o fenômeno físico costuma estabilizar muito mais lentamente em uma rede maior).

Pode ser notado, a partir da comparação entre as curvas "DP - D3Q19", "DP - D3Q19 duplicado" e "DP - D3Q19 triplicado" que a melhora no refinamento da malha tem impacto considerável na curva de permeabilidade absoluta em relação ao número de Knudsen obtida. Este impacto, todavia, tende a ser bem menor quando a discretização do meio poroso vai sendo melhorada, i.e., a difusividade numérica, responsável por uma diminuição não física da permeabilidade absoluta quando o Knudsen é diminuído nas simulações realizadas, ver figura acima, tende a um valor pequeno uma vez que a discretização espacial é melhorada.

Foi realizado ainda um teste no qual uma imagem microtomográfica deste meio poroso em escala de cinza foi duplicada antes de sua binarização, tendo suas fronteiras sólidas determinadas apenas após a passagem de um filtro cujo efeito esperado era o de melhorar a representação do meio poroso em escala sub-voxel. De fato este filtro acabou atenuando ou suavizando as superfícies do meio poroso, aumentando desta forma a sua permeabilidade absoluta, ver sequência "D3Q19 duplicada com filtro" na figura acima.

Por fim, utilizou-se a rede D3Q39, de terceira ordem, com o objetivo de avaliar o efeito da inclusão de momentos de mais alta ordem na distribuição de equilíbrio discreta nestas simulações. Percebe-se, neste caso, que a difusão numérica do método foi consideravelmente maior, provocando uma grande queda na curva de permeabilidade absoluta quando o número de Knudsen era também diminuído. Quando este meio foi duplicado observou-se padrão semelhante a rede D3Q19, em que os resultados convergiram aproximadamente para um mesmo padrão, independente da discretização espacial.

Não foi possível triplicar este meio poroso e utilizar a rede D3Q39 no algoritmo numérico por problemas de memória RAM disponível. Note que esta rede deve gastar mais do que duas vezes mais memória RAM do que a rede D3Q19 e muito mais tempo de processamento, haja visto que a distribuição de equilíbrio discreta desta rede possui mais termos do que a distribuição discreta da rede D3Q19.

O resultado experimental da permeabilidade absoluta neste meio foi de $4500mD$.

Percebe-se, pela figura acima, que apenas o conjunto "DP - D3Q19 duplicada com filtro" ficou próximo deste valor. Acredita-se que isto aconteceu apenas por puro acaso, devendo outras simulações serem realizadas para que este estudo seja conclusivo. Deve-se ressaltar que o meio poroso utilizado é apenas uma pequena parte do meio poroso original, onde foi realizado o experimento. Desta forma é natural que diferenças entre os resultados das simulações realizadas e a permeabilidade medida em laboratório sejam encontradas.

8.6 Análise do Uso de LBMs Alternativos ao Esquema de Colisão e Propagação

Neste ponto algumas das expectativas relacionadas ao uso de métodos alternativos ao esquema de colisão e propagação para a resolução da equação de transporte de Boltzmann podem ser reavaliadas.

Primeiramente, os métodos de diferenças finitas foram utilizados para que a estabilidade e acurácia de seus algoritmos numéricos fossem claramente melhores do que no algoritmo de colisão e propagação. As simulações aqui mostradas utilizando os métodos de diferenças finitas chamados neste trabalho de desacoplados, Seção 5.5, apresentaram erros maiores do que no esquema de colisão e propagação em muitos casos. Apenas quando os domínios utilizados foram discretizados muito refinadamente bons resultados puderem ser obtidos com estes métodos.

Difícilmente este tipo de formulação poderia ser utilizada para a previsão de efeitos em números de Knudsen finitos. Isto acontece porque efeitos nesta ordem são muito sutis, podendo se confundir facilmente com os erros numéricos de um método se eles não forem de uma ordem mais baixa.

O esquema de colisão e propagação, em relação aos métodos de diferenças finitas desacoplados, possui a grande vantagem de ter advecção exata e por isso permitir que sua análise de Chapman-Enskog em alta ordem seja realizada de maneira relativamente simples. Na análise realizada nesta tese, Seção 5.1.3, foi constatado que em ordem um do número de Knudsen este erro poderia ser incorporado na definição do coeficiente de transporte do fluido, de modo que o erro em relação a equação de Navier-Stokes nesta escala é zero.

Em alta ordem, todavia, o esquema de colisão e propagação apresenta erros numéricos que não podem ser resumidos simplesmente a um ajuste da definição dos coeficientes de transporte para que seu efeito seja corrigido, Seção 5.1.3. Nestes casos outros algoritmos numéricos devem ser utilizados para diminuir ou mesmo suprimir os erros numéricos

encontrados.

Os métodos de Runge-Kutta de segunda ordem e quarta ordem para a derivada material, assim como o esquema de colisão e propagação, possuem advecção exata e, além disso, teoricamente têm acurácia maior que o esquema de colisão e propagação. Todavia, a análise de Chapman-Enskog destes métodos pode ser bastante complicada devido à não linearidade da distribuição de equilíbrio em relação a velocidade macroscópica e temperatura do fluido, tendo sido realizada neste trabalho apenas quando esta distribuição era dependente unicamente de densidade deste fluido.

Testes com estes métodos não foram realizados para a determinação de seu desvio em relação à equação de Boltzmann do contínuo em problemas isotérmicos ou não-isotérmicos já que mesmo no caso mais simples de todos estudado aqui, um fenômeno puramente difusivo, estes erros em relação aos coeficientes de transporte do fluido simulado eram importantes, apesar de manterem a ordem de aproximação do método, ver Tabelas 9 e 10.

Duas alternativas para que a forma dos coeficientes de transporte do fluido simulado por estes métodos sejam determinados são tentar realizar a análise de Chapman-Enskog apesar das grandes dificuldades em tratar as não-linearidades da distribuição de equilíbrio ou tentar descobrir a forma destes coeficientes de transporte diretamente através de simulação numérica. Apesar desta última alternativa ser viável quando são considerados escoamentos até a primeira ordem de Knudsen, ela é quase impossível de ser realizada a alto número de Knudsen, já que, neste caso, são esperados desvios físicos muito difíceis de separar dos erros numéricos do método se estes últimos forem grandes.

Métodos de volumes finitos ou elementos finitos poderiam também ser testados para a discretização espaço-temporal. Nas experiências realizadas por este autor com métodos de volumes finitos variados nenhum deles funcionou de maneira satisfatória. De fato, os mesmos problemas de alta difusão numérica dos métodos de diferenças finitas foram observados nestes métodos.

