



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

André Luiz Gonçalves Caetano

**Condições de Contorno para Modelos de Alta Ordem da Equação Discreta
de Boltzmann**

Florianópolis
2020

André Luiz Gonçalves Caetano

**Condições de Contorno para Modelos de Alta Ordem da Equação Discreta
de Boltzmann**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica da Universidade Federal de
Santa Catarina para a obtenção do título de dou-
tor em engenharia mecânica.

Orientador: Arcanjo Lenzi, Ph.D.

Florianópolis

2020

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Caetano, André Luiz Gonçalves
Condições de Contorno para Modelos de Alta Ordem da
Equação Discreta de Boltzmann / André Luiz Gonçalves Caetano
; orientador, Arcanjo Lenzi, 2020.
162 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2020.

Inclui referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. método lattice Boltzmann. 3.
esquemas de alta ordem. 4. condições de contorno cinéticas.
5. escoamentos compressíveis. I. Lenzi, Arcanjo. II.
Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós
Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

André Luiz Gonçalves Caetano

**Condições de Contorno para Modelos de Alta Ordem da Equação Discreta
de Boltzmann**

O presente trabalho em nível de doutorado foi avaliado e aprovado por banca
examinadora composta pelos seguintes membros:

Ricardo Eduardo Musafir, D.Sc.
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Luís Orlando Emerich dos Santos, Dr. Eng.
Universidade Federal de Santa Catarina

Andrey Ricardo da Silva, Ph.D.
Universidade Federal de Santa Catarina

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi
julgado adequado para obtenção do título de doutor em engenharia mecânica.

Coordenação do Programa de
Pós-Graduação

Arcanjo Lenzi, Ph.D.
Orientador

Florianópolis, 2020.

RESUMO

A utilização de esquemas de alta ordem no método lattice Boltzmann para a simulação de fenômenos totalmente compressíveis e térmicos ainda esbarra na dificuldade de aplicação de condições de contorno consistentes. Dentre as várias condições propostas na literatura, a condição de contorno difusa, baseada diretamente na teoria cinética, se apresenta como a mais sólida, e é o objeto de estudo deste trabalho. Uma nova forma de implementação dessa condição de contorno, que permite ajustar diferentes fatores de escorregamento e acomodação térmica, é proposta, sendo sua eficácia testada diante de vários casos clássicos da mecânica dos fluidos computacional. É também apresentada uma exposição teórica a fim de estabelecer uma conexão sistemática entre a teoria cinética e a equação de lattice Boltzmann, permitindo a construção de modelos com qualquer ordem de aproximação à equação contínua de Boltzmann, incluindo a incorporação de forças externas e modelos de colisão com múltiplos tempos de relaxação. O modelo proposto é utilizado na simulação de um escoamento confinado, turbulento, compressível e térmico que passa por uma súbita expansão. Os resultados indicam que o método é um candidato viável para a simulação de fenômenos compressíveis e térmicos.

Palavras-chave: método lattice Boltzmann. esquemas de alta ordem. condições de contorno cinéticas. escoamentos compressíveis.

ABSTRACT

The application of higher-order lattice Boltzmann schemes in fully compressible and thermal flows lead to the challenge of modelling consistent boundary conditions to the underlying simulations. Among different boundary conditions proposed in the literature, the diffuse one appears to be the most reliable formulation. This thesis presents a new way of implementing the diffuse boundary condition that can handle both different slip factors and thermal accommodation. The proposed method has been systematically investigated to assess its accuracy in simulating classical problems. A theoretical formulation is introduced in order to establish a systematic link between the kinetic theory and the lattice Boltzmann equation, which allows the development of models with any order of approximation to the continuous Boltzmann equation and the application of external forces together with collision models of multiple relaxation times. The proposed model is applied to a confined, turbulent, compressible and thermal flow that undergoes a sudden expansion. The results indicate that the proposed method is a good candidate for the simulation of compressible and thermal flows.

Keywords: lattice Boltzmann method. high-order models. kinetic boundary conditions. compressible viscous flow.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Estado de uma molécula no espaço de hexadimensional μ . Por definição, o número de moléculas dentro do volume $d\vec{x}d\vec{\xi}$ é dado por $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{x}d\vec{\xi}$ (adaptado de (HUANG, 2000)).	24
Figura 2 – Projeção da área dS sobre o plano que separa os dois hemisférios. O eixo \mathbf{z} está alinhado com a velocidade relativa $(\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1)$, de forma que, do ponto de vista de um observador se movimentando com $\vec{\xi}_1$, as partículas com velocidade $\vec{\xi}_2$ entram na esfera pelo hemisfério norte e deixam a esfera pelo hemisfério sul.	34
Figura 3 – Conjunto de velocidades da rede D2Q9.	49
Figura 4 – Diferentes condições antes e após a etapa de propagação. (a) Velocidades discretas em um ponto próximo à parede antes da propagação. (b) Posições ocupadas por essas velocidades após a propagação. Em azul, as velocidades que deixam o domínio. (c) Pontos fora do domínio antes da etapa de propagação de onde viriam as funções de distribuição ocupadas em (d) após a propagação.	68
Figura 5 – Conjunto de velocidades discretas D2V37.	69
Figura 6 – Diferentes tipos de pontos em um domínio.	69
Figura 7 – Diferentes conjuntos de funções de distribuição de acordo com a distância do ponto de fronteira à parede. (a) $\vec{x}_b = (0, 0)$, (b) $\vec{x}_b = (0, 1)$ e (c) $\vec{x}_b = (0, 2)$. Em vermelho, as funções que atingem as parede, e em azul, as funções incógnitas.	71
Figura 8 – Exemplo com o D2Q9.	72
Figura 9 – Condições de contorno do tipo (a) especular e (b) <i>bounce-back</i> . $\vec{\xi}$ é a velocidade antes da colisão e $\vec{\xi}'$ é a velocidade após a colisão.	72
Figura 10 – Condição de contorno difusa.	74
Figura 11 – Velocidades refletidas de acordo com a distância até a parede. Vermelho: Velocidade incidente; Preto: Velocidades refletidas; Azul: Velocidades refletidas cuja posição final é um ponto da rede.	76
Figura 12 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_3^{(x,0),O}$, $f_{14}^{(x,0),O}$, $f_{17}^{(x,0),O}$ e $f_{27}^{(x,1),O}$	77
Figura 13 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_6^{(x,0),O}$, $f_7^{(x,0),O}$, $f_{30}^{(x,0),O}$, $f_{31}^{(x,1),O}$, $f_{33}^{(x,1),O}$ e $f_{33}^{(x,0),O}$	78
Figura 14 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{11}^{(0,0),O}$	79
Figura 15 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{15}^{(0,0),O}$	80
Figura 16 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{16}^{(0,0),O}$	80
Figura 17 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{22}^{(0,0),O}$ e $f_{23}^{(0,0),O}$	81
Figura 18 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{27}^{(0,0),O}$	81

Figura 19 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{31}^{(0,0),O}$	82
Figura 20 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{32}^{(0,0),O}$	82
Figura 21 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{11}^{(0,1),O}$	83
Figura 22 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{15}^{(0,1),O}$	83
Figura 23 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{16}^{(0,1),O}$	84
Figura 24 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{22}^{(0,1),O}$ e $f_{23}^{(0,1),O}$	84
Figura 25 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{27}^{(0,2),O}$	85
Figura 26 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{31}^{(0,2),O}$	85
Figura 27 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{32}^{(0,2),O}$	86
Figura 28 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_2^{(0,0),O}$, $f_{15}^{(0,0),O}$, $f_{20}^{(0,0),O}$, $f_{26}^{(1,0),O}$, $f_6^{(0,0),O}$, $f_9^{(0,0),O}$, $f_{30}^{(1,0),O}$, $f_{31}^{(0,0),O}$, $f_{36}^{(0,0),O}$ e $f_{37}^{(1,0),O}$	87
Figura 29 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{10}^{(0,0),O}$ e $f_{14}^{(0,0),O}$	89
Figura 30 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{21}^{(0,0),O}$, $f_{22}^{(0,0),O}$ e $f_{25}^{(0,0),O}$	90
Figura 31 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{26}^{(0,0),O}$ e $f_{30}^{(0,0),O}$	91
Figura 32 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{37}^{(0,0),O}$ e $f_{10}^{(1,0),O}$	92
Figura 33 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{14}^{(1,0),O}$ e $f_{21}^{(1,0),O}$	93
Figura 34 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{22}^{(1,0),O}$, $f_{25}^{(1,0),O}$ e $f_{26}^{(2,0),O}$	94
Figura 35 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{30}^{(2,0),O}$ e $f_{37}^{(2,0),O}$	95
Figura 36 – Dimensões e condições de contorno para o problema da cavidade com tampa deslizante.	97
Figura 37 – Curva de convergência da raiz do erro quadrático médio, em relação aos valores de referência para a componente x da velocidade em $x = L/2$, em função do número de pontos na discretização para os números de Reynolds de (a) 100, (b) 400, (c) 1000 e (d) 5000.	98
Figura 38 – Comparação entre os perfis da componente x da velocidade em $x = L/2$ obtidos com 200 pontos de discretização e os valores de referência para os números de Reynolds de (a) 100, (b) 400, (c) 1000 e (d) 5000.	99
Figura 39 – Comparação entre o valor de convergência e o valor de referência da componente x da velocidade no centro da cavidade.	100
Figura 40 – Curva de convergência da raiz do erro quadrático médio, em relação aos valores de referência para a componente x da velocidade em $x = L/2$, em função do tempo de relaxação para os números de Reynolds de (a) 100, (b) 400, (c) 1000 e (d) 5000.	103
Figura 41 – Dimensões e condições de contorno para o escoamento de Couette com troca térmica.	109

Figura 42 – Resultados para o escoamento de Couette com troca térmica com diferentes números de Prandtl para $Kn = 1e-3$, $Ec = 2$ e números de Reynolds de (a),(b) 10 e (c),(d) 100.	110
Figura 43 – Resultados para o escoamento de Couette com troca térmica com diferentes números de Prandtl para $Kn = 1e-4$, $Ec = 2$ e números de Reynolds de (a),(b) 10 e (c),(d) 100.	111
Figura 44 – Meio poroso bidimensional composto por um conjunto de aletas rígidas	112
Figura 45 – Dimensões e condições de contorno do modelo numérico.	114
Figura 46 – Pulsos incidente e refletido junto ao conjunto de aletas. P_{est} é o valor da pressão no meio sem perturbação $P_{est} = \rho_0 RT_0$	115
Figura 47 – Erro quadrático médio no cálculo do valor do coeficiente de absorção em relação ao número de pontos utilizados na discretização do poro.	116
Figura 48 – Comparação analítico-numérica para o coeficiente de absorção obtido com 50 pontos na discretização do poro.	116
Figura 49 – Separação entre os mecanismos de dissipação viscoso e térmico pela imposição de diferentes números de Prandtl e valores limites quando $\nu = 0$ ($Pr \rightarrow 0, \rho_{eff} = \rho_0$) ou $\alpha = 0$ ($Pr \rightarrow \infty, K_{eff} = P_0 \gamma$).	117
Figura 50 – Aplicação de condições de contorno adiabáticas evitando a formação da camada limite térmica, resultando exclusivamente em mecanismos de absorção viscosos.	118
Figura 51 – Aplicação de condições de contorno de escorregamento evitando a formação da camada limite viscosa, resultando exclusivamente em mecanismos de absorção devido às trocas térmicas.	119
Figura 52 – Comparativo entre o coeficientes de absorção obtidos pela manipulação dos coeficientes de transporte e pela aplicação das condições de contorno (a) adiabática e (b) de escorregamento.	120
Figura 53 – Dimensões e condições de contorno para o escoamento de Poiseuille.	121
Figura 54 – Resultados para o escoamento de Poiseuille com diferentes números de Reynolds e Knudsen.	122
Figura 55 – Perfis de temperatura e densidade no escoamento de Poiseuille com baixo número de Knudsen e alto número de Reynolds.	123
Figura 56 – Dimensões e condições de contorno do problema da convecção natural em uma cavidade quadrada.	124
Figura 57 – Linhas de corrente para o problema da convecção natural em uma cavidade quadrada.	124
Figura 58 – Dimensões e condições de contorno para o problema da expansão súbita.	127
Figura 59 – Vazão mássica na seção de entrada e na seção de saída do sistema ao longo do tempo.	128

Figura 60 – Vorticidade em $t = 5,1322e-04$ s. Ao deixar o canal, dois vórtices se formam e são deslocados por convecção em direção à saída do domínio.	129
Figura 61 – Linhas de corrente em $t = 5,1322e-04$ s. Na entrada do domínio formam-se duas regiões de recirculação. Regiões de recirculação também se formam após a passagem dos vórtices. Na saída do domínio, tem-se um escoamento laminar.	129
Figura 62 – Vorticidade em $t = 0,0011$ s. As estruturas de vórtices coalescem e geram vórtices maiores. Novos vórtices se formam na camada limite separando o escoamento no centro do canal das zonas de recirculação.	130
Figura 63 – Linhas de corrente em $t = 0,0011$ s. As regiões de recirculação na entrada do domínio se intensificam. As regiões de recirculação resultantes das passagens dos vórtices geram um confinamento para o escoamento no centro do domínio. Essa condição é imediatamente anterior ao ponto 2.	130
Figura 64 – Vorticidade em $t = 0,0048$ s. O escoamento se encontra confinado por uma esteira de vórtices, de diferentes tamanhos e formas.	131
Figura 65 – Linhas de corrente em $t = 0,0048$ s. O escoamento é totalmente simétrico, com inúmeras zonas de recirculação fora do núcleo do escoamento.	131
Figura 66 – Detalhe do surgimento de um vórtice na camada limite com as linhas de corrente sobrepostas.	132
Figura 67 – Detalhe do surgimento de um segundo vórtice na camada limite imediatamente após o surgimento do vórtice anterior. A estrutura que conecta os dois vórtices é chamada de trança.	132
Figura 68 – Os vórtices se aproximam a ponto de a trança não mais existir. Uma região de recirculação se estabelece entre os dois vórtices.	133
Figura 69 – A região de recirculação direciona o segundo vórtice para dentro do escoamento no centro do canal. Na linha de corrente no centro do canal, a velocidade de convecção do segundo vórtice é aumentada.	133
Figura 70 – O segundo vórtice “ultrapassa” o primeiro vórtice, sendo desacelerado logo na sequência. Os dois vórtices se fundem em um vórtice maior.	134
Figura 71 – Densidade espectral de frequência da pressão ao longo da linha central durante a etapa de desprendimento simétrico de vórtices.	135
Figura 72 – Densidade espectral de frequência da pressão ao longo das paredes durante a etapa de desprendimento simétrico de vórtices.	136
Figura 73 – Vorticidade no início do marco 3. Há uma quebra de simetria dos vórtices que leva a uma deflexão das linhas de corrente.	136
Figura 74 – Linhas de corrente no início do marco 3. O fluxo que até então se desenvolvia confinado entre zonas de recirculação simétricas, começa a ser defletido.	137

Figura 75 – Vorticidade em $t = 0.0171$ s. Não se pode mais divisar nenhum padrão no escoamento.	137
Figura 76 – Linhas de corrente em $t = 0.0171$ s. O escoamento abre caminho em meio a várias zonas de recirculação, que se movem mudando de forma e tamanho.	137
Figura 77 – Densidade espectral de potência da pressão ao longo da linha central após o marco 3.	138
Figura 78 – Densidade espectral de potência da pressão ao longo das paredes após o marco 3.	138
Figura 79 – Número de Mach médio.	140
Figura 80 – Número de Reynolds médio.	140
Figura 81 – Linhas de corrente resultantes das velocidades médias.	140
Figura 82 – Diagrama de caixas da componente x da velocidade no centro do canal.	141
Figura 83 – Tensor de Reynolds.	141
Figura 84 – Energia cinética turbulenta.	142
Figura 85 – Pontos de deflexão do escoamento em diferentes instantes de tempo.	142
Figura 86 – Intensidade da turbulência.	143
Figura 87 – Intensidade da turbulência desconsiderando pontos com velocidade média próxima de zero.	143
Figura 88 – Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.	144
Figura 89 – Correlação espacial da componente x da velocidade no centro do canal.	145
Figura 90 – Densidade espectral da componente x da velocidade no centro do canal.	146

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – microestados possíveis para um mesmo macroestado (adaptado de (WILKS, 1963))	29
---	----

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BB	<i>Bounce-Back</i>
BBNE	<i>Bounce-Back</i> de Não Equilíbrio
ENE	Extrapolação de Não Equilíbrio
MD	<i>Molecular Dynamics</i>
NSE	<i>Navier-Stokes Equations</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier Stokes</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