9 Conclusão

Neste trabalho a equação de Boltzmann foi inicialmente simplificada através de modelos de colisão a um ou mais tempos de relaxação cuja forma foi deduzida quando os espaços temporal, espacial e de velocidades moleculares foram considerados contínuos.

De modo a resolver as equações obtidas após esta simplificação, foram realizadas em etapas a discretização do espaço físico e temporal e, posteriormente, do espaço de velocidades moleculares. O objetivo de realizar esta discretização em etapas foi separar e deixar mais claros os erros cometidos quando cada uma delas é realizada.

No âmbito teórico a análise de Chapman-Enskog foi a principal ferramenta utilizada para que a comparação entre estas diferentes etapas e os modelos de colisão aplicados ao espaço contínuo pudesse ser realizada em diversas ordens do número de Knudsen. Posteriormente foram realizadas uma série de simulações com o objetivo de validar as análises teóricas realizadas, avaliando os métodos desenvolvidos através de aplicações práticas.

Primeiramente foi realizada a discretização espaço-temporal de todos os modelos de colisão contínuos deduzidos. Nesta discretização, na qual foram utilizados os métodos de diferenças finitas, dois tipos principais de métodos de lattice Boltzmann foram obtidos.

Nos primeiros, chamados de desacoplados, a discretização do espaço físico e do tempo foi realizada de forma independente. Neste caso a análise de Chapman-Enskog não pode ser aplicada diretamente à equação de evolução do método por causa da advecção não exata das distribuições de moléculas. Na falta de outra alternativa, a análise de Chapman-Enskog no contínuo é então considerada como representativa do método numérico. Estudos comparando a previsão teórica encontrada desta maneira e resultados numéricos do método revelaram problemas recorrentes de alta difusão numérica e estabilidade.

Nos segundos, cujas diferenças finitas foram aplicadas à discretização da derivada material diretamente, este problema é minimizado quando a análise de Chapman-Enskog pode ser aplicada, de forma que os erros cometidos na discretização espaço-temporal podem ser previstos em ordens crescentes do número de Knudsen. Eventualmente estes erros podem ser incorporados à definição dos coeficientes de transporte nas equações de

balanço macroscópicas obtidas, como no caso do esquema de colisão e propagação até primeira ordem de Knudsen.

Todavia, nos métodos de mais alta ordem, e.g., Runge-Kutta de segunda ou quarta ordem, esta análise pode ser bastante complicada devido à não linearidade da distribuição de equilíbrio em relação a velocidade macroscópica e temperatura do fluido, tendo sido realizada neste trabalho apenas quando ela era dependente unicamente de sua densidade.

Depois desta etapa foi realizada a discretização do espaço de velocidades de maneira detalhada. Através da análise de Chapman-Enskog puderam ser deduzidas condições necessárias para a correta recuperação das equações de balanço macroscópicas em ordens crescentes de Knudsen.

Considerando estas condições, redes space-filling, necessárias à aplicação em métodos numéricos baseados na discretização da derivada material, e redes não space-filling, que são menores do que as redes space-filling e adequadas a simulação numérica por métodos desacoplados, foram obtidas em diferentes ordens. Foram detalhadas neste trabalho as principais características geométricas destas redes, bem como detalhes de sua obtenção através do método de quadratura por abscissas prescritas.

Por fim, no último capítulo antes deste, os resultados numéricos de diferentes simulações realizadas durante esta tese foram analisados. Estes resultados confirmaram as previsões teóricas realizadas pela análise de Chapman-Enskog acuradamente. Foi observado em diversos experimentos numéricos que efeitos de alta ordem em Knudsen são realmente importantes na simulação de fluidos pelo método de lattice Boltzmann e muitos deles podem ser previstos por esta análise.

Diversos pontos importantes deste trabalho permanecem em aberto, merecendo consideração cuidadosa em um futuro próximo.

O mais importante deles certamente é a adequação de condições de contorno confiáveis para a simulação de problemas não-isotérmicos que permitam a imposição de fluxo de calor, temperatura e velocidade macroscópica em suas fronteiras sólidas, em condições de baixo ou alto número de Knudsen, e não apresentem problemas com a conservação da massa localmente. Isto tem importância capital na utilização dos métodos de lattice Boltzmann em escoamentos mais complexos, aplicações que não puderam ser avaliadas neste trabalho com profundidade.

Outro ponto importante em relação a aplicações futuras deste trabalho é a análise teórica mais detalhada e aplicação prática do modelo a dois ou mais tempos de relaxação. Embora o modelo de colisão BGK seja muito útil na simulação de escoamentos em que a temperatura não é um parâmetro importante para sua evolução e, portanto, apenas

um coeficiente de transporte, a viscosidade cinemática, já é suficiente para descrevê-lo de maneira aceitável, em situações de escoamento não-isotérmico é muito importante que a difusividade térmica possa ser ajustada de maneira independente à viscosidade, obtendo-se números de Prandtl variáveis.

Além disso, em alto número de Knudsen são esperados efeitos físicos governados por coeficientes de transporte que também devem ser ajustados de forma independente dos primeiros. Nesta tese foram verificados em casos bastante simplificados a importância destes coeficientes de transporte através de simulações numéricas. Uma extensão importante deste trabalho seria comparar resultados obtidos através de simulação a resultados experimentais em alto número de Knudsen de forma direta.

Um outro ponto desconsiderado neste trabalho e que merece uma atenção especial nas próximas investigações é a função H e a segunda lei da termodinâmica. Os métodos aqui desenvolvidos não obedecem esta lei, mas a quadratura da função H poderia ser realizada a princípio, quem sabe com a constatação de que novas condições são necessárias para que a discretização do espaço de velocidades seja realizada de maneira correta.

Métodos de volumes finitos ou elementos finitos poderiam também ser testados para a discretização espaço-temporal. Nas experiências realizadas por este autor com métodos de volumes finitos variados nenhum deles funcionou de maneira satisfatória. De fato, os mesmos problemas de alta difusão numérica dos métodos de diferenças finitas foram observados nestes métodos.