$a_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}$	Coefficiente de ordem m de uma expansão de Hermite
a_s	Fator de escala da rede
α	Difusividade térmica; Coeficiente de acomodação; Coeficiente de absorção; Coeficiente de escorregamento
α^*	Difusividade térmica em unidades adimensionais da rede
β	Coeficiente de acomodação térmica; Coeficiente de expansão térmica
C	Função densidade de probabilidade composta por funções delta de Dirac
\vec{c}_i	i -ésima velocidade discreta
\vec{c}_i^*	Velocidade discreta adimensional
c_p	Calor específico a pressão constante
c_v	Calor específico a volume constante
d	Distância de um ponto do fluido até uma superfície segundo alguma direção discreta
D	Número de dimensões de um sistema
δ	Delta de Dirac; Tempo característico microscópico; Incremento de tempo
δ_f	Fator de conversão do tempo de unidades da rede para unidades físicas
δ_{ij}	Delta de Kronecker
$\partial\Omega$	Fronteira de um domínio
$\partial\mathbf{R}$	Fronteira de um domínio de simulação
E	Energia interna de um sistema; Densidade espectral de energia
$e_{c,f}$	Energia cinética associada a velocidade de flutuação
\vec{e}_i	i -ésima direção discreta de uma rede
$\vec{e}_{i\alpha}$	Componente α da i -ésima direção discreta
Ec	Número de Eckert
ϵ	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
ε	Parâmetro de perturbação
ε_i	Nível discreto de energia
f	Função de distribuição de massa de moléculas ou partículas
F	Função de distribuição de número de moléculas ou partículas
$f^{(0)}$	Função de distribuição de equilíbrio normalizada pela função de distribuição de equilíbrio de referência
f^N	Expansão de ordem N da função de distribuição
f_0	Função de distribuição de equilíbrio
f_i	Função de distribuição de massa de moléculas com velocidade \vec{c}_i
F_i	Força externa agindo sobre a i -ésima função de distribuição discreta

f_i^{eq}	Parte de equilíbrio da função de distribuição
$f_i^{\vec{x}_b, I}$	Função de distribuição que atinge a parede na etapa de propagação
$f_i^{\vec{x}_b, O}$	Função de distribuição que viria de fora do domínio na etapa de propagação
f_{i_e}	Função de distribuição na saída de um domínio
f_{MB}^{eq}	Função de distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann
\vec{g}^e	Força externa
g_i^{eq}	Função de distribuição de equilíbrio normalizada pela densidade
\vec{g}^{ld}	Força de longa distância entre partículas
γ	Razão de calores específicos
Γ	Unidade macroscópica de tempo
$\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m, n)}$	Tensor de relaxação
h	Incremento espacial
\mathcal{H}	Tensor de Hermite
H	Dimensão macroscópica
h_f	Fator de conversão espacial de unidades da rede para unidades físicas
I	Intensidade da turbulência
k	Energia cinética turbulenta; Número de onda
k_c	Número de onda complexo
K_{eff}	Módulo de compressibilidade equivalente
κ	Condutividade térmica
κ^*	Condutividade térmica em unidades adimensionais da rede
Kn	Número de Knudsen
l	Unidade microscópica de comprimento
L	Unidade macroscópica de comprimento
m	Massa de uma molécula ou partícula
M	Momento de uma função de distribuição
Ma	Número de Mach
μ	Espaço hexadimensional formado pelas coordenadas espaciais e de velocidade; Viscosidade dinâmica
μ^*	Viscosidade dinâmica em unidades adimensionais da rede
n	Ordem de uma expansão ou momento
N	Número de moléculas ou partículas; Número de pontos de discretização
\hat{n}	Vetor normal a uma superfície
N_i	Número médio de partículas com velocidade \vec{c}_i
ν	Viscosidade cinemática
ν^*	Viscosidade cinemática em unidades adimensionais da rede
\mathcal{O}	Ordem do erro de aproximação
ω	Frequência angular

Ω	Termo de colisão
Ω_i	Operador de colisão agindo sobre as partículas com velocidade $\vec{\xi}_i$
$\omega(\vec{x})$	Função geratriz dos tensores de Hermite
P	Função densidade de probabilidade; Pressão
P^-	Pressão refletida
P^*	Pressão em unidades da rede
P^+	Pressão incidente
ϕ	Função genérica; Parâmetro de perturbação; Porosidade
ϕ'	Valor de flutuação de uma função
$\bar{\phi}$	Valor médio de uma função
Pr	Número de Prandtl
R	Constante geral dos gases; Núcleo de espalhamento; Coeficiente de reflexão
R_{ij}	Fator de correlação espacial
Ra	Número de Rayleigh
\mathbf{R}	Domínio de simulação
Re	Número de Reynolds
ρ	Densidade
ρ^*	Densidade normalizada pela densidade de referência
ρ_0	Densidade de referência
ρ_{eff}	Densidade equivalente
s	Entropia
s_{ij}	Parte de flutuação do tensor taxa de deformação
σ	Raio de ação da força intermolecular
ς	Fator de conversão da velocidade de unidades da rede para unidades físicas
t	Tempo
T	Temperatura
t^*	Tempo adimensional
T_0	Temperatura de referência
T_w	Temperatura da parede
τ	Tempo de relaxação; Tempo que uma partícula fica em contato com uma superfície
τ_{in}	Tempo que uma partícula leva para atingir uma superfície
τ_{out}	Tempo restante após uma partícula atingir uma superfície
θ	Temperatura normalizada pela temperatura de referência
\vec{u}	Velocidade macroscópica
\vec{u}^*	Velocidade macroscópica em unidades adimensionais da rede

u_α^*	Componente α da velocidade macroscópica em unidades adimensionais da rede
u_c^*	Velocidade do som em unidades da rede
u_c	Velocidade do som
\vec{u}_w	Velocidade da parede
V	Volume
w_i	Peso de uma quadratura de Gauss-Hermite; Peso associado à função de distribuição discreta f_i
\vec{x}	Vetor posição
x^*	Coordenada espacial adimensional
\vec{x}_{b_0}	Ponto de origem de uma partícula que atinge uma superfície
\vec{x}_b	Posição de um ponto na fronteira do domínio
\vec{x}_f	Posição de um ponto que pertença ao fluido
\vec{x}_g	Posição de um ponto fictício
\vec{x}_i	Posição da i -ésima molécula ou partícula
\vec{X}_i	Força experimentada pela i -ésima partícula
\vec{x}_w	Posição de um ponto na parede que é atingido por uma função de distribuição
\mathbf{x}	Conjunto formado pelos vetores posição de todas as partículas
$\vec{\xi}$	Velocidade microscópica
ξ^*	Velocidade adimensional
$\vec{\xi}_0$	Velocidade microscópica normalizada pela velocidade de referência
$\vec{\xi}_{0_i}$	Abcissa de uma quadratura de Gauss-Hermite
$\vec{\xi}_i$	Velocidade da i -ésima molécula ou partícula
$\boldsymbol{\xi}$	Conjunto formado pelos vetores velocidade de todas as partículas
z	Variável aleatória
Z_c	Impedância equivalente
Z_s	Impedância de superfície

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	MOTIVAÇÃO	21
1.2	OBJETIVOS	21
1.2.1	Objetivo geral	21
1.2.2	Objetivos específicos	21
1.3	ESTRUTURA DO TRABALHO	21
2	A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN E SUA DISCRETIZAÇÃO	23
2.1	INTRODUÇÃO	23
2.2	A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN	24
2.3	A SOLUÇÃO DE EQUILÍBRIO	38
2.4	A EQUAÇÃO DISCRETA DE BOLTZMANN	40
2.5	DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE BOLTZMANN	43
2.6	COEFICIENTES DE TRANSPORTE	54
2.7	MODELOS DISCRETOS	61
3	CONDIÇÕES DE CONTORNO	67
3.1	INTRODUÇÃO	67
3.2	DEFINIÇÕES	67
3.3	CONDIÇÕES DE CONTORNO <i>BOUNCE-BACK</i> E ESPECULAR	70
3.4	CONDIÇÃO DE CONTORNO DIFUSA	74
4	VALIDAÇÕES NUMÉRICAS	96
4.1	INTRODUÇÃO	96
4.2	CAVIDADE COM TAMPA DESLIZANTE	96
4.3	ESCOAMENTO DE COUETTE COM TROCA TÉRMICA	102
4.3.1	Número de Prandtl variável	102
4.3.2	validação numérica	107
4.4	ABSORÇÃO SONORA EM MEIOS POROSOS RÍGIDOS	109
4.5	FORÇAS EXTERNAS	118
4.5.1	Escoamento de Poiseuille movido por uma força externa	120
4.5.2	Convecção natural em uma cavidade quadrada	123
5	ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL TURBULENTO ATRAVÉS DE UM CANAL SUBITAMENTE EXPANDIDO	125
5.1	INTRODUÇÃO	125
5.2	GEOMETRIA E CONDIÇÕES DE CONTORNO	125
5.3	RESULTADOS	128
5.3.1	Vazão mássica	128
5.3.2	dinâmica de desprendimento de vórtices	129
5.3.3	valores médios e valores de flutuação	135

6	CONCLUSÃO	147
6.1	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	148
	REFERÊNCIAS	150

1 INTRODUÇÃO

Em 1872, Ludwig Boltzmann apresentou a equação que hoje leva seu nome e figura como a mais importante equação da teoria cinética dos gases. A equação de Boltzmann descreve a evolução temporal de uma probabilidade, mais especificamente, descreve a evolução temporal do número provável de moléculas com uma certa velocidade encontradas dentro de um volume no espaço. A maior contribuição da equação de Boltzmann foi ter conseguido dar uma explicação matemática ao conceito termodinâmico de irreversibilidade, mas também, abriu caminho para uma nova forma de se abordar fenômenos hidrodinâmicos, já que, ao estabelecer uma equação para como as velocidades das moléculas se distribuem estatisticamente, Boltzmann estabeleceu também uma equação que descreve a evolução temporal de quaisquer propriedades macroscópicas de um fluido. Conseguir resolver de maneira satisfatória a equação de Boltzmann, contudo, permanece um enorme desafio.

Em 1986, contudo, uma descoberta mudou radicalmente a forma de se olhar para o movimento molecular. Uriel Frisch, Brosl Hasslacher e Yves Pomeau (FRISCH; HASLACHER; POMEAU, 1986) mostraram que um modelo atômico extremamente simplificado, constituído apenas de partículas idênticas, com velocidades idênticas e se movimentando apenas em algumas direções em uma rede regular era capaz de reproduzir as equações de Navier-Stokes. Esse modelo é conhecido como *lattice-gas* e, mais tarde, estudando como estimar a viscosidade resultante desse modelo, Michel Hénon (HÉNON, 1987) aplica uma das aproximações que Boltzmann assume na dedução de sua equação ao *lattice-gas*: a teoria do caos molecular. Na prática, essa aproximação significa que há independência estatística entre duas partículas, ou seja, que a probabilidade de se encontrar simultaneamente duas partículas com posições e velocidades $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2$ é igual ao produto das probabilidades de se encontrar individualmente essas duas partículas $P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2) = P^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1) P^{(1)}(\vec{x}_2, \vec{\xi}_2)$. A equação resultante dessa aproximação recebe o nome de equação de lattice Boltzmann (FRISCH; D'HUMIÈRES *et al.*, 1987), e a aplicação numérica dessa equação surge em 1988, no trabalho pioneiro de McNamara e Zanetti (MCNAMARA; ZANETTI, 1988), que mais tarde viria a ser conhecido como método lattice Boltzmann.

Contribuições adicionais ajudaram na rápida popularização do método (HIGUERA; JIMÉNEZ, 1989a; HIGUERA; SUCCI; BENZI, 1989; CHEN; CHEN; MARTNEZ *et al.*, 1991; QIAN; D'HUMIÈRES; LALLEMAND, 1992; CHEN; CHEN; MATTHAEUS, 1992), mas havia uma falta de formalismo conectando a equação de lattice Boltzmann à equação de Boltzmann que configurava uma enorme barreira para a sua aplicação em problemas que não fossem compressíveis ou isotérmicos. Esse formalismo foi estabelecido em 1997 por He e Lou (HE; LUO, 1997) quando os autores deduzem as equações de lattice Boltzmann para as redes existentes à época partindo diretamente da equação de Boltzmann. O trabalho

de He e Lou, contudo, não estabelecia uma forma sistemática de discretização da equação de Boltzmann que levasse a modelos mais complexos. Essa sistematização vem a aparecer quase uma década depois, em 2006, com os trabalhos de Shan et al. e Philippi et al. (SHAN; YUAN; CHEN, 2006; PHILIPPI, P. C. *et al.*, 2006), onde é estabelecida uma conexão sistemática entre a teoria cinética e a equação discreta de Boltzmann do método de lattice Boltzmann, com a apresentação das condições necessárias para a discretização do espaço de velocidades de forma a se alcançar, através da simulação, regimes hidrodinâmicos compressíveis e com troca térmica, podendo, inclusive, tratar de fenômenos que vão além dos que podem ser representados pelas Equações de Navier-Stokes. Os modelos que surgiram a partir de então são capazes de conservar momentos hidrodinâmicos de alta ordem, sendo assim chamados de modelos de alta ordem da equação discreta de Boltzmann. A plena aplicação desses modelos ainda encontra dificuldades devido ao grande número de velocidades discretas que eles apresentam. A dificuldade reside, sobretudo, na aplicação das condições de contorno adequadas, e é onde o presente trabalho se coloca.

Este trabalho tem como principal objetivo apresentar condições de contorno capazes de lidar com os chamados modelos de alta ordem da equação discreta de Boltzmann. Atualmente, o estabelecimento de condições de contorno representando barreiras sólidas capazes de impor uma velocidade macroscópica, uma temperatura e ao mesmo tempo conservar localmente a massa é uma das maiores limitações da aplicação da equação discreta de Boltzmann na simulação de fenômenos hidrodinâmicos compressíveis e com troca térmica, como apontado por Surmas (SURMAS, 2010). Segundo o autor, a imposição de condições de contorno confiáveis que se adéquem a diferentes números de Knudsen (uma medida do grau de rarefação do escoamento) é capital na tentativa de simulação de escoamentos complexos com a equação discreta de Boltzmann, e nesse sentido, este trabalho tenta suprir essa lacuna.

Os estudos a respeito de condições de contorno para a equação discreta de Boltzmann baseiam-se, sobretudo, em modelos heurísticos, ou seja, ideias que, a despeito de serem verdadeiras ou falsas, são adotadas como modelos provisórios para investigação do método. Essa classe de condições de contorno são baseadas mais na experiência e em outras metodologias do que na teoria cinética em si. Nos últimos anos, contudo, uma classe de condições de contorno diretamente relacionada à teoria cinética, derivadas da chamada condição de contorno difusa de Maxwell, tem ganhado notoriedade e o resultado disso é que diversas formas de se adaptar essa condição de contorno à equação discreta de Boltzmann são encontradas na literatura.

A grande maioria das formas apresentadas, contudo, não são passíveis de serem estendidas aos chamados modelos de alta ordem da equação discreta de Boltzmann, sendo esses modelos de alta ordem imprescindíveis para a simulação de escoamentos compressíveis e com troca térmica. A aplicação é, portanto, restringida pela falta de condições de contorno e o presente trabalho é um esforço no sentido de aumentar aplicabilidade do método.

1.1 MOTIVAÇÃO

Uma das características notáveis da equação de Boltzmann é sua capacidade de descrever qualquer fenômeno hidrodinâmico, desde casos incompressíveis até regimes rarefeitos, o que significa que regimes além dos que podem ser descritos pelas clássicas equações de Navier-Stokes podem ser simulados pela equação de Boltzmann. Inúmeros fenômenos de suma importância como a transição de fase e a turbulência, por exemplo, requerem ferramentas que os métodos clássicos não são capazes de entregar. Novos desafios requerem novas ferramentas e a equação discreta de Boltzmann é, sem dúvida, uma candidata a essa vaga. Estar na vanguarda do desenvolvimento dessa nova tecnologia é fundamental.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo geral

Propor e testar uma forma de discretização e implementação da condição difusa de Maxwell que possa ser estendida a modelos discretos com qualquer ordem de aproximação à equação contínua de Boltzmann.

1.2.2 Objetivos específicos

- Investigar a forma como a equação contínua de Boltzmann é discretizada dando origem a modelos discretos de alta ordem e as condições que devem ser satisfeitas por esses modelos discretos para que sejam consistentes fisicamente.
- Propor uma forma de discretização da condição de contorno difusa de Maxwell capaz de se adequar a qualquer rede discreta de velocidades utilizada.
- Avaliar as condições de contorno ante uma ampla variação de parâmetros adimensionais tais quais número de Reynolds, número de Mach e número de Knudsen.
- Construir um modelo numérico que apresente variações geométricas e que exija simultaneamente a aplicação de modelos de alta ordem e condições de contorno difusas.

1.3 ESTRUTURA DO TRABALHO

Este documento é composto de seis capítulos distribuídos da seguinte forma:

- Capítulo 2: Revisão bibliográfica da teoria cinética dos gases. Apresentação de conceitos, definições e aproximações adotadas na equação de Boltzmann, além da apresentação da análise de Chapman-Enskog, uma das ferramentas matemáticas

necessárias para o desenvolvimento de modelos numéricos robustos. Também é apresentada a forma como a equação contínua de Boltzmann é discretizada dando origem à equação discreta de Boltzmann, como a discretização origina modelos com diferentes ordens de aproximação à equação contínua de Boltzmann, definindo o que são modelos de alta ordem, e como o processo de discretização pode ser manipulado para dar origem ao método da colisão seguida de propagação.