APÊNDICE A – Polinômios de Hermite

Definindo uma função peso, $\omega(\mathbf{x})$, como $\omega(\mathbf{x}) = e^{-\mathbf{x}^2/2} / (2\pi)^{D/2}$, os tensores polinomiais de Hermite podem ser escritos como

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}(\mathbf{x}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\mathbf{x})} \partial_\alpha \partial_\beta \partial_\gamma \partial_{\dots} (\omega(\mathbf{x})), \quad (\text{A.1})$$

onde n é a ordem do tensor polinomial $\mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}$ e $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ são subíndices que seguem a notação de Einstein. O operador ∂_α corresponde a derivada de uma função em relação a coordenada espacial rotulada por α . Desta forma, os primeiros quatro polinômios de Hermite são:

$$\mathcal{H}^{(0)}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{H}_\alpha^{(1)}(\mathbf{x}) = x_\alpha, \quad (\text{A.3})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{x}) = x_\alpha x_\beta - \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.4})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma}^{(3)}(\mathbf{x}) = x_\alpha x_\beta x_\gamma - x_\alpha \delta_{\beta\gamma} - x_\beta \delta_{\alpha\gamma} - x_\gamma \delta_{\alpha\beta}. \quad (\text{A.5})$$

Os polinômios de Hermite são ortogonais com relação ao seguinte produto interno:

$$\int \omega(\mathbf{x}) \mathcal{H}_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots}^{(n)}(\mathbf{x}) \mathcal{H}_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots}^{(m)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{nm} (n_1! n_2! \dots n_D!), \quad (\text{A.6})$$

onde δ_{nm} é o delta de Kronecker, sendo igual a um somente se as dimensões dos polinômios $\mathcal{H}^{(n)}$ e $\mathcal{H}^{(m)}$ são iguais e os subíndices $\alpha_1\beta_1\gamma_1\dots$ puderem ser escritos como uma permutação dos subíndices $\alpha_2\beta_2\gamma_2\dots$, n_a representa o número de vezes que cada subíndice x_a se repete no conjunto de subíndices considerado.

Qualquer função $f(\mathbf{x})$ que seja quadrado integrável pode ser expandida em polinômios de Hermite como segue

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)} \mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.7})$$

onde foi adotada a notação de Einstein. Os coeficientes da expansão acima, $a_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}$, são dados por

$$a_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)} = \int \omega(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma\dots}^{(n)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (\text{A.8})$$

APÊNDICE B – Redes

B.1 Redes Unidimensionais

Tabela 15: Redes unidimensionais de quarta, quinta, sexta, sétima e oitava ordem, respectivamente.

	D1V7	D1V9	D1V11	D1V13	D1V15
c_s	1,44702	2,55463	1,78560	2,83247	2,06955
W_0	$4,76670 \times 10^{-1}$	$1,67240 \times 10^{-1}$	$3,86938 \times 10^{-1}$	$2,09278 \times 10^{-1}$	$3,33881 \times 10^{-1}$
W_1	$2,33915 \times 10^{-1}$	$3,03154 \times 10^{-1}$	$2,41783 \times 10^{-1}$	$2,33125 \times 10^{-1}$	$2,35234 \times 10^{-1}$
W_2	$2,69382 \times 10^{-2}$	$5,33029 \times 10^{-2}$	$5,89225 \times 10^{-2}$	$9,40511 \times 10^{-2}$	$8,22616 \times 10^{-2}$
W_3	$8,12130 \times 10^{-4}$	$5,79215 \times 10^{-2}$	$5,61526 \times 10^{-3}$	$5,69234 \times 10^{-2}$	$1,42801 \times 10^{-2}$
W_4			$2,06525 \times 10^{-4}$	$7,50077 \times 10^{-3}$	$1,23015 \times 10^{-3}$
W_5		$2,00126 \times 10^{-3}$	$3,27447 \times 10^{-6}$	$3,70056 \times 10^{-3}$	$5,26766 \times 10^{-5}$
W_6					$1,10667 \times 10^{-6}$
W_7				$6,07843 \times 10^{-5}$	$1,29492 \times 10^{-8}$

B.2 Redes Bidimensionais

B.2.1 Redes Space-Filling

Tabela 16: D2Q9, rede de segunda ordem.

ξ_i	i	W_i
(0, 0)	1	$\frac{4}{9}$
$(\pm a, 0)$	4	$\frac{1}{9}$
$(\pm a, \pm a)$	4	$\frac{1}{36}$
$a = \sqrt{3}$		

Tabela 17: D2V17, rede de terceira ordem.

ξ_i	i	W_i
(0, 0)	1	$\frac{575+193\sqrt{193}}{8100}$
($\pm a$, 0)	4	$\frac{3355-91\sqrt{193}}{18000}$
($\pm a$, $\pm a$)	4	$\frac{655+17\sqrt{193}}{27000}$
($\pm 2a$, $\pm 2a$)	4	$\frac{685-49\sqrt{193}}{54000}$
($\pm 3a$, 0)	4	$\frac{1445-101\sqrt{193}}{162000}$
$a = \frac{1}{6}\sqrt{\frac{5}{2}}(25 + \sqrt{193})$		

Tabela 18: D2V25, duas redes de quarta ordem incompletas.

ξ_i	i	$W_i(\text{D2V25w1})$	$W_i(\text{D2V25w6})$
(0, 0)	1	$2,35182082935646 \times 10^{-1}$	$\frac{34509-1405\sqrt{33}}{110592}$
($\pm a$, 0)	4	0	$\frac{6267-331\sqrt{33}}{69120}$
($\pm a$, $\pm a$)	4	$1,01815383428424 \times 10^{-1}$	$\frac{283+21\sqrt{33}}{4608}$
($\pm 2a$, 0)	4	$5,92113509356389 \times 10^{-2}$	$\frac{2133+379\sqrt{33}}{138240}$
($\pm 2a$, $\pm 2a$)	4	$2,00409068664401 \times 10^{-2}$	$\frac{233+39\sqrt{33}}{73728}$
($\pm 3a$, 0)	4	$6,79520191907580 \times 10^{-3}$	$\frac{627+61\sqrt{33}}{483840}$
($\pm 3a$, $\pm 3a$)	4	$1,14374524668275 \times 10^{-3}$	0
($\pm 4a$, 0)	4	$2,19789086982699 \times 10^{-3}$	$\frac{327+169\sqrt{33}}{15482880}$
$a_{w1} = 0,834659460211219$, $a_{w6} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}}(15 - \sqrt{33})$			

Tabela 19: D2V37, rede de quarta ordem.

ξ_i	i	W_i
(0, 0)	1	$2,33150669132353 \times 10^{-1}$
($\pm a$, 0)	4	$1,07306091542219 \times 10^{-1}$
($\pm a$, $\pm a$)	4	$5,76678598887949 \times 10^{-2}$
($\pm 2a$, 0)	4	$1,42082161584508 \times 10^{-2}$
($\pm 2a$, $\pm a$)	8	$5,35304900051378 \times 10^{-3}$
($\pm 2a$, $\pm 2a$)	4	$1,01193759267358 \times 10^{-3}$
($\pm 3a$, 0)	4	$2,45301027757717 \times 10^{-4}$
($\pm 3a$, $\pm a$)	8	$2,83414252994198 \times 10^{-4}$
$a = 1,19697977039307$		

Tabela 20: D2V53, rede de quinta ordem.