- Capítulo 3: Desenvolvimento da condição de contorno difusa de Maxwell no contexto de modelos discretos. São apresentadas as limitações de outras formas de se imporem condições de contorno e a condição de contorno cinética é apresentada na sua forma contínua. O processo de discretização proposto, aprimorando a ideia apresentada no trabalho de Meng e Zhang (MENG; ZHANG, 2014), é pormenorizado, com exemplos de implementação utilizando a rede D2V37 (PHILIPPI, P. C. *et al.*, 2006) sendo expostos.
- Capítulo 4: Validações numéricas. Seguindo as críticas levantadas por Bird (BIRD, 1994), o método é testado quanto à capacidade de lidar com todos os valores de todos os parâmetros ou, ao contrário, se é restrito a casos limites nos quais um dos parâmetros é ou muito pequeno ou muito grande. Os parâmetros em questão são grupos adimensionais tais quais o número de Reynolds e o número de Prandtl, por exemplo. Casos clássicos onde resultados com a variação de parâmetros estão disponíveis, seja analiticamente ou como resultado de outras simulações, são confrontados com simulações utilizando a equação discreta de Boltzmann com condições de contorno difusas.
- Capítulo 5: Este capítulo destina-se à determinação do comportamento dinâmico de um escoamento em um canal que passa por uma súbita expansão na seção transversal. Esse tipo de simulação, embora geometricamente simples, é hidrodinamicamente complexo e requer versatilidade nas condições de contorno para acomodar paredes adiabáticas e sem escorregamento em um escoamento que apresenta mudança de temperatura e densidade. O número de Reynolds alcançado é suficiente para que o escoamento atinja um regime turbulento, com a densidade espectral da correlação espacial da velocidade seguindo a tendência esperada pela teoria de Kolmogorov (KOLMOGOROV *et al.*, 1991).
- Capítulo 6: Neste capítulo os principais resultados são compilados e sugestões para trabalhos futuros são indicadas.

2 A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN E SUA DISCRETIZAÇÃO

2.1 INTRODUÇÃO

A hipótese fundamental da Teoria Cinética é a de que quaisquer propriedades macroscópicas de um sistema podem ser obtidas a partir do conhecimento das forças de interação e da estrutura interna das suas moléculas (GRAD, 1949b). A completa descrição do comportamento individual das moléculas, entretanto, representa um nível de informação demasiadamente alto para a grande maioria dos processos evidenciados no dia a dia, que são passíveis de interpretação em níveis menores de detalhamento. Por outro lado, a especificação de um sistema apenas por suas variáveis macroscópicas (pressão, temperatura, fluxo de massa, etc.) pode ser insuficiente, sobretudo quando as escalas envolvidas no fenômeno abordado se assemelham às escalas microscópicas (geralmente associadas ao livre caminho médio das moléculas), como o processo de transição de fase, por exemplo. Em geral, com base no nível de descrição do sistema, são consideradas três escalas: escala microscópica, escala mesoscópica (ou cinética) e escala macroscópica. Métodos como a Dinâmica Molecular, *Molecular Dynamics* (MD) na sigla em inglês, pertencem à escala microscópica, enquanto que as Equações de Navier-Stokes, *Navier-Stokes Equations* (NSE) na sigla em inglês, por exemplo, pertencem à escala macroscópica. Entre estes dois extremos, localiza-se a escala cinética.

A ideia por trás da Teoria Cinética pode ser abstraída partindo-se de um sistema composto por N partículas que, pela mecânica clássica, pode ser definido pela especificação, em cada instante t , das posições $\{\vec{x}_i\}$ e velocidades $\{\vec{\xi}_i\}$ de todas as partículas que o constituem. As coordenadas \vec{x} e $\vec{\xi}$ formam um espaço μ , e cada ponto nesse espaço representa um estado de uma molécula. O sistema é, portanto, descrito em cada instante por N pontos $\{\vec{x}_i, \vec{\xi}_i\}$ no espaço μ , como indicado na figura 1. Se tomarmos um volume $d\vec{x}d\vec{\xi}$ nesse espaço em torno de um ponto O e contarmos o número de moléculas dentro deste volume, obteremos uma função de \vec{x} e $\vec{\xi}$ que, dividida pelo volume $d\vec{x}d\vec{\xi}$, resulta em uma função contínua¹ $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ para a densidade de partículas no espaço μ (HUANG, 2000).

A função de distribuição $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ define o número esperado de moléculas ou partículas $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{x}d\vec{\xi}$ que, no instante de tempo t , se encontram dentro do volume $d\vec{x}$ centrado em \vec{x} , com velocidades dentro do volume $d\vec{\xi}$ centrado em $\vec{\xi}$, para uma dada forma de interação molecular (HUANG, 2000). Esta função é fundamental para a Teoria Cinética, e a Equação de Boltzmann descreve a sua evolução (CERCIGNANI, C., 1975).

¹ A função f pode ser considerada contínua desde que os volumes $d\vec{x}$ e $d\vec{\xi}$ sejam considerados grandes o suficiente para conter um número grande de moléculas, porém, pequenos o bastante quando comparados às dimensões macroscópicas do sistema e não haja variações bruscas na densidade no espaço μ .

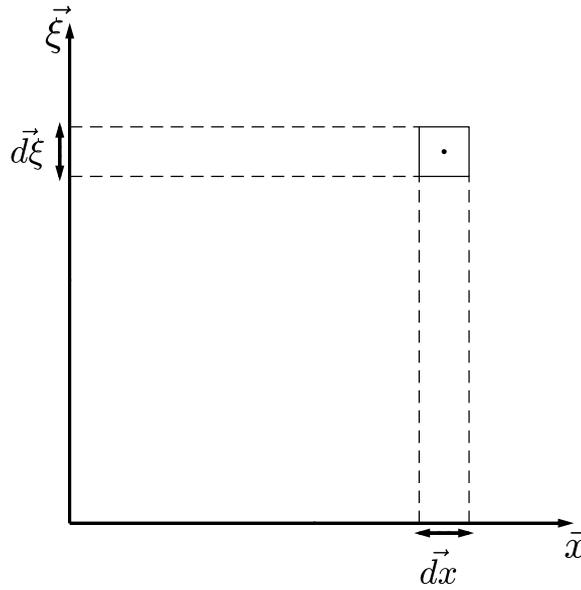


Figura 1 – Estado de uma molécula no espaço de hexadimensional μ . Por definição, o número de moléculas dentro do volume $d\vec{x}d\vec{\xi}$ é dado por $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{x}d\vec{\xi}$ (adaptado de (HUANG, 2000)).

2.2 A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

Para descrever a evolução temporal da função $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ Ludwig Boltzmann (CERCIGNANI; PENROSE, 2006) apresentou, em 1872, a equação que leva seu nome e representa hoje a base para a teoria cinética (BOLTZMANN, 1872; BRUSH, 1966):

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}}f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + (\vec{g}^e + \vec{g}^{ld}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}}f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \Omega. \quad (1)$$

Os termos dessa equação podem ser interpretados como

- $\frac{\partial}{\partial t}f$: taxa de variação no tempo, no volume $d\vec{x}$, do número de moléculas com velocidade $\vec{\xi}$.
- $\vec{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}}f$: taxa de variação do número de moléculas que deixam ou entram no volume $d\vec{x}$, com velocidade $\vec{\xi}$, devido à propagação para/dos volumes vizinhos.
- $(\vec{g}^e + \vec{g}^{ld}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}}f$: taxa de variação do número de moléculas que adquirem velocidade $\vec{\xi}$ devido à ação de forças externas e internas (entre as partículas) dentro do volume $d\vec{x}$.
- Ω : taxa de variação do número de moléculas que adquirem velocidade $\vec{\xi}$ devido à colisões com outras moléculas dentro do volume $d\vec{x}$.

A função $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ não descreve propriamente a densidade de moléculas em um dado estado no espaço μ , mas sim, a probabilidade de se encontrar moléculas no referido

estado. A função $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ é, nesse sentido, análoga às funções densidade de probabilidade estudadas em estatística e probabilidade. Se $P(z)$ é uma função densidade de probabilidade, a ela são associados momentos de ordem n (PAPOULIS; PILLAI, 2002),

$$M_n = \int_{-\infty}^{\infty} z^n P(z) dz, \quad (2)$$

cujos resultados são parâmetros como a média, o desvio padrão e a curtose. Pela definição de $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$, seus momentos em relação à variável $\vec{\xi}$ são propriedades macroscópicas do escoamento como a densidade ρ , a quantidade de movimento por unidade de volume $\rho\vec{u}$ e tensores de ordem mais alta, que se relacionam com o tensor de tensões viscosas, o fluxo de energia, que surge como uma contração de um tensor de terceira ordem, etc.

$$\rho(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} mf(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}, \quad (3a)$$

$$\rho\vec{u}(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} m\vec{\xi}f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}, \quad (3b)$$

⋮

$$M_n(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} m\vec{\xi}^n f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}, \quad (3c)$$

O conhecimento de $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ implica, portanto, no conhecimento de todas as propriedades macroscópicas do sistema, e o conhecimento da sua evolução temporal resulta no conhecimento da evolução temporal de todas as propriedades macroscópicas desse sistema. Nas equações acima a função $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$, que representa a densidade de número no espaço μ ($n^o/[m^3]/[(m/s)^3]$ em 3 dimensões e unidades SI), aparece multiplicada pela massa das moléculas m , de sorte que $mf(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ representa a densidade de massa no espaço μ ($[kg]/[m^3]/[(m/s)^3]$ em 3 dimensões e unidades SI).

Vale notar que a simples apresentação e descrição dos termos da Equação de Boltzmann não reflete suas particularidades e limitações, bem como, não esclarece o significado da função de distribuição. Pelo contrário, essa descrição simplista pode dar margem a interpretações equivocadas e que devem ser elucidadas. Esse esclarecimento pode ser obtido por meio de uma dedução mais rigorosa, como a apresentada em (CERCIGNANI, C., 1969) e resumida a seguir.

Tomando novamente um sistema composto por N partículas e considerando que a mecânica clássica pode ser aplicada a cada uma delas, pela segunda lei de Newton obtém-se um sistema de $6N$ equações relacionando as posições e velocidades das partículas

$$\vec{\xi}_i(t) = \frac{d\vec{x}_i}{dt}, \quad (4a)$$

$$\frac{d\vec{\xi}_i}{dt} = \vec{X}_i(t), \quad (4b)$$

onde \vec{X}_i é a força por unidade de massa experimentada pela i -ésima partícula. As forças às quais estão submetidas as partículas dependem das posições relativas dessas partículas, de sorte que o sistema de equações está acoplado.

A resolução desse sistema de equações é impraticável não somente pelo elevado número de partículas que um sistema físico real apresenta, mas também, pela incapacidade de se fornecerem condições iniciais para todas as partículas. A ideia de tratar o sistema de forma estatística surge justamente no sentido de admitir certo grau de desconhecimento do sistema, lidando com probabilidades e não certezas. Esse grau de ignorância se traduz em valores médios esperados não só para as posições e velocidades das partículas, mas também em valores médios para as forças de interação entre as partículas. Conforme já mencionado, a forma de se expressar a probabilidade de ocorrência de um evento é pela função densidade de probabilidade $P(z)$ ou, mais genericamente, $P(\mathbf{z})$, onde \mathbf{z} é um vetor n -dimensional contendo todas as variáveis de interesse $\{z_1, z_2, \dots, z_n\}$, que expressa a probabilidade conjunta de se encontrar z_1 entre z_1 e $z_1 + dz_1$, z_2 entre z_2 e $z_2 + dz_2$ e assim por diante.

Duas importantes características são atribuídas à $P(\mathbf{z})$. A primeira, a de que se Z é o espaço n -dimensional no qual \mathbf{z} está contido, a “soma” das probabilidades sobre o espaço Z é unitária

$$\int_Z P(\mathbf{z}) d\mathbf{z} = 1, \quad (5)$$

e a segunda, a de que o valor médio de qualquer função $\phi(\mathbf{z})$ é dado pela ponderação de $\phi(\mathbf{z})$ pela densidade de probabilidade $P(\mathbf{z})$ sobre todo o espaço Z

$$\langle \phi(\mathbf{z}) \rangle = \int_Z \phi(\mathbf{z}) P(\mathbf{z}) d\mathbf{z}. \quad (6)$$

Particularmente, se $\phi(\mathbf{z}) = \mathbf{z}$, tem-se o valor médio

$$\langle \mathbf{z} \rangle = \int_Z \mathbf{z} P(\mathbf{z}) d\mathbf{z}, \quad (7)$$

e define-se o desvio quadrático médio

$$\langle (\mathbf{z} - \langle \mathbf{z} \rangle)^2 \rangle = \int_Z (\mathbf{z} - \langle \mathbf{z} \rangle)^2 P(\mathbf{z}) d\mathbf{z}. \quad (8)$$

Agora, se partirmos da hipótese de que todas as posições e velocidades das N partículas são conhecidas, não faria sentido falar em probabilidades. Contudo, um tipo

especial de função densidade de probabilidade, nesse caso, pode ser usado, a função singular delta de Dirac (I. M. GEL'FAND, 1964), definida pelas propriedades

$$\int_Z \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0) d\mathbf{z} = 1, \quad (9)$$

$$\phi(\mathbf{z}_0) = \int_Z \phi(\mathbf{z}) \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0) d\mathbf{z}, \quad (10)$$

e

$$\int_Z (\mathbf{z} - \mathbf{z}_0)^n \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0) d\mathbf{z} = 0, n > 1. \quad (11)$$

A função delta de Dirac pode ser imaginada como uma função densidade de probabilidade com valor médio \mathbf{z}_0 e desvio quadrático 0, ou seja, é uma função que estabelece que se conhece com absoluta certeza os valores das variáveis. Nesse sentido, o conjunto das $6N$ equações 4 pode ser escrito de forma equivalente como uma única equação com $6N + 1$ variáveis da função $C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$,

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_1^0(t)) \delta(\vec{x}_2 - \vec{x}_2^0(t)) \dots \delta(\vec{x}_N - \vec{x}_N^0(t)) \\ &\times \delta(\vec{\xi}_1 - \vec{\xi}_1^0(t)) \delta(\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_2^0(t)) \dots \delta(\vec{\xi}_N - \vec{\xi}_N^0(t)) \\ &= \prod_{i=1}^N \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)) \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)), \end{aligned} \quad (12)$$

que estabelece que se conhece com certeza as posições $\vec{x}_i = \vec{x}_i^0(t)$ e velocidades $\vec{\xi}_i = \vec{\xi}_i^0(t)$ das partículas ao longo do tempo. Nesta formulação, o conjunto de coordenadas $\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{x}_N, \vec{\xi}_N$ pode ser imaginado como um único ponto em um espaço de $6N$ dimensões, chamado de espaço de fase (diferentemente da representação, mais intuitiva, dos N pontos no espaço de 6 dimensões μ).

Tomando a derivada de $C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ em relação ao tempo, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= \\ &\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial t} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)) \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta(\vec{x}_j - \vec{x}_j^0(t)) \delta(\vec{\xi}_j - \vec{\xi}_j^0(t)) \right) \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)) \\ &+ \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial t} \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)) \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta(\vec{x}_j - \vec{x}_j^0(t)) \delta(\vec{\xi}_j - \vec{\xi}_j^0(t)) \right) \\ &\times \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)). \end{aligned} \quad (13)$$

Reconhecendo que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)) &= \\ \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i^0} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)) \frac{\partial}{\partial t} (-\vec{x}_i^0(t)) &= -\vec{\xi}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i^0} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)), \end{aligned} \quad (14)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)) &= \\ \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_i^0} \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)) \frac{\partial}{\partial t} (-\vec{\xi}_i^0(t)) &= -\vec{X}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_i^0} \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)), \end{aligned} \quad (15)$$

tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= \\ - \sum_{i=1}^N \vec{\xi}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i^0} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)) &\left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta(\vec{x}_j - \vec{x}_j^0(t)) \delta(\vec{\xi}_j - \vec{\xi}_j^0(t)) \right) \\ \times \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)) & \\ - \sum_{i=1}^N \vec{X}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_i^0} \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)) &\left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta(\vec{x}_j - \vec{x}_j^0(t)) \delta(\vec{\xi}_j - \vec{\xi}_j^0(t)) \right) \\ \times \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)). & \end{aligned} \quad (16)$$

Mas,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i^0} C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= \\ \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i^0} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)) &\left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta(\vec{x}_j - \vec{x}_j^0(t)) \delta(\vec{\xi}_j - \vec{\xi}_j^0(t)) \right) \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)) \end{aligned} \quad (17)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_i^0} C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= \\ \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_i^0} \delta(\vec{\xi}_i - \vec{\xi}_i^0(t)) &\left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta(\vec{x}_j - \vec{x}_j^0(t)) \delta(\vec{\xi}_j - \vec{\xi}_j^0(t)) \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_i^0(t)), \end{aligned} \quad (18)$$

podendo-se escrever

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \sum_{i=1}^N \xi_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial x_i^0} C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \sum_{i=1}^N \bar{X}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_i^0} C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = 0, \quad (19)$$

que é a Equação de Liouville para esse sistema de N partículas.