ξ_i	i	W_i
(0, 0)	1	$1,85653641466989 \times 10^{-1}$
($\pm a$, 0)	4	$9,73526695282692 \times 10^{-2}$
($\pm a$, $\pm a$)	4	$6,18473722490088 \times 10^{-2}$
($\pm 2a$, 0)	4	$2,07479449922149 \times 10^{-2}$
($\pm 2a$, $\pm a$)	8	$9,16147186431040 \times 10^{-3}$
($\pm 2a$, $\pm 2a$)	4	$2,63104246524789 \times 10^{-3}$
($\pm 3a$, 0)	4	$8,28526388718251 \times 10^{-4}$
($\pm 3a$, $\pm a$)	8	$8,88323453650492 \times 10^{-4}$
($\pm 4a$, $\pm a$)	8	$2,37359243299528 \times 10^{-5}$
($\pm 3a$, $\pm 3a$)	4	$3,13644871589413 \times 10^{-5}$
($\pm 5a$, 0)	4	$6,07038053094217 \times 10^{-7}$
$a = 1,062013780610965$		

Tabela 21: D2V81, rede de sexta ordem.

ξ_i	i	W_i
(0, 0)	1	$1,53813685619933 \times 10^{-1}$
($\pm a$, 0)	4	$9,03845772240304 \times 10^{-2}$
($\pm a$, $\pm a$)	4	$6,09150169360391 \times 10^{-2}$
($\pm 2a$, 0)	4	$2,42209449745106 \times 10^{-2}$
($\pm 2a$, $\pm a$)	8	$1,31464865423442 \times 10^{-2}$
($\pm 2a$, $\pm 2a$)	4	$3,96250694776903 \times 10^{-3}$
($\pm 3a$, 0)	4	$1,85426344505752 \times 10^{-3}$
($\pm 3a$, $\pm a$)	8	$1,60350954992801 \times 10^{-3}$
($\pm 3a$, $\pm 2a$)	8	$2,22491420911573 \times 10^{-4}$
($\pm 4a$, 0)	4	$1,00053975217684 \times 10^{-4}$
($\pm 4a$, $\pm a$)	8	$3,43983276583145 \times 10^{-5}$
($\pm 3a$, $\pm 3a$)	4	$5,44948043276956 \times 10^{-5}$
($\pm 4a$, $\pm 2a$)	8	$1,88370673442359 \times 10^{-5}$
($\pm 5a$, 0)	4	$2,40444982109759 \times 10^{-6}$
($\pm 5a$, $\pm 2a$)	8	$4,35010935503406 \times 10^{-7}$
$a = 0,9700084987393947$		

B.2.2 Redes Não Space-Filling

Tabela 22: D2V12n, duas redes de terceira ordem.

ξ_{ij}	i	W_{i1}	W_{i2}
$(\pm a_j, 0)$	4	$\frac{1}{45} (5 + 2\sqrt{5})$	$1/36$
$(\pm b_j, \pm b_j)$	4	$1/36$	$\frac{1}{45} (5 + 2\sqrt{5})$
$(\pm c_j, 0)$	4	$\frac{1}{45} (5 - 2\sqrt{5})$	0
$(\pm d_j, \pm d_j)$	4	0	$\frac{1}{45} (5 - 2\sqrt{5})$
$a_1 = \sqrt{\frac{3}{2} (3 - \sqrt{5})}, \quad b_1 = \sqrt{3}, \quad c_1 = \sqrt{\frac{3}{2} (3 + \sqrt{5})},$ $a_2 = \sqrt{6}, \quad b_2 = \sqrt{\frac{3}{4} (3 - \sqrt{5})}, \quad d_2 = \sqrt{\frac{3}{4} (3 + \sqrt{5})}.$			

Tabela 23: D2V17n, rede de quarta ordem incompleta.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0)$	1	$2,91120705068934 \times 10^{-1}$
$(\pm a, 0)$	4	$1,17544259079499 \times 10^{-1}$
$(\pm a, \pm a)$	4	$4,99848074155116 \times 10^{-2}$
$(\pm b, 0)$	4	$7,38568353112397 \times 10^{-3}$
$(\pm c, \pm c)$	4	$2,30507370663218 \times 10^{-3}$
$a = 1,36967763379$		$c = 2,38098279882$
$b = 2,98493018050$		

Tabela 24: D2V19n, rede de quarta ordem.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0)$	1	$\frac{31}{96}$
$a(\sin(\pi i/3), \cos(\pi i/3))$	6	$\frac{605+151\sqrt{15}}{11520}$
$b(\sin(\pi i/3 + \pi/6), \cos(\pi i/3 + \pi/6))$	6	$\frac{1}{128}$
$c(\sin(\pi i/3), \cos(\pi i/3))$	6	$\frac{605-151\sqrt{15}}{11520}$
$a = 2\sqrt{\frac{2}{7} (6 - \sqrt{15})}, \quad b = 2\sqrt{2}, \quad c = 2\sqrt{\frac{2}{7} (6 + \sqrt{15})}$		

Tabela 25: D2V20n, rede de quarta ordem.

ξ_i	i	W_i
$(\pm a, \pm a)$	4	$1,88925845284202 \times 10^{-1}$
$(\pm b, 0)$	4	$3,93820098682627 \times 10^{-2}$
$(\pm c, \pm c)$	4	$2,08333333333333 \times 10^{-2}$
$(\pm d, \pm e)$	8	$4,29405757101158 \times 10^{-4}$
$a = 0,68125003863$		$d = 1,3665853546$
$b = 2,17532774716$		$e = 3,6873494659$
$c = 1,73205080757$		

Tabela 26: D2V21n, rede de quarta ordem.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0)$	1	$2,05660006833783 \times 10^{-1}$
$(\pm a, \pm a)$	4	$1,40509662171466 \times 10^{-1}$
$(\pm b, 0)$	4	$4,38226426701393 \times 10^{-2}$
$(\pm c, \pm c)$	4	$1,24095396776270 \times 10^{-2}$
$(\pm 3d, \pm d)$	8	$9,21576886161059 \times 10^{-4}$
$a = 0,84919384991$		$c = 1,8616199350$
$b = 2,06813606112$		$d = 1,1386549808$

Tabela 27: D2V28n, rede de quinta ordem.

ξ_i	i	W_i
$(\pm a, \pm a)$	4	$1,65178143204339 \times 10^{-1}$
$(\pm b, 0)$	4	$4,76436948919026 \times 10^{-2}$
$(\pm c, \pm c)$	4	$3,13893609813488 \times 10^{-2}$
$(\pm 2d, \pm d)$	8	$2,60416666666667 \times 10^{-3}$
$(\pm e, 0)$	4	$5,66775193567500 \times 10^{-4}$
$(\pm f, \pm f)$	4	$1,36923955088259 \times 10^{-5}$
$a = 0,60908304548$		$d = 1,4142135623$
$b = 1,96450120032$		$e = 3,6707040697$
$c = 1,45841718745$		$f = 3,4441308266$

B.3 Redes Tridimensionais

B.3.1 Redes Space-Filling

Tabela 28: D3Q15, rede de segunda ordem.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0, 0)$	1	2/9
$(\pm a, 0, 0)$	6	1/9
$(\pm a, \pm a, \pm a)$	8	1/72
$a = \sqrt{3}$		

Tabela 29: D3Q19, rede de segunda ordem.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0, 0)$	1	1/3
$(\pm a, 0, 0)$	6	1/18
$(\pm a, \pm a, 0)$	12	1/36
$a = \sqrt{3}$		

Tabela 30: D3V39, rede de terceira ordem.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0, 0)$	1	1/12
$(\pm a, 0, 0)$	6	1/12
$(\pm a, \pm a, \pm a)$	8	1/27
$(\pm 2a, 0, 0)$	6	2/135
$(\pm 2a, \pm 2a, 0)$	12	1/432
$(\pm 3a, 0, 0)$	6	1/1620
$a = \sqrt{3/2}$		

Tabela 31: D3V41, rede de terceira ordem.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0, 0)$	1	$\frac{1}{500} (955 - 59\sqrt{193})$
$(\pm a, 0, 0)$	6	$\frac{3863\sqrt{193}-50135}{54000}$
$(\pm a, \pm a, 0)$	12	$\frac{186624}{125(25+\sqrt{193})^3}$
$(\pm a, \pm a, \pm a)$	8	$\frac{1051\sqrt{193}-14395}{54000}$
$(\pm 2a, \pm 2a, \pm 2a)$	8	$\frac{685-49\sqrt{193}}{108000}$
$(\pm 3a, 0, 0)$	6	$\frac{1445-101\sqrt{193}}{162000}$
$a = \frac{1}{6}\sqrt{\frac{5}{2}} (25 + \sqrt{193})$		

Tabela 32: D3V59, rede de quarta ordem incompleta.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0, 0)$	1	$9,58789162377528 \times 10^{-2}$
$(\pm a, 0, 0)$	6	$7,31047082129148 \times 10^{-2}$
$(\pm a, \pm a, 0)$	12	$3,46588971093380 \times 10^{-3}$
$(\pm a, \pm a, \pm a)$	8	$3,66108082044515 \times 10^{-2}$
$(\pm 2a, 0, 0)$	6	$1,59235232232060 \times 10^{-2}$
$(\pm 2a, \pm 2a, 0)$	12	$2,52480845105094 \times 10^{-3}$
$(\pm 2a, \pm 2a, \pm 2a)$	8	$7,26968662515159 \times 10^{-5}$
$(\pm 3a, 0, 0)$	6	$7,65879439346840 \times 10^{-4}$
$a = 1,20288512331026$		

Tabela 33: D3V107, rede de quarta ordem.

ξ_i	i	W_i
$(0, 0, 0)$	1	$7,57516860965017 \times 10^{-2}$
$(\pm a, 0, 0)$	6	$6,00912802747447 \times 10^{-2}$
$(\pm a, \pm a, 0)$	12	$3,13606906699535 \times 10^{-3}$
$(\pm a, \pm a, \pm a)$	8	$3,63392812078012 \times 10^{-2}$
$(\pm 2a, 0, 0)$	6	$1,32169332731492 \times 10^{-2}$
$(\pm 2a, \pm a, 0)$	24	$4,48492851172950 \times 10^{-3}$
$(\pm 2a, \pm 2a, 0)$	12	$2,48755775808342 \times 10^{-3}$
$(\pm 3a, \pm a, \pm a)$	24	$6,07432754970149 \times 10^{-4}$
$(\pm 2a, \pm 2a, \pm 2a)$	8	$4,64179164402822 \times 10^{-4}$
$(\pm 4a, 0, 0)$	6	$4,51928894609872 \times 10^{-5}$
$a = 1,07182071542885$		

B.3.2 Redes Não Space-Filling

Tabela 34: D3V27n, duas redes de terceira ordem.

ξ_{ij}	i	W_{i1}	W_{i2}
(0, 0, 0)	1	$\frac{8(90-\sqrt{15})}{2205}$	$\frac{8(90+\sqrt{15})}{2205}$
($\pm a_j, 0, 0$)	6	$\frac{270+46\sqrt{15}}{15435}$	$\frac{270-46\sqrt{15}}{15435}$
($\pm b_j, \pm b_j, 0$)	12	$\frac{162-41\sqrt{15}}{6174}$	$\frac{162+41\sqrt{15}}{6174}$
($\pm c_j, \pm c_j, \pm c_j$)	8	$\frac{783+202\sqrt{15}}{24696}$	$\frac{783-202\sqrt{15}}{24696}$
$a_1 = \sqrt{\frac{1}{2}(15 - \sqrt{15})}$	$b_1 = \sqrt{6 + \sqrt{15}}$	$c_1 = \sqrt{9 - 2\sqrt{15}}$	
$a_2 = \sqrt{\frac{1}{2}(15 + \sqrt{15})}$	$b_2 = \sqrt{6 - \sqrt{15}}$	$c_2 = \sqrt{9 + 2\sqrt{15}}$	

Tabela 35: D3V33n, rede de quarta ordem incompleta.

ξ_i	i	W_i
(0, 0, 0)	1	$1,69544317872168 \times 10^{-1}$
($\pm a, 0, 0$)	6	$7,53752058968985 \times 10^{-2}$
($\pm b, \pm b, \pm b$)	8	$3,90045337112442 \times 10^{-2}$
($\pm c, 0, 0$)	6	$6,86518217744201 \times 10^{-3}$
($\pm d, \pm d, 0$)	12	$2,08142366598628 \times 10^{-3}$
$a = 1,07182071542885$	$c = 2,92338002226218$	
$b = 1,21422495340964$	$d = 2,49326392161601$	

Tabela 36: D3V53n, rede de quarta ordem.