A princípio, não há vantagem em se adotar essa formulação, uma vez que os valores $\bar{x}_i^0(t)$ e $\bar{\xi}_i^0(t)$ em 19 dependem das equações 4. Mais que isso, a descrição do sistema continua dependendo das condições iniciais. O objetivo, contudo, não é o de acompanhar a evolução individual das partículas do sistema, mas sim, obter as manifestações macroscópicas desse sistema em termos dos movimentos dessas partículas. Para tal, deve ser feita a distinção entre macroestado e microestado.

Seguindo o exemplo apresentado em (WILKS, 1963), imaginemos um sistema em equilíbrio térmico composto por N partículas ocupando um volume V . Cada uma das partículas pode assumir valores discretos de energia ε_i de forma que, para uma certa temperatura, temos n_1 partículas com energia ε_1 , n_2 partículas com energia ε_2 e assim por diante. Esse sistema possui energia interna E e deseja-se conhecer as distribuições n_i sujeitas às condições

$$N = \sum_{i=1}^N n_i \quad (20)$$

e

$$E = \sum_{i=1}^N n_i \varepsilon_i. \quad (21)$$

Ao conjunto de propriedades macroscópicas $\{N, V, E\}$ chama-se macroestado, que é inteira e unicamente definido por essas propriedades. Existe, contudo, várias formas de as partículas se disporem de maneira a se obter o mesmo macroestado, sendo cada uma dessas formas referida como um microestado do sistema. Para deixar clara essa ideia, ainda seguindo o exemplo apresentado em (WILKS, 1963), seja esse sistema hipotético composto por apenas três partículas A, B e C , que podem assumir valores energéticos $0, x, 2x, 3x$, etc. Supondo que a energia interna desse sistema seja $E = 3x$, pode-se afirmar que o sistema apresentará uma das distribuições indicadas na tabela 1.

Tabela 1 – microestados possíveis para um mesmo macroestado (adaptado de (WILKS, 1963))

	1	2			3					
A	x	$3x$	0	0	$2x$	$2x$	0	x	x	0
B	x	0	$3x$	0	x	0	$2x$	$2x$	0	x
C	x	0	0	$3x$	0	x	x	0	$2x$	$2x$

A cada uma das dez possíveis distribuições dá-se o nome de compleição, e uma das hipóteses da teoria cinética é a de que todas as compleições são igualmente prováveis

de serem observadas (PATHRIA; BEALE, 2011). Se atentarmos somente ao número de partículas em cada nível energético em cada compleição, ou seja, considerarmos que as partículas são indistinguíveis, veremos que existem somente três formas das distribuições n_i se organizarem. A cada uma dessas formas chama-se microestado. Sendo assim, a probabilidade de se encontrar o microestado 1 é de 1:10, o microestado 2 de 3:10 e o microestado 3 de 6:10. Essa distribuição hipotética é análoga à função densidade de probabilidade antes mencionada e, nesse escopo, o conceito pode ser estendido à função $C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ na equação (22).

A função $C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ representa a evolução de uma compleição específica mas, ainda assim, é uma função densidade de probabilidade que pode ser substituída por uma função $P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ que reflita a função densidade de probabilidade relacionada a todos os microestados que possuam as mesmas características macroscópicas do sistema, ou seja, possua o mesmo macroestado, representado pela densidade, pressão, temperatura, velocidade, etc. Apesar da diferença conceitual, $P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ ainda satisfaz à Equação de Liouville e pode-se escrever (CERCIGNANI, C., 1969)

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \sum_{i=1}^N \bar{\xi}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \sum_{i=1}^N \bar{X}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_i^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = 0, \quad (22)$$

ressaltando que $P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ é uma função de distribuição conjunta

$$P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{x}_N, \vec{\xi}_N, t), \quad (23)$$

que estabelece a probabilidade de se encontrar simultaneamente a partícula 1 no volume $d\vec{x}_1$ centrado em \vec{x}_1 com velocidade dentro de $d\vec{\xi}_1$ centrada em $\vec{\xi}_1$, a partícula 2 no volume $d\vec{x}_2$ centrado em \vec{x}_2 com velocidade dentro de $d\vec{\xi}_2$ centrada em $\vec{\xi}_2$ e assim por diante.

Apesar da flexibilização trazida pela função P , uma função de distribuição conjunta de N partículas trás ainda um excesso de informação e uma complexidade que torna impraticável o seu manuseio. Reconhecendo essa impraticabilidade e tendo em mente que muito menos informação é necessária para se recuperar as variáveis macroscópicas de interesse, a Equação de Boltzmann lida com a função de distribuição de 1 partícula, que pode ser obtida como a função densidade de probabilidade marginal resultante da integração no espaço de fase com relação às variáveis $\vec{x}_2, \vec{\xi}_2, \vec{x}_3, \vec{\xi}_3, \dots, \vec{x}_N, \vec{\xi}_N$,

$$P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t) = \int \dots \int P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{x}_N, \vec{\xi}_N, t) d\vec{x}_2 d\vec{\xi}_2 d\vec{x}_3 d\vec{\xi}_3 \dots d\vec{x}_N d\vec{\xi}_N, \quad (24)$$

que é a probabilidade de se encontrar a partícula 1 em um certo estado independente dos estados das demais partículas.

Se considerarmos que não há forças externas e que a força de interação entre as partículas possuem um alcance limitado a um raio de ação σ , tal que

$$\vec{X}_i = 0, |\vec{x}_i - \vec{x}_j| > \sigma, \quad (25)$$

fora desse raio de ação, a equação (22) se reduz a

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \xi_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \sum_{i=2}^N \xi_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = 0. \quad (26)$$

O passo lógico para se obter a evolução da função de distribuição de 1 partícula é integrar essa equação em relação a todas as variáveis, exceto \vec{x}_1 e $\vec{\xi}_1$, sobre todo o espaço de velocidades e todo o domínio limitado pela união das fronteiras $\partial\Omega$ e σ_{ij} (a fronteira $\partial\Omega$ pode ser as paredes de um reservatório, por exemplo, e σ_{ij} é definido pelo raio de ação da força de interação entre as partículas i e j), então,

$$\begin{aligned} & \int \dots \int \frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \prod_{i=2}^N d\vec{x}_i d\vec{\xi}_i + \\ & \int \dots \int \xi_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \prod_{i=2}^N d\vec{x}_i d\vec{\xi}_i + \\ & \int \dots \int \sum_{i=2}^N \xi_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \prod_{i=2}^N d\vec{x}_i d\vec{\xi}_i = 0. \end{aligned} \quad (27)$$

A comutação entre integrais e derivadas na equação acima, contudo, não é direta em todos os termos dessa equação. No primeiro termo, a integral volumétrica de uma derivada no tempo, a comutação é direta e tem-se

$$\begin{aligned} & \int \dots \int \frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \prod_{i=2}^N d\vec{x}_i d\vec{\xi}_i = \frac{\partial}{\partial t} \int \dots \int P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \prod_{i=2}^N d\vec{x}_i d\vec{\xi}_i \\ & = \frac{\partial}{\partial t} P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t). \end{aligned} \quad (28)$$

No segundo termo, apesar de a variável presente na derivada ser diferente das variáveis de integração, a fronteira do domínio σ_{1i} depende de \vec{x}_1 . Para levar essa dependência

em conta, deve-se escrever (CERCIGNANI; PENROSE, 2006)

$$\begin{aligned}
& \int \dots \int \xi_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \prod_{i=2}^N d\vec{x}_i d\vec{\xi}_i = \\
& \xi_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1^0} \int \dots \int P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \prod_{i=2}^N d\vec{x}_i d\vec{\xi}_i - \\
& \sum_{i=2}^N \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_i, \vec{\xi}_i, t) \vec{\xi}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_i dS_i d\vec{\xi}_i = \\
& \xi_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1^0} P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t) - \sum_{i=2}^N \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_i, \vec{\xi}_i, t) \vec{\xi}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_i dS_i d\vec{\xi}_i.
\end{aligned} \tag{29}$$

Por fim, o terceiro termo resulta diretamente da aplicação do Teorema de Gauss, sendo que na relação

$$\nabla \cdot (\xi_i^0(t) P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)) = \xi_i^0(t) \cdot \nabla P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + P(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \nabla \cdot \xi_i^0(t), \tag{30}$$

como as variáveis $\vec{\xi}_i$ e \vec{x}_i são independentes, $\vec{\xi}_i$ é um vetor constante ao longo da integração em $d\vec{x}_i$, e o segundo termo do lado direito da equação (30) é nulo, de onde tem-se que

$$\begin{aligned}
& \int \dots \int \sum_{i=2}^N \xi_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \prod_{j=2}^N d\vec{x}_j d\vec{\xi}_j = \\
& \int \dots \int \sum_{i=2}^N \nabla \cdot (\xi_i^0(t) P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)) \prod_{j=2}^N d\vec{x}_j d\vec{\xi}_j = \\
& \sum_{i=2}^N \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_i, \vec{\xi}_i, t) \vec{\xi}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i dS_i d\vec{\xi}_i.
\end{aligned} \tag{31}$$

A equação (27) pode então ser escrita como

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t) + \xi_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1^0} P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t) \\
& - \sum_{i=2}^N \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_i, \vec{\xi}_i, t) \vec{\xi}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_i dS_i d\vec{\xi}_i \\
& + \sum_{i=2}^N \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_i, \vec{\xi}_i, t) \vec{\xi}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i dS_i d\vec{\xi}_i = 0.
\end{aligned} \tag{32}$$

Reconhecendo que \vec{x}_i e $\vec{\xi}_i$ são variáveis de integração em todos os termos dos somatórios, todos estes termos são iguais

$$\begin{aligned}
 & \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) \vec{\xi}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 dS_2 d\vec{\xi}_2 = \\
 & \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_3, \vec{\xi}_3, t) \vec{\xi}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_3 dS_3 d\vec{\xi}_3 = \\
 & \quad \vdots \\
 & \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_N, \vec{\xi}_N, t) \vec{\xi}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_N dS_N d\vec{\xi}_N,
 \end{aligned} \tag{33}$$

de onde tem-se que

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t) + \vec{\xi}_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1^0} P(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t) + \\
 & (N-1) \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) (\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 dS_2 d\vec{\xi}_2 = 0.
 \end{aligned} \tag{34}$$

Uma conclusão imediata da equação (34) é a de que a evolução da função de distribuição de uma partícula $P^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t)$ depende da função de distribuição conjunta de 2 partículas $P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t)$. Por sua vez, para se obter a evolução da função de distribuição conjunta de 2 partículas $P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t)$, seguindo o mesmo procedimento, obteríamos uma equação que dependeria da função de distribuição conjunta de 3 partículas $P^{(3)}$, e assim por diante, numa escalada que se repete até a função de distribuição conjunta de N partículas $P^{(N)}$ conhecida como hierarquia BBGKY (HUANG, 2000). O truncamento dessa hierarquia requer que, de alguma forma, possa se escrever a função de distribuição de s partículas $P^{(s)}$ em função da função de distribuição de $s-1$ partículas $P^{(s-1)}$. Também, o terceiro termo na equação 34 dá uma ideia do significado do termo de colisão na Equação de Boltzmann. Este termo reflete o balanço líquido de partículas que entram e saem do domínio ou, equivalentemente, saem e entram no domínio da esfera limitada por $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| = \sigma$. Para ser consistente com essa afirmação é necessário que a normal à superfícies dS_2 aponte para dentro do domínio, tal que $(\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 < 0$ indique que a partícula está deixando o domínio e vice versa.

A esfera $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| \leq \sigma$ delimita o domínio onde há forças de interação entre as partículas, sendo o processo de interação referido como colisão. Avaliar o processo de colisão significa avaliar a integral de superfície da equação 34, que é mais facilmente realizável pela integração do domínio dado pela esfera $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| < \sigma$. Para tal, considere um observador se movimentando com a partícula 1. Este enxerga a partícula 2 com velocidade relativa $\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1$ e, se alinharmos um dos eixos coordenados segundo a direção dessa velocidade relativa, a esfera $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| = \sigma$ pode ser dividida em dois hemisférios, como indicado na figura 2. Deste ponto de vista, as partículas entram pelo hemisfério

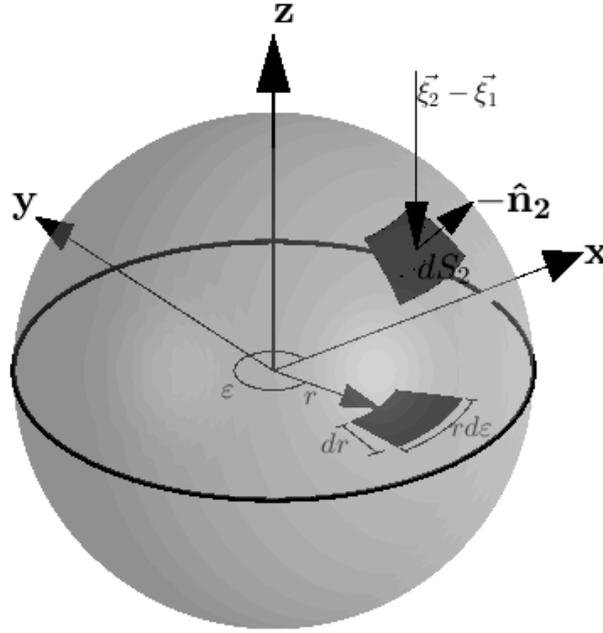


Figura 2 – Projeção da área dS sobre o plano que separa os dois hemisférios. O eixo z está alinhado com a velocidade relativa $(\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1)$, de forma que, do ponto de vista de um observador se movimentando com $\vec{\xi}_1$, as partículas com velocidade $\vec{\xi}_2$ entram na esfera pelo hemisfério norte e deixam a esfera pelo hemisfério sul.

norte, caracterizado por $(\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 > 0$ e saem pelo hemisfério sul, caracterizado por $(\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 < 0$ (a normal aponta agora para o centro da esfera).

Pela projeção ortogonal de um ponto localizado na superfície da esfera sobre o plano que divide os dois hemisférios, pode-se escrever

$$(\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 dS_2 = \pm |\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1| r dr d\varepsilon, \quad (35)$$

onde os sinais variam de acordo com $(\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2$. Também, se identificarmos por \vec{x}_2^+ as partículas que entram na esfera e por \vec{x}_2^- as partículas que deixam a esfera, tem-se

$$\begin{aligned} & (N-1) \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) (\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 dS_2 d\vec{\xi}_2 = \\ & (N-1) \int \int \int \left(P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2^+, \vec{\xi}_2, t) - P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2^-, \vec{\xi}_2, t) \right) \times \\ & |\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1| r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_2. \end{aligned} \quad (36)$$

Para avaliar a equação 36 algumas considerações devem ser feitas. Primeiramente, o domínio caracterizado por $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| < \sigma$ é muito menor que o volume total, podendo ser ignorado. Segundo, pode-se considerar que os diferentes volumes $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| < \sigma$ e $|\vec{x}_j - \vec{x}_k| < \sigma$ não se sobrepõem, o que significa que há somente interação entre duas partículas. Essa consideração equivale a dizer que apenas colisões binárias ocorrem e também que, durante

a colisão, nenhuma outra partícula adentra o domínio, de sorte que não há fluxo pelas superfícies da fronteira. No domínio $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| < \sigma$ a equação (22) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \bar{\xi}_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_1^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \bar{\xi}_2^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_2^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \\ & \sum_{i=3}^N \bar{\xi}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \bar{X}_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_1^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \\ & \bar{X}_2^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_2^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \sum_{i=3}^N \bar{X}_i^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_i^0} P(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Como, por hipótese, não há fluxo de partículas durante o processo de colisão, as integrais de superfície resultantes da integração da equação 37 sobre o espaço de fase com relação às variáveis $\vec{x}_3, \vec{\xi}_3, \vec{x}_4, \vec{\xi}_4, \dots, \vec{x}_N, \vec{\xi}_N$ são nulas, de onde

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) + \bar{\xi}_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_1^0} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) + \\ & \bar{\xi}_2^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_2^0} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) + \bar{X}_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_1^0} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) + \\ & \bar{X}_2^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_2^0} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) = 0, \end{aligned} \quad (38)$$

ou, segundo as equações (4),

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) + \frac{d\bar{x}_1^0}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_1^0} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) + \\ & \frac{d\bar{x}_2^0}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{x}_2^0} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) + \frac{d\bar{\xi}_1^0}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_1^0} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) + \\ & \frac{d\bar{\xi}_2^0}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_2^0} P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) = 0. \end{aligned} \quad (39)$$

Conclusões importantes podem ser tiradas da equação (39). Ela representa a Equação de Liouville para um ponto no espaço de fase composto por apenas duas partículas e, mais especificamente, é uma equação diferencial hiperbólica parametrizável pela variável t . Isso significa que $\vec{x}_1(t), \vec{x}_2(t), \vec{\xi}_1(t)$ e $\vec{\xi}_2(t)$ formam uma curva característica ao longo da qual $P^{(2)}$ é constante (ZANK, 2014). Essa informação é importante porque se duas partículas entram na esfera com posições e velocidades $\vec{x}'_1, \vec{x}'_2, \vec{\xi}'_1, \vec{\xi}'_2$ e, após um tempo de interação τ , deixam a esfera com posições e velocidades $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2$, pode-se dizer que

$$P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) = P^{(2)}(\vec{x}'_1, \vec{\xi}'_1, \vec{x}'_2, \vec{\xi}'_2, t - \tau). \quad (40)$$

Esta relação permite escrever a probabilidade de se encontrar uma partícula deixando a esfera em função da probabilidade de se encontrar uma partícula entrando na esfera. A utilidade dessa informação se confirma quando é evocada a hipótese do caos molecular, que estabelece que há independência estatística entre duas partículas, ou seja, que a probabilidade de se encontrar simultaneamente duas partículas com posições e velocidades $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2$ é igual ao produto das probabilidades de se encontrar individualmente essas duas partículas

$$P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) = P^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1) P^{(1)}(\vec{x}_2, \vec{\xi}_2). \quad (41)$$

A equação (40) é necessária porque a ideia de que as probabilidades estão descorrelacionadas só faz sentido no caso de duas partículas prestes a colidirem, mas não se sustenta para duas partículas que acabaram de colidir, já que o processo de colisão estabelece uma forte correlação entre as partículas (CERCIGNANI, C., 1969).