ξ_i	i	W_i
(0, 0, 0)	1	$1,60453547343974 \times 10^{-1}$
($\pm a, 0, 0$)	6	$7,17493485726724 \times 10^{-2}$
($\pm b, \pm b, \pm b$)	8	$3,85210759331158 \times 10^{-2}$
($\pm c, \pm d, 0$)	24	$4,11522633744856 \times 10^{-3}$
($\pm e, \pm e, \pm e$)	8	$2,44958972443801 \times 10^{-4}$
($\pm f, 0, 0$)	6	$2,61083127915713 \times 10^{-5}$
$a = 1,45239166695403$	$d = 2,66422150193135$	
$b = 1,12267801869052$	$e = 2,40894358132745$	
$c = 1,37910253014295$	$f = 4,81788716265490$	

APÊNDICE C – Lista de Publicações

Durante a confecção desta tese os seguintes artigos foram publicados e podem servir como referência adicional:

C.1 Congressos e Conferências

- SURMAS, Rodrigo; SANTOS, Luis Orlando Emerich dos; PHILIPPI, Paulo Cesar. *Características da Formação de Desprendimento de Vórtices em Grupos de Cilindros*. Em: Segundo Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás, 2003, Rio de Janeiro, Brasil.
- HAVERROTH, Guilherme Eller; SURMAS, Rodrigo; HEGELE, Luiz Adolfo. *Validação do modelo de Lattice-Boltzmann a vários tempos de relaxação para escoamento em torno de cilindros*. Em: XII Congresso Nacional de Estudantes de Engenharia Mecânica, 2005, Ilha Solteira, Brasil.
- CARELLI, Daniel; SURMAS, Rodrigo; HEGELE, Luiz Adolfo. *Simulações de fluidos utilizando a equação generalizada de Boltzmann*. Em: XII Congresso Nacional de Estudantes de Engenharia Mecânica, 2005, Ilha Solteira, Brasil.
- DA SILVA, Michael Frederico Paiva; SURMAS, Rodrigo; DOS SANTOS, Luis Orlando Emerich; PHILIPPI, Paulo César. *Analysis of contact angle in capillary invasion*. Em: 18th International Congress of Mechanical Engineering, COBEM 2005, 6 a 11 de novembro, 2005, Ouro Preto, Brasil.
- HEGELE JR, Luiz Adolfo; SURMAS, Rodrigo; SIEBERT, Diogo; DOS SANTOS, Luís Orlando Emerich; PHILIPPI, Paulo César. *Thermal Lattice-Boltzmann in Two Dimensions*. Em: DSFD 2006, Discrete Simulation of Fluid Dynamics, 21 a 25 de agosto, 2006, Genebra, Suíça.
- PHILIPPI, Paulo César; HEGELE JR, Luiz Adolfo; SURMAS, Rodrigo; SIEBERT, Diogo; DOS SANTOS, Luís Orlando Emerich. *From the Continuous to the lattice-*

Boltzmann Equation: Beyond BGK Collision Models. Em: DSFD 2006, Discrete Simulation of Fluid Dynamics, 21 a 25 de agosto, 2006, Genebra, Suíça.

- PICO, Carlos Enrique; SURMAS, Rodrigo; PHILIPPI, Paulo César. *Volume Exclusion for Reducing Compressibility Effects in Lattice Boltzmann Models.* Em: DSFD 2006, Discrete Simulation of Fluid Dynamics, 21 a 25 de agosto, 2006, Genebra, Suíça.
- PHILIPPI, Paulo César; DOS SANTOS, Luís Orlando Emerich; ORTIZ, Carlos Enrique Pico; WOLF, Fabiano Gilberto; HEGELE JR, Luis Adolfo; SURMAS, Rodrigo; SIEBERT, Diogo Nardeli. *Discrete methods in microhydrodynamics* (invited lecture). Em: 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, ENCIT, 2006, Curitiba.
- SURMAS, Rodrigo; PICO, Carlos Enrique; PHILIPPI, Paulo César. *Simulating thermohydrodynamics by finite difference solutions of the discrete Boltzmann equation.* Em: DSFD 2007, 16th Discrete Simulation of Fluid Dynamics: Micro, Nano and Multiscale Physics for Emerging Technologies, 23 a 27 de julho, 2007, Banff, Canadá.
- CARBONI, Julian Machado; SURMAS, Rodrigo and PHILIPPI, Paulo César. *Simulação do Tubo de Choque Utilizando o Método de Boltzmann para Redes.* Em: XIV Congresso Nacional de Estudantes de Engenharia Mecânica, CREEM 2007, Uberlândia, MG.
- NALIN, Daniel; SURMAS, Rodrigo; PICO, Carlos Enrique and PHILIPPI, Paulo César. *Determinação da Permeabilidade Absoluta Utilizando o Método de Boltzmann para Redes.* Em: XIV Congresso Nacional de Estudantes de Engenharia Mecânica, CREEM 2007, Uberlândia, MG.
- TEIXEIRA, Antonio Vinicius Gomes; SURMAS, Rodrigo and PHILIPPI, Paulo César. *Simulações de Decomposição Espinodal Hidrodinâmica Utilizando o Método de Boltzmann para Redes.* Em: XIV Congresso Nacional de Estudantes de Engenharia Mecânica, CREEM 2007, Uberlândia, MG.
- CARELLI, Daniel; PHILIPPI, Paulo Cesar; SURMAS, Rodrigo; WOLF, Fabiano G. and LACERDA, Vicente F. *Measurement of Liquid-Fluid Interfacial Tension by the Pendant Drop Method Using Image Analysis.* Em: 19th International Congress of Mechanical Engineering, 5 a 9 de novembro, 2007, Brasília, Brasil.
- TEIXEIRA, Antonio Vinicius Gomes; SURMAS, Rodrigo; HEGELE JR., Luiz Adolfo; DOS SANTOS, Luís Orlando Emerich; PHILIPPI, Paulo César. *Lattice*

Boltzmann Simulation of Hydrodynamical Spinodal Decomposition. Em: 19th International Congress of Mechanical Engineering, 5 a 9 de novembro, 2007, Brasília, Brasil.

C.2 Artigos

- SURMAS, Rodrigo; SANTOS, Luis Orlando Emerich dos; PHILIPPI, Paulo Cesar. *Flow Interference in Bluff Body Wakes.* Em: LECTURE NOTES IN COMPUTER SCIENCE, 2657, 967-976, 2003.
- SURMAS, Rodrigo; SANTOS, Luis Orlando Emerich dos; PHILIPPI, Paulo Cesar. *Lattice Boltzmann Simulation of the Flow Interference in Bluff Body Wakes.* Em: FUTURE GENERATION COMPUTER SYSTEMS, Volume 20, Issue 6, 951-958. Agosto de 2004.
- PHILIPPI, Paulo César; HEGELE, Luiz Adolfo; DOS SANTOS, Luís Orlando Emerich; SURMAS, Rodrigo. *From The Continuous to the Lattice Boltzmann Equation: The Discretization Problem and Thermal Models.* Em: PHYSICAL REVIEW E, Volume 73, Issue 5, Artigo No. 056702, Parte 2, Maio de 2006.
- SIEBERT, Diogo Nardelli; HEGELE Jr., Luiz Adolfo; SURMAS, Rodrigo; SANTOS, Luís Orlando Emerich dos e PHILIPPI, Paulo César. *Thermal Lattice Boltzmann in Two Dimensions.* Em: INTERNATIONAL JOURNAL OF MODERN PHYSICS C, Volume 18, Issue 4, 546-555. Abril de 2007.
- PHILIPPI, Paulo César; HEGELE Jr., Luiz Adolfo; SURMAS, Rodrigo; SIEBERT, Diogo Nardelli; SANTOS, Luís Orlando Emerich dos. *From the Boltzmann to the Lattice Boltzmann Equation: Beyond BGK Collision Models.* Em: INTERNATIONAL JOURNAL OF MODERN PHYSICS C, Volume 18, Issue 4, 556-565. Abril de 2007.
- SURMAS, Rodrigo; PICO, Carlos Enrique; SANTOS, Luis Orlando Emerich dos e PHILIPPI, Paulo Cesar. *Volume Exclusion for Reducing Compressibility Effects in Lattice Boltzmann Models.* Em: INTERNATIONAL JOURNAL OF MODERN PHYSICS C, Volume 18, Issue 4, 576-584. Abril de 2007.
- SURMAS, Rodrigo; PICO, Carlos Enrique e PHILIPPI, Paulo Cesar. *Simulating Thermohydrodynamics by Finite Difference Solutions of the Boltzmann Equation.* Em: EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL - SPECIAL TOPICS, Volume 171, 81-90, 2009.

Referências

- 1 SHAN, X.; YUAN, X.-F.; CHEN, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier–Stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 550, p. 413–441, Março 2006.
- 2 PHILIPPI, P. C. et al. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 73, n. 5, p. 056702, Maio 2006.
- 3 CERCIGNANI, C. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. Segunda edição. Nova York: Plenum Press, 1990.
- 4 BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- 5 KARNIADAKIS, G.; BESKOK, A.; ALURU, N. *Microflows and Nanoflows - Fundamentals and Simulation*. Londres: Springer, 2005.
- 6 FRENKEL, D.; SMIT, B. *Understanding Molecular Simulation - From Algorithms to Applications*. Nova York: Elsevier Academic Press, 2002.
- 7 CERCIGNANI, C. *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Londres: Springer-Verlag, 1988.
- 8 HARRIS, S. *An Introduction to the Theory of the Boltzmann Equation*. Nova York: Dover Publications, 2004. ISBN 0-486-43831-7.
- 9 CERCIGNANI, C. *Rarefied Gas Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- 10 HUANG, K. *Statistical Mechanics*. Hoboken, EUA: John Wiley and Sons, 1987.
- 11 BRUSH, S. G.; HALL, N. S. *The Kinetic Theory of Gases - An Anthology of Classical Papers with Historical Commentary*. Londres: Imperial College Press, 2003.
- 12 KREMER, G. M. *Uma introdução a equação de Boltzmann*. São Paulo: Edusp, 2005.
- 13 SUCCI, S.; KARLIN, I. V.; CHEN, H. Colloquium: Role of the H theorem in lattice Boltzmann hydrodynamic simulations. *Reviews of Modern Physics*, v. 74, p. 1203–1220, 2002.
- 14 BHATNAGAR, P.; GROSS, E.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, American Physical Society, v. 94, n. 3, p. 511–525, Maio 1954.
- 15 CHEN, S.; DOOLEN, G. D. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 30, n. 1, p. 329–364, 1998.

- 16 GROSS, E. P.; JACKSON, E. A. Kinetic models and the linearized Boltzmann equation. *Physics of Fluids*, v. 2, p. 432, Julho 1959.
- 17 PHILIPPI, P. C. et al. Deriving thermal lattice-Boltzmann models from the continuous Boltzmann equation: theoretical aspects. *arXiv.org e-Print archive*, <http://arxiv.org/>, n. 0506064, p. 0506064, 2005.
- 18 PHILIPPI, P. C. et al. From the Boltzmann to the lattice-Boltzmann equation: beyond BGK collision models. *International Journal of Modern Physics C*, v. 18, p. 556–565, 2007.
- 19 SUCCI, S. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford: Clarendon Press, 2001.
- 20 CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Terceira edição. Cambridge: Cambridge University Press, 1970.
- 21 SOFONEA, V.; SEKERKA, R. F. Diffuse-reflection boundary conditions for a thermal lattice Boltzmann model in two dimensions: Evidence of temperature jump and slip velocity in microchannels. *Physical Review E*, v. 71, p. 066709, 2005.
- 22 MCNAMARA, G.; ALDER, B. Analysis of the lattice Boltzmann treatment of hydrodynamics. *Physica A*, v. 194, p. 218–228, Março 1993.
- 23 GRAD, H. *Handbuch der Physik 12, Principles of the Kinetic Theory of Gases*. Londres: Springer, 1958.
- 24 AGARWAL, R. K.; YUN, K.-Y.; BALAKRISHNAN, R. Beyond Navier-Stokes: Burnett equations for flows in the continuum-transition regime. *Physics of Fluids*, v. 13 (10), p. 3061–3085, 2001.
- 25 QIAN, Y.-H.; D'HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhysics Letters*, v. 17, n. 6, p. 479–484, 1992.
- 26 QIAN, Y.-H.; ZHOU, Y. *On higher order dynamics in lattice-based models using Chapman-Enskog method, Number 99-21*. Hampton, Virginia, EUA, 1999.
- 27 LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: Acoustic and thermal properties in two and three dimensions. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 68, n. 3, p. 036706, 2003.
- 28 SIEBERT, D. N. *Análise de Formas Discretas da Equação de Boltzmann para Problemas Térmicos Bi-dimensionais*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.
- 29 ROTHMAN, D. H.; ZALESKI, S. *Lattice gas cellular automata*. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- 30 RIVET, J.-P.; BOON, J. P. *Lattice Gas Hydrodynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001. (Cambridge Nonlinear Science Series, v. 11).
- 31 CHOPARD, B.; DROZ, M. *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.