Com essas hipóteses, a equação (36) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} & (N-1) \int \int \int \left(P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) - P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2^+, \vec{\xi}_2, t) \right) \times \\ & \left| \vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1 \right| r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_2 = \\ & (N-1) \int \int \int \left[P^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, t) P^{(1)}(\vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) - \right. \\ & \left. P^{(1)}(\vec{x}'_1, \vec{\xi}'_1, t-\tau) P^{(1)}(\vec{x}'_2, \vec{\xi}'_2, t-\tau) \right] \left| \vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1 \right| r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_2. \end{aligned} \quad (42)$$

Como, por hipótese, o volume $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| < \sigma$ é muito menor que o domínio total ($\sigma \rightarrow 0$), pode-se dizer que $\vec{x}_1 \approx \vec{x}_2 \approx \vec{x}'_1 \approx \vec{x}'_2$. Também, o tempo necessário para percorrer distâncias tão curtas pode ser desprezado, ou seja, $t - \tau \approx t$ e, por fim, no caso de $N \rightarrow \infty$, tem-se que $(N-1) \approx N$. Portanto, sob essas condições

$$\begin{aligned} & (N-1) \int \int P^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{\xi}_1, \vec{x}_2, \vec{\xi}_2, t) (\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 dS_2 d\vec{\xi}_2 \rightarrow \\ & N \int \int \int \left[P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}_2, t) - \right. \\ & \left. P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}'_1, t) P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}'_2, t) \right] \left| \vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1 \right| r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_2. \end{aligned} \quad (43)$$

O sinal de igualdade é substituído por “ \rightarrow ” propositalmente na equação (43) para explicitar que a equação só é válida no limite $N \rightarrow \infty$ e $\sigma \rightarrow 0$, conhecido como limite de Boltzmann-Grad (GRAD, 1949b). Fica evidente também que o par de velocidades $\vec{\xi}'_1$ e $\vec{\xi}'_2$ são as partículas que, após o processo de colisão, terão velocidades $\vec{\xi}_1$ e $\vec{\xi}_2$, sendo que a determinação dessas velocidades depende das forças de interação entre as partículas. A

combinação das equações 43 e 34 resulta na Equação de Boltzmann para a evolução da função de distribuição de uma partícula na ausência de forças externas

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) + \vec{\xi}_1^0(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) = \\ N \int \int \int \left[P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}'_1, t) P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}'_2, t) - \right. \\ \left. P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) P^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}_2, t) \right] \left| \vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1 \right| r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_2. \end{aligned} \quad (44)$$

A variável P é uma função de distribuição de densidade de probabilidade adimensional e a quantidade $F = NP$ fornece, portanto, a densidade de número esperada por volume no espaço de fase. Suprimindo o subíndice 1 e trocando o subíndice 2 por 1, é possível escrever a equação de Boltzmann na forma mais usualmente encontrada

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \\ \int \int \int \left[F(\vec{x}, \vec{\xi}', t) F(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) - \right. \\ \left. F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) F(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) \right] \left| \vec{\xi}_1 - \vec{\xi} \right| r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_1. \end{aligned} \quad (45)$$

A metodologia adotada descartou a presença de forças externas, mas a contribuição dessas forças é prontamente incorporada pela distinção, na equação 22, do termo de força como a soma de duas componentes $\vec{X}_i^0 = \vec{X}_{ij}^0 + \vec{X}_{ext}^0$, sendo \vec{X}_{ij}^0 a força entre as partículas que age na esfera $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| \leq \sigma$ e \vec{X}_{ext}^0 uma força de corpo externa. O efeito dessa força externa é a inclusão de um termo extra na equação 45, que assume então a forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \vec{X}^{(e)} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \\ \int \int \int \left[F(\vec{x}, \vec{\xi}', t) F(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) - \right. \\ \left. F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) F(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) \right] \left| \vec{\xi}_1 - \vec{\xi} \right| r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_1, \end{aligned} \quad (46)$$

que é justamente a forma apresentada no início dessa seção.

Algumas considerações devem ser feitas quanto à equação 46. A equação é válida no limite de Boltzmann-Grad previamente mencionado, que estabelece as condições sob as quais, pela Equação de Liouville, a Equação de Boltzmann pode ser obtida, sendo a Equação de Liouville utilizada em conjunto com a ideia de microestados para estabelecer uma conexão entre a mecânica clássica e a teoria cinética, ou seja, o limite de Boltzmann-Grad estabelece os limites nos quais a obtenção da Equação de Boltzmann pode ser feita a partir da mecânica clássica (GOLSE, 2013). O procedimento adotado recai na hierarquia BBGKY, cujo desacoplamento foi feito sob a hipótese de probabilidades descorrelacionadas,

referido como teoria do caos molecular, mas nenhuma prova dessa afirmação é feita. Do ponto de vista matemático, a Equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial não linear com as velocidades acopladas pelo termo de colisão. Essas características fazem com que a Equação de Boltzmann seja particularmente difícil de ser resolvida mesmo em situações de não-equilíbrio simples (CERCIGNANI, C., 1969). Uma das poucas soluções analíticas conhecidas é a solução de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann.

2.3 A SOLUÇÃO DE EQUILÍBRIO

A solução da Equação de Boltzmann que é independente do tempo e do espaço é chamada de solução de equilíbrio. A condição suficiente para se alcançar essa solução é a de que o balanço líquido de moléculas que ganham e perdem velocidade através de colisões seja nulo. Denotando por $f_0(\vec{\xi})$ essa solução, a condição se traduz em

$$f_0(\vec{\xi}') f_0(\vec{\xi}_1') - f_0(\vec{\xi}) f_0(\vec{\xi}_1) = 0, \quad (47)$$

ou ainda,

$$\log f_0(\vec{\xi}') + \log f_0(\vec{\xi}_1') = \log f_0(\vec{\xi}) + \log f_0(\vec{\xi}_1). \quad (48)$$

A equação acima estabelece uma relação entre dois pares quaisquer de moléculas antes e após a colisão, indicando que o termo $\log f_0(\vec{\xi}) + \log f_0(\vec{\xi}_1)$ obedece a uma lei de conservação. É chamado de invariante de colisão qualquer função das velocidades $\phi(\vec{\xi}, \vec{\xi}_1)$ que obedeça a

$$\phi(\vec{\xi}, \vec{\xi}_1) = \phi(\vec{\xi}', \vec{\xi}_1'), \quad (49)$$

e um invariante de colisão que possa ser escrito na forma

$$\phi(\vec{\xi}, \vec{\xi}_1) = \psi(\vec{\xi}) + \psi(\vec{\xi}_1), \quad (50)$$

é chamado de invariante de soma (KREMER, 2005). Existem três invariantes de soma numa colisão: a massa, a quantidade de movimento e a energia

$$m' + m_1' = m + m_1, \quad (51a)$$

$$m' \vec{\xi}' + m_1' \vec{\xi}_1' = m \vec{\xi} + m_1 \vec{\xi}_1, \quad (51b)$$

$$\frac{1}{2} m' \xi'^2 + \frac{1}{2} m_1' \xi_1'^2 = \frac{1}{2} m \xi^2 + \frac{1}{2} m_1 \xi_1^2. \quad (51c)$$

De forma genérica, qualquer combinação linear dos invariantes de somatório será também um invariante de somatório com

$$\psi(\vec{\xi}) = Am + \vec{B} \cdot m\vec{\xi} + C\frac{1}{2}m\xi^2. \quad (52)$$

O logaritmo da função de distribuição de equilíbrio possui as características de um invariante de somatório, de onde pode-se concluir que

$$\log f_0(\vec{\xi}) = Am + \vec{B} \cdot m\vec{\xi} + C\frac{1}{2}m\xi^2, \quad (53)$$

ou, definindo $a = Am - \frac{mB^2}{2C}$, $b = -\frac{mC}{2}$ e $\vec{c} = -\frac{\vec{B}}{C}$

$$\log f_0(\vec{\xi}) = a - b(\vec{\xi} - \vec{c})^2. \quad (54)$$

A função de distribuição de equilíbrio tem portanto a forma

$$f_0(\vec{\xi}) = e^a e^{-b(\vec{\xi} - \vec{c})^2} = d e^{-b(\vec{\xi} - \vec{c})^2}. \quad (55)$$

As incógnitas a (ou d), b e \vec{c} podem então ser determinadas pela definição dos primeiros momentos da função de distribuição,

$$\rho = \int_{-\infty}^{\infty} m f_0(\vec{\xi}) d\vec{\xi}, \quad (56a)$$

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} m f_0(\vec{\xi}) \vec{\xi} d\vec{\xi}, \quad (56b)$$

$$e_{c,f} = \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} m f_0(\vec{\xi}) \frac{1}{2} m (\vec{\xi} - \vec{u})^2 d\vec{\xi}. \quad (56c)$$

Substituindo $f_0(\vec{\xi})$ nas equações acima, tem-se

$$\rho = md \int_{-\infty}^{\infty} e^{-b(\vec{\xi} - \vec{c})^2} d\vec{\xi} = md \left(\frac{\pi}{b}\right)^{D/2} \implies d = \frac{\rho}{m} \left(\frac{b}{\pi}\right)^{D/2}, \quad (57)$$

$$\vec{u} = \left(\frac{b}{\pi}\right)^{D/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-b(\vec{\xi} - \vec{c})^2} \vec{\xi} d\vec{\xi} = \vec{c} \implies \vec{c} = \vec{u}, \quad (58)$$

$$e_{c,f} = \frac{m}{2} \left(\frac{b}{\pi}\right)^{D/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-b(\vec{\xi} - \vec{u})^2} (\vec{\xi} - \vec{u})^2 d\vec{\xi} = \frac{Dm}{4b} \implies b = \frac{Dm}{4e_{c,f}}. \quad (59)$$

A energia cinética de flutuação média $e_{c,f}$ depende da equação de estado do fluido e, para um gás ideal somente com graus de liberdade de translação, é dada por

$$e_{c,f} = \frac{D}{2} kT, \quad (60)$$

onde k é a constante de Boltzmann. Tem-se, portanto,

$$b = \frac{1}{2} \frac{m}{kT} = \frac{1}{2RT}, \quad (61)$$

e a função de distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann é dada por

$$f_0(\vec{\xi}) = f_{MB}^{eq}(\vec{\xi}) = \frac{\rho}{m} \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{D/2} e^{-\frac{(\vec{\xi}-\vec{u})^2}{2RT}}. \quad (62)$$

A equação 62 é uma das únicas soluções analíticas conhecidas para a Equação de Boltzmann. Apesar de representar a solução para um caso bastante específico, no caso, uma situação de equilíbrio, essa equação é bastante importante para a construção dos modelos apresentados na sequência. O interesse prático na Equação de Boltzmann, contudo, está na sua solução em situações de não equilíbrio, cujas soluções analíticas são desconhecidas. As dificuldades encontradas para a obtenção dessas soluções de não equilíbrio tentam ser suplantadas pela aplicação de métodos numéricos que, grosso modo, buscam discretizar a Equação de Boltzmann e obter um conjunto de equações algébricas mais simplesmente manuseáveis, sendo o Método de lattice Boltzmann um desses métodos de discretização.

2.4 A EQUAÇÃO DISCRETA DE BOLTZMANN

O Método lattice Boltzmann pode ser considerado um caso específico do grupo de métodos conhecido como Modelos de Velocidades Discretas (ARISTOV, 2012), onde o espaço contínuo de velocidades é substituído por algumas poucas velocidades discretas. Ao restringir o conjunto de valores que $\vec{\xi}$ pode assumir de $(-\infty, +\infty)$ a valores discretos $\{\vec{c}_1, \vec{c}_2, \dots, \vec{c}_n\}$, na ausência de forças externas, obtém-se, no lugar da equação (46), um sistema de equações na forma (GODUNOV; SULTANGAZIN, 1971)

$$\frac{\partial}{\partial t} F(\vec{x}, \vec{c}_i, t) + \vec{c}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} F(\vec{x}, \vec{c}_i, t) = \Omega_i, \quad (63)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$, onde o termo Ω_i representa o termo de colisão.

Na década de 1960 este tipo de abordagem foi utilizado no estudo da formação de ondas de choque (BROADWELL, 1964a) e dos escoamentos de Couette e Rayleigh (BROADWELL, 1964b). Os estudos se intensificaram no início da década de 1970 com Hardy e Pomeau (HARDY; POMEAU, 1972) e Hardy, Pomeau e Pazzis (HARDY; POMEAU; PAZZIS, 1973) em uma série de trabalhos indicando as características termodinâmicas e hidrodinâmicas de um modelo bidimensional com pouquíssimas velocidades, mostrando que tal modelo é capaz de recuperar as equações de Navier-Stokes. Em 1975 Gatignol (GATIGNOL, 1975) apresentou uma generalização desses modelos ao qual chamou de “uma teoria cinética para um gás com distribuição de velocidades discretas”, apontando, de certa forma, para uma consolidação do método. No ano seguinte, novamente com Hardy, Pomeau e Pazzis, surge talvez a primeira ideia de um modelo computacional motivado por

esses estudos (HARDY; PAZZIS; POMEAU, 1976), onde não só o espaço de velocidades era discretizado, mas também o espaço físico aparece representado na forma de uma rede uniforme, que posteriormente receberia o nome de lattice gas.

Uma década depois, em consonância com os avanços computacionais e os estudos sobre autômatos celulares (WOLFRAM, 1984), Frish, Hasslacher e Pomeau apresentam um trabalho de enorme impacto (FRISCH; HASSLACHER; POMEAU, 1986) que deu origem a um ramo de pesquisa chamado de lattice-gas cellular automata (ROTHMAN; ZALESKI, 2004). Um dos primeiros resultados obtidos com esse novo método aparece no trabalho de D’Humières e Lallemand (D’HUMIÈRES; LALLEMAND, 1986), onde é simulado o surgimento de vórtices de von Kármán atrás de uma placa plana perpendicular a um escoamento. A atenção despertada por esses trabalhos era justificável, já que os estudos sobre autômatos celulares convergiam muito bem com a lógica de processamento dos computadores e a constatação de que fenômenos complexos poderiam ser simulados por modelos extremamente simples abriam um enorme leque de possibilidades.

Os modelos lattice-gas, contudo, apresentavam um grande revés. Eles admitiam uma lógica booleana na qual cada velocidade discreta, diferentemente da Equação de Boltzmann, não apresentava a probabilidade de se encontrar partículas no referido estado, mas sim, atribuía a cada uma dessas a existência (1) ou inexistência (0) de uma partícula². A lógica booleana fazia com que os modelos sofressem de um alto ruído estatístico que, para ser contornado, necessitava de processos de médias espaciais ou temporais em subdivisões da rede, com várias simulações partindo de diferentes condições iniciais. Esta condição é análoga à situação descrita na seção anterior para o sistema no qual se conhece com certeza as posições e velocidades das partículas.

Intuitivamente, pode-se imaginar que, ao se iniciar a simulação com todas as possíveis condições iniciais, o valor médio encontrado para uma dada velocidade, em um dado instante de tempo, resultante destas inúmeras inicializações, dará a probabilidade de se encontrar aquela velocidade naquele instante, que é justamente a ideia da Equação de Boltzmann. Os modelos desenvolvidos nas décadas de 1960 e 1970 já tratavam desse aspecto de forma analítica e, em 1988, McNamara e Zanetti (MCNAMARA; ZANETTI, 1988) propuseram a substituição das variáveis e operações booleanas do lattice-gas por seus valores médios, mantendo o esquema computacional de propagação seguida de colisão. O processo de colisão que, nos modelos lattice-gas, obedecem à regras específicas, no modelo de McNamara e Zanetti aparecem como uma média dessas regras (FRISCH; D’HUMIÈRES *et al.*, 1987). O que se obtém dessa transposição de modelos é uma forma numérica de avaliar a Equação de Boltzmann deduzida diretamente do modelo lattice-gas. Em termos práticos, o uso dos valores médios do lattice-gas resulta na Equação de lattice

² A lógica permite o uso de apenas operadores booleanos E, NÃO, OU, etc. sem a necessidade de nenhuma operação aritmética.

Boltzmann

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = N_i(\vec{x}, t) + \Omega_i(N), \quad (64)$$

onde N_i é número médio de partículas com velocidade \vec{c}_i .

No ano seguinte, no trabalho de Higuera e Jimenez (HIGUERA; JIMÉNEZ, 1989b), surge uma simplificação do termo de colisão, que aparece como uma linearização da expansão do termo $\Omega(N)$ em torno de valores de equilíbrio da função de distribuição $N = N^{eq} + N^{neq}$,

$$\begin{aligned} \Omega(N) &= \Omega(N^{eq} + N^{neq}) = \\ &\Omega(N^{eq}) + \left. \frac{\partial \Omega}{\partial N} \right)_{N=N^{eq}} (N^{neq}) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \Omega}{\partial N^2} \right)_{N=N^{eq}} (N^{neq})^2 + \dots, \end{aligned} \quad (65)$$

retendo somente os termos de primeira ordem e com a hipótese de que $\Omega(N^{eq}) = 0$. Com esta simplificação, a equação de lattice Boltzmann pode ser escrita como (HIGUERA; SUCCI; BENZI, 1989)

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = N_i(\vec{x}, t) + \Omega_{im}(N_m - N_m^{eq}). \quad (66)$$

Esta simplificação é importante porque o termo de colisão independe agora de um modelo lattice-gas prévio, pois a matriz de colisão Ω_{im} depende apenas de parâmetros geométricos da rede adotada.

Uma simplificação ainda maior é proposta, em 1991, por Chen et al (CHEN; CHEN; MARTNEZ *et al.*, 1991), com a aproximação

$$\left. \frac{\partial \Omega}{\partial N} \right)_{N=N^{eq}} = -\frac{1}{\tau}, \quad (67)$$

cujo efeito é reduzir a matriz Ω_{im} a um único termo, e a equação (66) a

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = N_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} (N_i - N_i^{eq}). \quad (68)$$

Assim descrito, o termo de colisão assume a mesma forma do modelo BGK proposto por Bhatnagar, Gross, e Krook (BHATNAGAR; GROSS; KROOK, 1954).

É no começo de 1992, com o trabalho de Qian et al (QIAN; D'HUMIÈRES; LALLEMAND, 1992), que o método surge da forma como é hoje conhecido. Neste importante trabalho é apresentada pela primeira vez a notação, hoje amplamente utilizada, $DdQb$, onde d representa a dimensionalidade da rede (1, 2 ou três dimensões) e b representa o número de velocidades discretas, e onde surge a rede bidimensional com 9 velocidades D2Q9, que viria a se tornar a principal rede utilizada no método. Além da mesma simplificação no termo de colisão apresentada por Chen et al (CHEN; CHEN; MARTNEZ *et al.*, 1991), o trabalho de Qian et al introduz a ideia de se atribuir pesos às velocidades discretas de forma a recuperar a isotropia dos momentos de alta ordem, pesos estes,

que posteriormente seriam entendidos como os pesos de um problema de quadratura de Gauss-Hermite utilizada na obtenção de modelos de mais alta ordem.

A equação (68) é a base para o Método lattice Boltzmann com esquema colisão-propagação e termo de colisão BGK. A sua obtenção partindo da análise estatística do modelo lattice-gas, contudo, serve apenas como contexto histórico. Esta abordagem é bastante limitada e restringe, por exemplo, a obtenção sistemática de modelos mais complexos que contemplem fenômenos totalmente compressíveis e não isotérmicos. Algumas características dessa equação, contudo, são importantes e partilhadas pela maioria dos Métodos lattice Boltzmann empregados atualmente (QIAN; D'HUMIÈRES; LALLEMAND, 1992): a existência de um lattice regular e simétrico, a conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia nas colisões, e a existência de uma função de distribuição de equilíbrio dependente somente das quantidades conservadas.

Atualmente, sabe-se que a equação 68 é uma forma especial de discretização que pode ser obtida diretamente da equação contínua de Boltzmann. A prova dessa conexão entre a equação contínua e a discreta sem fazer uso de um modelo lattice-gas aparece em 1997 no trabalho de He e Luo (HE; LUO, 1997), através de um método de quadratura que posteriormente formaria uma das bases teórica e sistemática de se obter a Equação de lattice Boltzmann com qualquer nível de aproximação à Equação de Boltzmann.

2.5 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

Um sistema composto por velocidades discretas obedece ao conjunto de equações 63, cuja discretização do tempo e do espaço podem ser obtidas por procedimentos usuais de expansão em séries de Taylor. Definindo

$$f(\vec{x}, \vec{e}_i, t) \equiv f_i(\vec{x}, t), \quad (69)$$

a expansão em torno de \vec{x} por um incremento $h\vec{e}$ e de t por um incremento δ resulta em

$$\begin{aligned} f_i(\vec{x} + \vec{e}_i h, t + \delta) &= f_i(\vec{x}, t) + \underbrace{\left(\delta \frac{\partial}{\partial t} + h \vec{e}_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right)}_{\mathcal{O}=1} f_i(\vec{x}, t) + \\ &\underbrace{\frac{1}{2!} \left(\delta \frac{\partial}{\partial t} + h e_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) \left(\delta \frac{\partial}{\partial t} + h e_{i\beta} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \right)}_{\mathcal{O}=2} f_i(\vec{x}, t) + \dots \end{aligned} \quad (70)$$

Desprezando os termos de ordem maior ou igual a 2, pode-se escrever

$$\frac{f_i(\vec{x} + \vec{e}_i h, t + \delta) - f_i(\vec{x}, t)}{\delta} = \frac{\partial}{\partial t} f_i(\vec{x}, t) + \frac{h}{\delta} e_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} f_i(\vec{x}, t) + \mathcal{O}(h^2). \quad (71)$$

Se \vec{e}_i é um vetor adimensional com magnitude igual à velocidade \vec{c}_i , $h\vec{e}_i$ será justamente a distância percorrida por uma partícula com velocidade \vec{c}_i no intervalo de tempo δ

$$\frac{h}{\delta}\vec{e}_i \equiv \vec{c}_i, \quad (72)$$

ou seja, a expressão

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\vec{x}, \vec{c}_i, t) + \vec{c}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}}f(\vec{x}, \vec{c}_i, t) = \frac{f_i(\vec{x} + \vec{e}_i h, t + \delta) - f_i(\vec{x}, t)}{\delta} + \mathcal{O}(h^2) \quad (73)$$

é uma aproximação de primeira ordem em série de Taylor para a equação de Boltzmann com velocidades discretas com erros da ordem $\mathcal{O}(h^2)$. Comparando com a equação (63), essa aproximação se traduz em

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i h, t + \delta) - f_i(\vec{x}, t) = \delta\Omega_i + \mathcal{O}(h^2). \quad (74)$$

Uma consequência direta da equação (74) é a de que se os pontos discretos do domínio físico que substituíram o domínio contínuo forem escolhidos de forma apropriada, juntamente com as direções \vec{e}_i , tem-se justamente o esquema de colisão-propagação mencionado na seção anterior, onde o valor da função em um ponto depende somente do valor da função em um ponto vizinho na iteração anterior, numa formulação explícita altamente eficiente do ponto de vista computacional. Fica evidente que este esquema se beneficia de uma rede ordenada de pontos e velocidades discretas que garanta esse processo, os lattices.

A construção de redes (ou lattices) está diretamente relacionada com o regime hidrodinâmico que o modelo pode alcançar, e não se limita a uma escolha aleatória de velocidades discretas, estas velocidades precisam garantir ao modelo consistência termodinâmica. Conforme mencionado nas seções anteriores, os momentos da função de distribuição são propriedades macroscópicas do escoamento, e a Equação de Boltzmann define a evolução de todos esses infinitos momentos. Um formalismo que conecte a Equação de Boltzmann a um conjunto de equações macroscópicas foi um tema central durante a evolução da Teoria Cinética e uma forma progressiva de se obter as equações de Euler, de Navier-Stokes, de Navier-Stokes-Fourier, etc. partindo da Equação de Boltzmann é através da análise de Chapman-Enskog, na qual também se fiava grande parte dos modelos discretos oriundos do lattice-gas.

A ideia é basicamente garantir que o modelo discreto, quando submetido à análise de escala de Chapman-Enskog, mantenha as mesmas características do modelo contínuo. A complexidade dessa metodologia, contudo, aumenta significativamente conforme se aumenta a ordem de análise, tornando quase inviável a obtenção de modelos que vão além das Equações de Navier-Stokes isotérmicas e incompressíveis sendo, inclusive, essa limitação motivo pelo qual muitos trabalhos tratam o método lattice Boltzmann como uma ferramenta que se limita a esse regime hidrodinâmico. A análise continua sendo

uma ferramenta de extrema importância, sobretudo na caracterização dos coeficientes de transporte associados ao modelo (CHAPMAN *et al.*, 1990). Uma forma sistemática e termodinamicamente consistente de discretização do espaço de velocidades e da determinação da função de distribuição de equilíbrio surge em 2006 com Philippi e colaboradores (PHILIPPI, P. *et al.*, 2006) e Shan e colaboradores (SHAN; YUAN; CHEN, 2006), numa abordagem chamada de quadratura com abscissas prescritas.

A discretização do espaço de velocidades como um processo de quadratura aparece já no trabalho de He e Luo (1997) (HE; LUO, 1997), juntamente com a definição da função de distribuição de equilíbrio como uma expansão da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann em séries de Taylor em função da velocidade. O grande salto dos trabalhos de 2006 é tratar a obtenção da função de distribuição segundo o método dos momentos apresentado em 1949 por Grad (GRAD, 1949b), numa abordagem similar à utilizada por Krook (KROOK, 1955) em 1955. Partindo da função de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann³

$$mf_{MB}^{eq}(\vec{\xi}) = \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{D/2} e^{-\frac{(\vec{\xi}-\vec{u})^2}{2RT}}, \quad (75)$$

e definindo as variáveis adimensionais $\rho^* = \rho/\rho_0$, $\theta = T/T_0$, $\vec{\xi}_0 = \vec{\xi}/\sqrt{RT_0}$ e $\vec{u}_0 = \vec{u}/\sqrt{RT_0}$, pode-se escrever a função de distribuição, também adimensional

$$f^{(0)}(\vec{\xi}_0) = \frac{mf_{MB}^{eq}(\vec{\xi})}{\rho_0/(RT_0)^{D/2}} = \rho^* \left(\frac{1}{2\pi\theta} \right)^{D/2} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{|\vec{\xi}_0 - \vec{u}_0|}{\sqrt{\theta}} \right)^2}. \quad (76)$$

No trabalho de Grad, é proposta a expansão da função de distribuição uma série de tensores de Hermite. De forma genérica, se uma função $g(\vec{x})$ é quadrado integrável, então pode ser expandida como (GRAD, 1949a)

$$g(\vec{x}) = \omega(\vec{x}) \left\{ a^{(0)} \mathcal{H}^{(0)}(\vec{x}) + a_i^{(1)} \mathcal{H}_i^{(1)}(\vec{x}) + \frac{1}{2!} a_{ij}^{(2)} \mathcal{H}_{ij}^{(2)}(\vec{x}) + \dots \right\}, \quad (77)$$

onde

$$\omega(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} e^{-\frac{1}{2}x^2}, \quad (78)$$

e os tensores de Hermite de ordem n dados por

$$\mathcal{H}^{(n)}(\vec{x}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\vec{x})} \nabla^n \omega(\vec{x}), \quad (79)$$

³ A função de distribuição aparece aqui multiplicada pela massa das moléculas, de sorte que a integral em relação ao espaço de velocidades resulta na densidade de massa no espaço físico.

com ∇^n sendo o operador gradiente aplicado n vezes. Os tensores de Hermite são um conjunto de bases do espaço de Hilbert com produto interno definido como

$$\langle f(\vec{x}), g(\vec{x}) \rangle = \int \omega(\vec{x}) f(\vec{x}) g(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (80)$$

satisfazendo a seguinte condição de ortogonalidade

$$\int \omega(\vec{x}) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{x}) \mathcal{H}_{j_1, j_2, \dots, j_n}^{(n)}(\vec{x}) d\vec{x} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 0, & m = n \text{ e } \{i_1, i_2, \dots\} \neq \forall \text{ permutação } \{j_1, j_2, \dots\} \\ n_1! n_2! \dots n_D!, & m = n \text{ e } \{i_1, i_2, \dots\} = \forall \text{ permutação } \{j_1, j_2, \dots\}, \end{cases} \quad (81)$$

sendo n_1 o número de vezes que a dimensão 1 aparece como sub-índice no conjunto $\{i_1, i_2, \dots\}$, n_2 o número de vezes que a dimensão 2 aparece como sub-índice, e assim por diante.

Expandindo a função $f(\vec{\xi}_0)$, com $\omega(\vec{\xi}_0) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} e^{-\frac{1}{2}\xi_0^2}$ em tensores de Hermite tem-se

$$f(\vec{\xi}_0) = \omega(\vec{\xi}_0) \left\{ \frac{1}{0!} a^{(0)}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) \mathcal{H}^{(0)}(\vec{\xi}_0) + \frac{1}{1!} a_i^{(1)}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) \mathcal{H}_i^{(1)}(\vec{\xi}_0) + \frac{1}{2!} a_{ij}^{(2)}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) \mathcal{H}_{ij}^{(2)}(\vec{\xi}_0) + \dots \right\}, \quad (82)$$

onde os coeficientes $a_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0)$ podem ser obtidos pela condição de ortogonalidade dos tensores,

$$a_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) = \int f(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0) d\vec{\xi}_0. \quad (83)$$

Pela definição de $\omega(\vec{\xi}_0)$, os tensores de Hermite são

$$\mathcal{H}^{(0)}(\vec{\xi}_0) = 1, \quad (84a)$$

$$\mathcal{H}_i^{(1)}(\vec{\xi}_0) = \xi_{0i}, \quad (84b)$$

$$\mathcal{H}_{ij}^{(2)}(\vec{\xi}_0) = \xi_{0i} \xi_{0j} - \delta_{ij}, \quad (84c)$$

⋮

de sorte que os coeficientes $a_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0)$ são exatamente momentos da função de distribuição, ou seja, propriedades termodinâmicas macroscópicas. Uma expansão de ordem N é dada pelo truncamento da equação 82 em $m = N$,

$$f^N(\vec{\xi}_0) = \omega(\vec{\xi}_0) \sum_{m=0}^N \frac{1}{m!} \mathbf{a}^{(m)}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) \mathcal{H}^{(m)}(\vec{\xi}_0). \quad (85)$$

Uma característica importante é que ao se truncar a expansão em uma dada ordem N , todos os momentos com ordem $\leq N$ não são alterados, podendo-se então determinar os coeficientes por

$$a_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) = \int f^N(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0) d\vec{\xi}_0, \quad m \leq N. \quad (86)$$

Levando em consideração que

$$f^N(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0) = \omega(\vec{\xi}_0) \frac{f^N(\vec{\xi}_0)}{\omega(\vec{\xi}_0)} \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0), \quad (87)$$

nota-se que tanto $\frac{f^N(\vec{\xi}_0)}{\omega(\vec{\xi}_0)}$ quanto $\mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0)$ são polinômios de ordem $\leq N$ em $\vec{\xi}_0$ sendo, portanto, o produto dessas funções um polinômio $p(\vec{\xi}_0)$ de ordem $\leq 2N$. Isso implica que as integrais que definem os coeficientes $\mathbf{a}^{(m)}$ podem ser expressas de forma precisa como uma soma ponderada

$$\begin{aligned} \int f^N(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0) d\vec{\xi}_0 &= \int \omega(\vec{\xi}_0) p(\vec{\xi}_0) d\vec{\xi}_0 = \\ \sum_{i=1}^b w_i p(\vec{\xi}_{0_i}) &= \sum_{i=1}^b w_i \frac{f^N(\vec{\xi}_{0_i})}{\omega(\vec{\xi}_{0_i})} \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_{0_i}) \end{aligned} \quad (88)$$

onde w_i e $\vec{\xi}_{0_i}$ são, respectivamente, os pesos e as abscissas de uma quadratura de Gauss-Hermite com b pontos.