- 32 SANTOS, L. O. E.; FACIN, P. C.; PHILIPPI, P. C. Lattice-Boltzmann model based on field mediators for immiscible fluids. *Physical Review E*, APS, v. 68, n. 5, p. 056302, 2003. Disponível em: <<http://link.aps.org/abstract/PRE/v68/e056302>>.
- 33 ARIAS, V.; MENDOZA, M.; MUÑOZ, J. D. Galaxy dynamics simulation using a lattice Boltzmann model. In: *17th Discrete Simulation of Fluid Dynamics*. Florianópolis, SC: [s.n.], 2008.
- 34 DELLAR, P. J. Lattice kinetic schemes for magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, v. 179 (1), p. 95–126, 2002.
- 35 CAO, N. et al. Physical symmetry and lattice symmetry in the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, v. 55, p. R21–R24, 1997.
- 36 HE, X.; LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 56, n. 6, p. 6811–6817, Dezembro 1997.
- 37 SOFONEA, V.; SEKERKA, R. F. Viscosity of finite difference lattice Boltzmann models. *Journal of Computational Physics*, v. 184, p. 422–434, 2003.
- 38 WATARI, M.; TSUTAHARA, M. Possibility of constructing a multispeed Bhatnagar-Gross-Krook thermal model of the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, v. 70, p. 016703, 2004.
- 39 ABE, T. Derivation of the lattice Boltzmann method by means of the discrete ordinate method for the Boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, v. 131, p. 241–246, 1997.
- 40 SHAN, X.; HE, X. Discretization of the velocity space in the solution of the Boltzmann equation. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 80, n. 1, p. 65–68, Janeiro 1998.
- 41 FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 56, n. 14, p. 1505–1508, Abril 1986.
- 42 GLEICK, J. Fluid math made simple - sort of. *The New York Times*, 19 de Abril 1987.
- 43 MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 61, n. 20, p. 2332–2335, Novembro 1988.
- 44 HIGUERA, F.; JIMENEZ, J. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *Europhysics Letters*, v. 9, n. 663, p. 663–669, 1989.
- 45 LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 61, n. 6, p. 6546–6562, Junho 2000.
- 46 CHEN, S. et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 67, n. 27, p. 3776–3779, Dezembro 1991.

- 47 PICO, C. E. *Aplicação das formas discretas da equação de Boltzmann à termo-hidrodinâmica de misturas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.
- 48 BENZI, R. et al. Mesoscopic modelling of heterogeneous boundary conditions for microchannel flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 548, p. 257–280, 2006.
- 49 JUNK, M.; KLAR, A.; LUO, L.-S. Asymptotic analysis of the lattice Boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, v. 210, p. 676–704, 2005.
- 50 SBAGAGLIA, M.; SUCCI, S. A note on the lattice Boltzmann method beyond the Chapman-Enskog limits. *Europhysics Letters*, v. 73, p. 370–376, 2006.
- 51 LEVEQUE, R. J. *Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- 52 LEE, T.; LIN, C.-L. A characteristic Galerkin method for discrete Boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, v. 171, p. 336–356, 2001.
- 53 UBERTINI, S.; BELLA, G.; SUCCI, S. Lattice Boltzmann method on unstructured grids: Further developments. *Physical Review E*, v. 68, p. 016701, 2003.
- 54 TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Segunda edição. Washington: Taylor and Francis, 1997.
- 55 SIEBERT, D. N. et al. Thermal lattice Boltzmann in two dimensions. *International Journal of Modern Physics C*, v. 18, p. 546–555, 2007.
- 56 SURMAS, R.; PICO, C. E.; PHILIPPI, P. C. Simulating thermohydrodynamics by finite difference solutions of the boltzmann equation. *European Physical Journal - Special Topics*, v. 171, p. 81–90, 2009.
- 57 CHIKATAMARLA, S. S.; KARLIN, I. V. Entropy and Galilean invariance of lattice Boltzmann theories. *Physical Review Letters*, v. 97, p. 190601, 2006.
- 58 ALEXANDER, F. J.; CHEN, S.; STERLING, J. D. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 47, n. 4, p. 2249–2252, Abril 1993.
- 59 CHEN, Y.; OHASHI, H.; AKIYAMA, M. Thermal lattice Bhatnagar-Gross-Krook model without nonlinear deviations in macrodynamic equations. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 50, n. 4, p. 2776–2783, Outubro 1994.
- 60 PAVLO, P.; VAHALA, G.; VAHALA, L. Preliminary results in the use of energy-dependent octagonal lattices for thermal lattice Boltzmann simulations. *Journal of Statistical Physics*, v. 107, p. 499–519, 2002.
- 61 HE, X.; CHEN, S.; DOOLEN, G. D. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit. *Journal of Computational Physics*, v. 146, n. CP986057, p. 282–300, Outubro 1998.
- 62 COOLS, R. An encyclopaedia of cubature formulas. *Journal of Complexity*, v. 19(3), p. 445–453, 2003.

- 63 ANSUMALI, S.; KARLIN, I. Kinetic boundary conditions in the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 66, n. 2, p. 026311, Agosto 2002.
- 64 ZOU, Q.; HE, X. *On pressure and velocity flow boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model*. 1995. Disponível em: <<http://www.citebase.org/cgi-bin/citations?id=oai:arXiv.org:comp-gas/9508001>>.
- 65 MCNAMARA, G. R.; GARCIA, A. L.; ALDER, B. Stabilization of thermal lattice Boltzmann models. *Journal of Statistical Physics*, v. 81, p. 395, 1995.
- 66 SKORDOS, P. A. Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, v. 48, n. 6, p. 4823–4842, 1993.
- 67 NIE, X. B.; SHAN, X.; CHEN, H. Galilean invariance of lattice boltzmann models. *Europhysics Letters*, v. 81, p. 1–6, 2008.
- 68 SOD, G. A. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, v. 27, p. 1–31, 1978.
- 69 ANDERSON, J. D. *Modern Compressible Flow: With Historical Perspective*. Terceira edição. Nova York: McGraw-Hill, 2003.
- 70 GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. T. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, v. 48, p. 387–411, 1982.
- 71 KRUGER, T.; VARNIK, F.; RAABE, D. Shear stress in lattice Boltzmann simulations. *Physical Review E*, v. 79, p. 046704, 2009.
- 72 PAN, C.; LUO, L.-S.; MILLER, C. T. An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation. *Computers and Fluids*, v. 35, p. 898–909, 2006.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)