A equação (88) possui o importante significado de que pode-se adotar as funções discretas $f^N(\vec{\xi}_{0_i})$ como variáveis em lugar da função contínua $f(\vec{\xi}_0)$ e recuperar os momentos hidrodinâmicos até a ordem desejada. Também torna o processo de discretização do espaço de velocidades na tarefa de encontrar os pesos w_i e velocidades discretas $\vec{\xi}_{0_i}$. Essa tarefa aparece no trabalho de Philippi e colaboradores (PHILIPPI, P. *et al.*, 2006) no método chamado de abscissas prescritas. Os autores demonstram que a condição necessária

para se atender a equação (88) é a de que o produto interno definido no espaço de Hilbert seja satisfeito no espaço discreto para os tensores de Hermite, ou seja,

$$\int \omega(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{j_1, j_2, \dots, j_n}^{(n)}(\vec{\xi}_0) d\vec{\xi}_0 = \sum_{i=1}^b w_i \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_{0_i}) \mathcal{H}_{j_1, j_2, \dots, j_n}^{(n)}(\vec{\xi}_{0_i}), \quad (89)$$

com $w_i = w_i(|\vec{\xi}_{0_i}|)$. Em geral, as abcissas $\vec{\xi}_{0_i}$ (as velocidades discretas) assim obtidas não são números inteiros, e o método de colisão-propagação (equação (74)) não poderia ser usado. Essa limitação pode ser contornada pela imposição de uma nova variável a_s , tal que $a_s \vec{e}_i = \vec{\xi}_{0_i}$, sendo \vec{e}_i um vetor adimensional cujas coordenadas são números inteiros.

Uma rede é completamente descrita por um conjunto de direções $\{\vec{e}_i\}$, pesos $\{w_i\}$ e da constante a_s . Para um conjunto de direções que seja invariante à reflexões e rotações de $\pi/2$ em relação aos eixos de coordenadas, é condição suficiente que sejam preservadas as normas dos tensores de Hermite

$$\int \omega(\vec{\xi}_0) \left[\mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0) \right]^2 d\vec{\xi}_0 = \sum_{i=1}^b w_i \left[\mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(a_s \vec{e}_i) \right]^2, \quad (90)$$

para $m = 0, 1, \dots, N$. Uma vez estabelecida a ordem N desejada, é possível determinar quantas equações linearmente independentes resultam da equação (90). De uma expansão de ordem $N = 2$, por exemplo, obtém-se

$$1 = \sum_{i=1}^b w_i, \quad (91a)$$

$$1 = \sum_{i=1}^b w_i [a_s e_{ix}]^2, \quad (91b)$$

$$2 = \sum_{i=1}^b w_i [a_s^2 e_{ix}^2 - 1]^2, \quad (91c)$$

$$1 = \sum_{i=1}^b w_i [a_s^2 e_{ix} e_{iy}]^2. \quad (91d)$$

Tomando por exemplo a mais conhecida rede bidimensional, a D2Q9 representada na figura 3, nota-se que esta possui 3 grupos de velocidades, de acordo com o módulo: $\{(0,0)\}$ (de módulo 0), $\{(1,0), (0,1), (-1,0), (0,-1)\}$ (de módulo 1) e $\{(1,1), (-1,1), (-1,-1), (1,-1)\}$ (de módulo

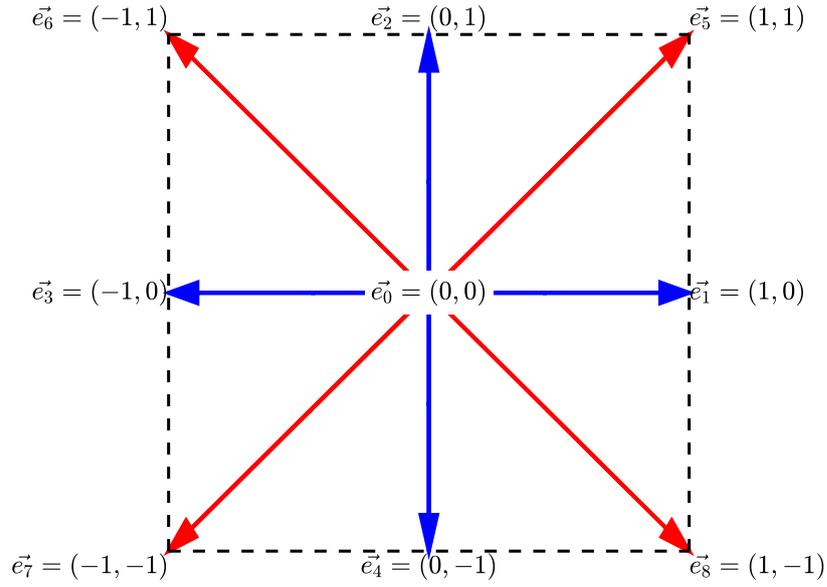


Figura 3 – Conjunto de velocidades da rede D2Q9.

$\sqrt{2}$). Tem-se, portanto, três pesos w_i ($|\vec{e}_i|$) e uma constante a_s a serem determinados por meio do sistema de 4 equações (91), de onde

$$\begin{cases} a_s = & \sqrt{3}, \\ w_0 = & 4/9, \\ w_{1,2,3,4} = & 1/9, \\ w_{5,6,7,8} = & 1/36. \end{cases} \quad (92)$$

A resolução do sistema de equações, contudo, nem sempre é possível para quaisquer grupos de direções, sendo este exercício cada vez mais trabalhoso conforme se aumenta a ordem e, conseqüentemente, o número de equações a serem resolvidas e o número de direções discretas. Em geral, tem-se um processo de tentativa e erro no qual arbitra-se um conjunto de velocidades e testa-se se este resolve, ou não, o sistema de equações com resultados reais para os pesos.

Resta ainda a determinação da função de distribuição de equilíbrio discretizada nos mesmos termos da função de distribuição. Pela substituição de $f(\vec{\xi}_0)$ na equação (83) por $f^{(0)}(\vec{\xi}_0)$ definida na equação (76), obtém-se os chamados momentos de equilíbrio

$$\begin{aligned} a_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m), eq}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) &= \int f^{(0)}(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0) d\vec{\xi}_0 = \\ &= \rho^* \frac{1}{(2\pi\theta)^{D/2}} \int e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{|\vec{\xi}_0 - \vec{u}_0|}{\sqrt{\theta}} \right)^2} \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\xi}_0) d\vec{\xi}_0, \end{aligned} \quad (93)$$

ou, com a mudança de variáveis $\vec{\eta} = \frac{\vec{\xi}_0 - \vec{u}_0}{\sqrt{\theta}}$,

$$a_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m), eq}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) = \rho^* \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int e^{-\frac{1}{2}|\vec{\eta}|^2} \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\vec{\eta}\sqrt{\theta} + \vec{u}_0) d\vec{\eta}, \quad (94)$$

sendo

$$\mathcal{H}^{(0)}(\vec{\eta}\sqrt{\theta} + \vec{u}_0) = 1, \quad (95a)$$

$$\mathcal{H}_i^{(1)}(\vec{\eta}\sqrt{\theta} + \vec{u}_0) = \sqrt{\theta}\eta_i + u_{0i}, \quad (95b)$$

$$\mathcal{H}_{ij}^{(2)}(\vec{\eta}\sqrt{\theta} + \vec{u}_0) = (\sqrt{\theta}\eta_i + u_{0i})(\sqrt{\theta}\eta_j + u_{0j}) - \delta_{ij}, \quad (95c)$$

de onde

$$a^{(0), eq}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) = \rho^*, \quad (96a)$$

$$a_i^{(1), eq}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) = \rho^* u_{0i}, \quad (96b)$$

$$a_{ij}^{(2), eq}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) = \rho^* u_{0i} u_{0j} + (\theta - 1) \delta_{ij}, \quad (96c)$$

⋮

e, portanto, a expansão

$$f^{N, eq}(\vec{\xi}_0) = \omega(\vec{\xi}_0) \sum_{m=0}^N \frac{1}{m!} \mathbf{a}^{(m), eq}(\rho^*, \theta, \vec{u}_0) \mathcal{H}^{(m)}(\vec{\xi}_0) \quad (97)$$

explicita a dependência da função de distribuição de equilíbrio somente das propriedades macroscópicas conservadas: massa (densidade), quantidade de movimento (velocidade) e energia (temperatura).

Mas, retomando as definições dos primeiros momentos da função de distribuição

$$\int f(\vec{\xi}_0) d\vec{\xi}_0 = \sum_{i=1}^b w_i \frac{f^N(\vec{\xi}_{0i})}{\omega(\vec{\xi}_{0i})} = \rho^*, \quad (98a)$$

$$\int f(\vec{\xi}_0) \xi_{0\alpha} d\vec{\xi}_0 = \sum_{i=1}^b w_i \frac{f^N(\vec{\xi}_{0i})}{\omega(\vec{\xi}_{0i})} \xi_{0i,\alpha} = \rho^* u_{0\alpha}, \quad (98b)$$

$$\int f(\vec{\xi}_0) \xi_0^2 d\vec{\xi}_0 = \sum_{i=1}^b w_i \frac{f^N(\vec{\xi}_{0i})}{\omega(\vec{\xi}_{0i})} \xi_{0i}^2 = \rho^* (D\theta + u_0^2), \quad (98c)$$

chega-se à conclusão de que também $f^{N,eq}(\vec{\xi}_0)$ depende somente do conhecimento dos polos $f^N(\vec{\xi}_{0i})$ e pesos w_i . Um ponto importante é que raramente trabalha-se com a função $f^N(\vec{\xi}_{0i})$, mas sim, com a função $f_i \equiv w_i \frac{f^N(a_s \vec{e}_i)}{\omega(a_s \vec{e}_i)}$ (lembrando que $a_s \vec{e}_i = \vec{\xi}_{0i}$ e adotando $a_s \vec{u}^* = \vec{u}_0$), obtendo assim as formas usuais nas quais se encontram as definições das propriedades macroscópicas na maioria dos trabalhos

$$\sum_{i=1}^b f_i = \rho^*, \quad (99a)$$

$$\sum_{i=1}^b f_i e_{i,\alpha} = \rho^* u_\alpha^*, \quad (99b)$$

$$\sum_{i=1}^b f_i e_i^2 = \rho^* \left(\frac{D\theta}{a_s^2} + u^{*2} \right). \quad (99c)$$

Deve-se, agora, argumentar sobre uma parte importante e muitas vezes confusa do método, que são as unidades envolvidas nos cálculos. Como mencionado anteriormente, ao ser adotada uma aproximação de primeira ordem em séries de Taylor na forma

$$f_i^N(\vec{x} + h\vec{e}_i, t + \delta) - f_i^N(\vec{x}, t) = -\frac{f_i^N(\vec{x}, t) - f_i^{N,eq}(\vec{x}, t)}{\tau/\delta}, \quad (100)$$

está-se resolvendo o sistema de equações

$$\frac{\partial}{\partial t} f_i^N(\vec{x}, t) + \left(\frac{h}{\delta} \vec{e}_i \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = -\frac{f_i^N(\vec{x}, t) - f_i^{N,eq}(\vec{x}, t)}{\tau}, \quad (101)$$

onde as velocidades discretas são

$$\frac{h}{\delta} \vec{e}_i \equiv \vec{c}_i \frac{[\text{lattices}]}{[\text{iteração}]}. \quad (102)$$

A razão h/δ fornece a chamada velocidade da rede que, no método da colisão-propagação, é unitária, de sorte que, numericamente, \vec{c}_i e \vec{e}_i possuem o mesmo valor. $[\text{lattices}]/[\text{iteração}]$ é também a unidade da velocidade \vec{u}^* . A conversão entre as velocidades física e da rede requer o conhecimento de uma velocidade característica física que possa ser relacionada com uma velocidade característica da rede. Uma opção é tomar essa velocidade como sendo a velocidade de propagação do som no meio. A velocidade do som é uma propriedade termodinâmica dada por

$$u_c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s \quad (103)$$

onde o subíndice s significa que a entropia se mantém constante. A equação (99c), por sua vez, é o traço do tensor de segunda ordem

$$\sum_{i=1}^b f_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} = P_{\alpha\beta}^* + \rho^* u_{\alpha}^* u_{\beta}^*, \quad (104)$$

cuja média dá a chamada parte hidrostática do tensor, que pode ser associada à pressão termodinâmica, dada pela equação de estado da rede

$$P^* = \frac{\rho^* \theta}{a_s^2}. \quad (105)$$

A equação de estado é utilizada para o cálculo da velocidade do som através da equação (103).

Reescrevendo a equação (103) na forma

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s = - \frac{\left. \frac{\partial s}{\partial \rho} \right)_P}{\left. \frac{\partial s}{\partial P} \right)_\rho} = - \frac{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right)_P \left. \frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_P}{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right)_\rho \left. \frac{\partial T}{\partial P} \right)_\rho}, \quad (106)$$

tem-se, pela definição dos calores específicos, que

$$\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right)_P = \frac{c_p}{T}, \quad (107a)$$

$$\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right)_\rho = \frac{c_v}{T}. \quad (107b)$$

Com a equação de estado de gás ideal $P = \rho RT$, obtém-se que

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_P = -\frac{T}{\rho}, \quad (108a)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial P} \right)_\rho = \frac{1}{\rho R} \quad (108b)$$

e a velocidade do som no meio físico é, portanto,

$$u_c^2 = \frac{c_p}{c_v} RT. \quad (109)$$

Como $\sqrt{RT_0}$ foi a velocidade de referência adotada na adimensionalização da função de distribuição (equação (75)), e que foi estabelecido que

$$\vec{\xi}_{0_i} = \frac{\vec{\xi}_i}{\sqrt{RT_0}} = a_s \vec{e}_i, \quad (110)$$

tem-se que

$$\sqrt{RT_0} = \frac{\vec{\xi}_i}{a_s \vec{e}_i}. \quad (111)$$

A discretização do espaço físico permite dizer qual é o valor da distância física entre dois pontos da rede h_f [m]/[latt] (este é o fator de conversão entre lattices e metros, ou outra unidade física de distância), que depende unicamente da discretização adotada. Também permite que seja escrito

$$\sqrt{RT_0} = \frac{h_f}{a_s} \frac{\vec{\xi}_i}{h_f \vec{e}_i}. \quad (112)$$

Mas a razão $\frac{h_f \vec{e}_i}{\xi_i}$ é justamente o tempo δ_f em [s]/[ite] que uma partícula com velocidade $\vec{\xi}_i$ leva para percorrer a distância $h_f \vec{e}_i$, de onde vem o fator de conversão

$$\varsigma = a_s \sqrt{RT_0} = \frac{h_f}{\delta_f} \frac{[\text{m/s}]}{[\text{lat/ite}]}. \quad (113)$$

Ou seja, uma velocidade em dimensões físicas é dada pela multiplicação da velocidade adimensional em [lat]/[ite] pelo fator de conversão ς , o que também é verdade para a velocidade do som, de sorte que

$$u_c = u_c^* \varsigma \implies u_c^* = \frac{1}{a_s} \sqrt{\frac{c_p}{c_v}} \theta. \quad (114)$$

A razão de calores específicos é um parâmetro relacionado aos graus de liberdade de movimento do gás. Para gases monoatômicos, somente graus de liberdade de translação estão presentes, e tem-se a relação $\frac{c_p}{c_v} = \frac{D+2}{D}$, de onde obtém-se que a velocidade do som isentrópica de uma rede bidimensional ($D=2$) é

$$u_c^* = \frac{\sqrt{2\theta}}{a_s}. \quad (115)$$

Modelos de ordem mais baixa não contemplam a troca de calor, estando sujeitos somente à processos isotérmicos. A velocidade do som isotérmica de um gás ideal é dada por

$$u_c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = RT, \quad (116)$$

e, usando o fator de conversão ς , tem-se a velocidade do som de uma rede isotérmica

$$u_c^* = \frac{\sqrt{\theta}}{a_s} \stackrel{\theta=1}{=} \frac{1}{a_s}. \quad (117)$$

Em resumo, uma vez estabelecida uma dimensão no domínio físico, a razão entre esta dimensão e o número de pontos utilizados na sua discretização fornece o fator de conversão para dimensões de comprimento $h_f = \frac{\text{dimensão física}}{\text{número de pontos na discretização}}$ e, arbitrando uma temperatura de referência T_0 , obtém-se o fator de conversão entre velocidades $\varsigma = \frac{u_c}{u_c^*}$, de onde tem-se também o fator de conversão para a unidade de tempo $\delta_f = \frac{h_f}{\varsigma}$ em [s]/[ite]. As demais unidades derivam diretamente das suas definições $T = \theta T_0$ e $\rho = \rho^* \rho_0$

2.6 COEFICIENTES DE TRANSPORTE

Um dos métodos analíticos de obtenção de soluções aproximadas de sistemas dinâmicos não lineares é pelo emprego de aproximações assintóticas, ou métodos de perturbação, onde a solução do problema é expandida em termos de algum (pequeno) parâmetro ε associado ao problema (HOLMES, 1998). A análise de escala de Chapman-Enskog é um método de perturbação aplicado à Equação de Boltzmann tendo como parâmetro de perturbação o Número de Knudsen Kn , tendo como resultado conjuntos de equações diferenciais das propriedades macroscópicas passíveis de serem identificadas, conforme se aumenta a ordem de aproximação, com as Equações de Euler, Navier-Stokes, Burnett, etc. (AGARWAL; YUN; BALAKRISHNAN, 2001). Apesar de não apontar uma solução propriamente dita, o método joga luz sobre as características físicas associadas ao modelo matemático, como a determinação dos coeficientes de transporte, por exemplo.

Seguindo o procedimento apresentado em (CHAPMAN *et al.*, 1990), se f é uma solução para a equação de Boltzmann, essa solução pode ser escrita como

$$f = f^{(0)} + \varepsilon f^{(1)} + \varepsilon^2 f^{(2)} + \dots, \quad (118)$$

e é assumida a existência um operador ζ , também expansível em séries de ε , atuando na expansão de f tal que

$$\zeta(f) = \zeta^{(0)}(f^{(0)}) + \varepsilon \zeta^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) + \varepsilon^2 \zeta^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) + \dots \quad (119)$$

Se esta expansão existe, tal que $\zeta(f) = 0$, cada termo pode ser individualmente igualado a zero

$$\begin{cases} \zeta^{(0)}(f^{(0)}) = & 0 \\ \varepsilon \zeta^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) = & 0 \\ \varepsilon^2 \zeta^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) = & 0 \\ \vdots & \end{cases} \quad (120)$$

Tomando a Equação de Boltzmann sem forças externas e com termo de colisão BGK,

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \xi_i \frac{\partial}{\partial x_i} f = \frac{f^{eq} - f}{\tau}, \quad (121)$$

se Γ é uma unidade macroscópica de tempo, L uma unidade macroscópica de comprimento, δ uma unidade de tempo microscópica e l uma unidade de comprimento microscópica,

pode-se definir as variáveis adimensionais $t^* = t/\Gamma$, $x^* = x/L$ e $\xi^* = \delta\xi/l$ e reescrever a equação de Boltzmann como

$$\frac{\delta}{\Gamma} \frac{\partial}{\partial t^*} f + \frac{l}{L} \xi_i^* \frac{\partial}{\partial x_i^*} f = \frac{\delta}{\tau} \frac{f^{eq} - f}{1}. \quad (122)$$

A razão entre uma dimensão de comprimento microscópica e uma macroscópica, como o livre caminho médio das moléculas e o diâmetro de um duto, por exemplo, se relaciona com o número de Knudsen, que serve de parâmetro para a validade de teorias do contínuo, que só valem quando $\text{Kn} \rightarrow 0$. Pode-se admitir que $\delta/\Gamma \approx l/L$ e $\delta \approx \tau$ e então tem-se

$$\text{Kn} \left(\frac{\partial}{\partial t^*} f + \xi_i^* \frac{\partial}{\partial x_i^*} f \right) = f^{eq} - f. \quad (123)$$

No procedimento adotado por Chapman e Enskog, o número de Knudsen Kn é adotado como o parâmetro ε para a expansão de f ,

$$f = f^{(0)} + \text{Kn}f^{(1)} + \text{Kn}^2f^{(2)} + \dots \quad (124)$$

E para a obtenção do operador ζ é adotada a expansão da derivada temporal

$$\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} + \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_2^*} + \dots, \quad (125)$$

de forma que a Equação de Boltzmann com termo de colisão BGK pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} & \left(\text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} + \dots \right) \left(f^{(0)} + \text{Kn}f^{(1)} + \text{Kn}^2f^{(2)} + \dots \right) + \\ & \text{Kn} \xi_i^* \frac{\partial}{\partial x_i^*} \left(f^{(0)} + \text{Kn}f^{(1)} + \text{Kn}^2f^{(2)} + \dots \right) - \\ & f^{eq} + \left(f^{(0)} + \text{Kn}f^{(1)} + \text{Kn}^2f^{(2)} + \dots \right) = 0 \end{aligned} \quad (126)$$

Como cada ordem em Kn pode ser igualada individualmente a zero, obtém-se uma aproximação sucessiva e recursiva para as diferentes ordens da função de distribuição

$$f^{(0)} = f^{eq}, \quad (127a)$$

$$\text{Kn}f^{(1)} = \text{Kn} \left(-\frac{\partial}{\partial t_0^*} f^{eq} - \xi_i^* \frac{\partial}{\partial x_i^*} f^{eq} \right), \quad (127b)$$

$$\text{Kn}^2f^{(2)} = \text{Kn}^2 \left(-\frac{\partial}{\partial t_1^*} f^{eq} - \frac{\partial}{\partial t_0^*} f^{(1)} - \xi_i^* \frac{\partial}{\partial x_i^*} f^{(1)} \right), \quad (127c)$$

⋮

Diferentes ordens de aproximação são alcançadas de acordo com a ordem máxima considerada na análise. Para a obtenção dos conjuntos de equações diferenciais resultantes são calculados os momentos de equilíbrio $\{1, \vec{\xi}, \xi^2\}$ da função de distribuição em relação ao espaço de velocidades em cada ordem em Knudsen. Da aproximação de ordem 0 (equação (127a)), conclui-se que

$$\int (f - f^{eq}) d\vec{\xi} = \int \left(\text{Kn} f^{(1)} + \text{Kn}^2 f^{(2)} + \dots \right) d\vec{\xi} = 0, \quad (128a)$$

$$\int (f - f^{eq}) \vec{\xi} d\vec{\xi} = \int \left(\text{Kn} f^{(1)} + \text{Kn}^2 f^{(2)} + \dots \right) \vec{\xi} d\vec{\xi} = 0, \quad (128b)$$

$$\int (f - f^{eq}) \xi^2 d\vec{\xi} = \int \left(\text{Kn} f^{(1)} + \text{Kn}^2 f^{(2)} + \dots \right) \xi^2 d\vec{\xi} = 0, \quad (128c)$$

de onde conclui-se que, para $n > 0$

$$\int f^{(n)} d\vec{\xi} = 0, \quad (129a)$$

$$\int f^{(n)} \vec{\xi} d\vec{\xi} = 0, \quad (129b)$$

$$\int f^{(n)} \xi^2 d\vec{\xi} = 0. \quad (129c)$$

Para a ordem 1 em Knudsen, tem-se para a equação (127b)

$$\begin{aligned} \int f^{(1)} d\vec{\xi} &= -\text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{eq} d\vec{\xi} - \text{Kn} \frac{\partial}{\partial x_i^*} \int f^{eq} \xi_i^* d\vec{\xi} \implies \\ \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} (\rho) + \delta \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) &= 0, \end{aligned} \quad (130a)$$

$$\begin{aligned} \int f^{(1)} \xi_j d\vec{\xi} &= -\text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{eq} \xi_j d\vec{\xi} - \text{Kn} \frac{\partial}{\partial x_i^*} \int f^{eq} \xi_i^* \xi_j d\vec{\xi} \implies \\ \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} (\rho u_j) + \delta \frac{\partial}{\partial x_i} (P \delta_{ij} + \rho u_i u_j) &= 0, \end{aligned} \quad (130b)$$

$$\begin{aligned} \int f^{(1)} \xi^2 d\vec{\xi} &= -\text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{eq} \xi^2 d\vec{\xi} - \text{Kn} \frac{\partial}{\partial x_i^*} \int f^{eq} \xi_i^* \xi^2 d\vec{\xi} \implies \\ \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} (\rho u^2 + DP) + \delta \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u^2 u_i + (D+2) P u_i) &= 0, \end{aligned} \quad (130c)$$

onde $P = \rho RT$. O produto interno da equação (130b) com a velocidade, após alguma manipulação, permite concluir que

$$\text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} (\rho u^2) + \delta \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u^2 u_i) = -2\delta \frac{\partial}{\partial x_i} (P u_i) + 2\delta P \frac{\partial}{\partial x_i} u_i, \quad (131)$$

de onde pode-se reescrever a equação (130c) como

$$\begin{aligned} \int f^{(1)} \xi^2 d\vec{\xi} &= -\text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{eq} \xi^2 d\vec{\xi} - \text{Kn} \frac{\partial}{\partial x_i^*} \int f^{eq} \xi_i^* \xi^2 d\vec{\xi} \implies \\ \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \left(\frac{D\rho RT}{2} \right) + \delta \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{u_i D\rho RT}{2} \right) + \delta \rho RT \frac{\partial}{\partial x_i} u_i &= 0. \end{aligned} \quad (132)$$

Se a expansão é truncada nessa ordem, $\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial t_0^*}$, e obtém-se o seguinte conjunto de equações

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (133a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho RT), \quad (133b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{D}{2} \rho RT \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{D}{2} \rho RT u_j \right) = -\rho RT \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j), \quad (133c)$$

que são as Equações de Euler.

Considerando agora os termos de ordem Kn^2 (equação (127c)),

$$\begin{aligned} \text{Kn}^2 \int f^{(2)} d\vec{\xi} &= \\ -\text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} \int f^{eq} d\vec{\xi} - \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{(1)} d\vec{\xi} - \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial x_i^*} \int f^{(1)} \xi_i^* d\vec{\xi} & \\ \implies \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} (\rho) &= 0, \end{aligned} \quad (134a)$$

$$\begin{aligned} \text{Kn}^2 \int f^{(2)} \xi_j d\vec{\xi} &= \\ -\text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} \int f^{eq} \xi_j d\vec{\xi} - \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{(1)} \xi_j d\vec{\xi} - \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial x_i^*} \int f^{(1)} \xi_i^* \xi_j d\vec{\xi} & \\ \implies \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} (\rho u_j) + \text{Kn} \delta \frac{\partial}{\partial x_i} \int f^{(1)} \xi_i \xi_j d\vec{\xi} &= 0, \end{aligned} \quad (134b)$$

$$\begin{aligned} \text{Kn}^2 \int f^{(2)} \xi^2 d\vec{\xi} &= \\ -\text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} \int f^{eq} \xi^2 d\vec{\xi} - \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{(1)} \xi^2 d\vec{\xi} - \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial x_i^*} \int f^{(1)} \xi_i^* \xi^2 d\vec{\xi} & \\ \implies \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} (\rho u^2 + D\rho RT) + \text{Kn} \delta \frac{\partial}{\partial x_i} \int f^{(1)} \xi_i \xi^2 d\vec{\xi} &= 0. \end{aligned} \quad (134c)$$

Surgem nessa ordem dois momentos de não equilíbrio não nulos, $\int f^{(1)} \xi_i \xi_j d\vec{\xi}$ e $\int f^{(1)} \xi_i \xi^2 d\vec{\xi}$, que podem ser expressos em termos da função de equilíbrio, de acordo com a equação (127b)

$$\begin{aligned} \int f^{(1)} \xi_i \xi_j d\vec{\xi} &= -\frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{eq} \xi_i \xi_j d\vec{\xi} - \frac{\delta}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_k} \int f^{eq} \xi_i \xi_j \xi_k d\vec{\xi} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial t_0^*} (P\delta_{ij} + \rho u_i u_j) - \\ &= \frac{\delta}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_i u_j u_k + \rho RT (u_i \delta_{jk} + u_j \delta_{ik} + u_k \delta_{ij})). \end{aligned} \quad (135)$$

Mas, das equações (130), pode-se inferir que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_0^*} (P\delta_{ij} + \rho u_i u_j) &= \\ &= -\frac{\delta}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_i u_j u_k + \rho RT (u_i \delta_{jk} + u_j \delta_{ik} + u_k \delta_{ij})) + \\ &= \frac{\delta}{\text{Kn}} \rho RT \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \delta_{ij} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) \\ \implies \int f^{(1)} \xi_i \xi_j d\vec{\xi} &= -\frac{\delta}{\text{Kn}} \rho RT \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \delta_{ij} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right), \end{aligned} \quad (136)$$

portanto,

$$\text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} (\rho u_j) - \delta^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho RT \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \delta_{ij} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) \right) = 0. \quad (137)$$

Somando as diferentes ordens, ou seja, as equações (130b) e (137)

$$\begin{aligned} \frac{\text{Kn}}{\delta} \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} \right) (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) &= -\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho RT) + \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\delta \rho RT \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \delta_{ij} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) \right) \end{aligned} \quad (138)$$

Com a expansão truncada nessa ordem, $\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*}$ e como, por hipótese, $\delta \approx \tau$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) &= -\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho RT) + \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau \rho RT \left(\frac{\partial}{\partial x_i} u_j + \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \delta_{ij} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) \right), \end{aligned} \quad (139)$$

que é o balanço da quantidade de movimento expressa pela Equação de Navier-Stokes para um gás ideal. A viscosidade dinâmica do fluido se relaciona com o tempo de relaxação no termo de colisão na Equação de Boltzmann por

$$\mu = \tau \rho RT. \quad (140)$$

Já o momento que surge na equação (134c) assume a forma

$$\begin{aligned} \int f^{(1)} \xi_i \xi^2 d\vec{\xi} &= -\frac{\partial}{\partial t_0^*} \int f^{eq} \xi_i \xi^2 d\vec{\xi} - \frac{\delta}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_j} \int f^{eq} \xi_i \xi_j \xi^2 d\vec{\xi} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial t_0^*} \left(\rho u^2 u_i + (D+2) \rho RT u_i \right) - \frac{\delta}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_j} \times \\ &\quad \left(\rho u^2 u_i u_j + \rho RT \left(u_i u_j (D+4) + \delta_{ij} u^2 \right) + \rho (RT)^2 (D+2) \delta_{ij} \right), \end{aligned} \quad (141)$$

que novamente, das equações (130), pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \left(\rho u^2 u_i + (D+2) \rho RT u_i \right) &= -\frac{\delta}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_j} \times \\ &\quad \left(\rho u^2 u_i u_j + \rho RT \left(u_i u_j (D+4) + \delta_{ij} u^2 \right) + \rho (RT)^2 (D+2) \delta_{ij} \right) + \\ &\quad \frac{\delta}{\text{Kn}} 2\rho RT \left(u_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \frac{2}{D} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) + \frac{(D+2)}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (RT) \right) \\ \implies \int f^{(1)} \xi_i \xi^2 d\vec{\xi} &= -\frac{\delta}{\text{Kn}} 2\rho RT \times \\ &\quad \left(u_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \frac{2}{D} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) + \frac{(D+2)}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (RT) \right). \end{aligned} \quad (142)$$

Então,

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Kn}^2 \frac{\partial}{\partial t_1^*} \left(\rho u^2 + D\rho RT \right) - \delta^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \times \\ &\quad \left(2\rho RT \left(u_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \frac{2}{D} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) + \frac{(D+2)}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (RT) \right) \right), \end{aligned} \quad (143)$$

e somando as ordens (equações (130c) e (143)),

$$\begin{aligned} \text{Kn} \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} \right) \left(\rho u^2 + D\rho RT \right) &+ \delta \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u^2 u_i + (D+2) \rho RT u_i \right) \\ &= 2\delta^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho RT \left(u_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \frac{2}{D} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(D+2)}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (RT) \right) \right). \end{aligned} \quad (144)$$

Com as hipóteses anteriores de que $\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*}$ e $\delta \approx \tau$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho u^2 + D\rho RT \right) &+ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u^2 u_i + (D+2) \rho RT u_i \right) = 2\tau \frac{\partial}{\partial x_i} \times \\ &\quad \left(\rho RT \left(u_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \frac{2}{D} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) + \frac{(D+2)}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (RT) \right) \right). \end{aligned} \quad (145)$$

O produto interno da velocidade com a equação do balanço da quantidade de movimento resulta no balanço de energia cinética

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u^2) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u^2 u_j) &= -2u_i \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho RT) + \\ 2u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau \rho RT \left(\frac{\partial}{\partial x_i} u_j + \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \delta_{ij} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) \right), \end{aligned} \quad (146)$$

que subtraído da equação (145) resulta na equação de conservação de energia interna

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{D\rho RT}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{D}{2} \rho RT u_i \right) &= -\rho RT \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i) + \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau \rho R^2 T \frac{(D+2)}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (T) \right) + \\ \tau \rho RT \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j - \frac{2}{D} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right) \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j). \end{aligned} \quad (147)$$

Conclui-se, por comparação com as Equações de Navier-Stokes-Fourier, que a condutividade térmica κ se relaciona também com o tempo de relaxação no termo de colisão τ por

$$\kappa = \tau \rho R^2 T \frac{(D+2)}{2}. \quad (148)$$

Para um gás ideal monoatômico somente com movimentos de translação, $c_p = R \frac{(D+2)}{2}$, de onde pode-se determinar o coeficiente de difusividade térmica do modelo pela relação $\alpha = \kappa / \rho c_p = \tau RT$. Também, tem-se a viscosidade cinemática $\nu = \mu / \rho = \tau RT$, ou seja, para um modelo de colisão BGK, tanto a difusividade quanto a viscosidade cinemática possuem o mesmo valor, o que implica em um Número de Prandtl $Pr = \nu / \alpha$ unitário. Modelos que necessitem um número de Prandtl variável requerem outros modelos de colisão.

A próxima ordem de análise renderia como resultado as Equações de Burnett e as ordens mais altas são chamadas de Equações de super-Burnett (GORBAN; KARLIN, 2017; AGARWAL; YUN; BALAKRISHNAN, 2001; STRUCHTRUP, 2004). O Número de Knudsen fornece uma medida de quão rarefeito é o escoamento, sendo que, quanto mais rarefeito o escoamento, menor será a validade da teoria do contínuo na sua representação. As Equações de Euler são válidas quando $Kn \rightarrow 0$, e as Equações de Navier-Stokes-Fourier são válidas quando $Kn \ll 1$, mas não necessariamente nulo.

Fica evidente a complexidade da obtenção de novas equações que contemplem número de Knudsen finitos, que são o caso de fenômenos como ondas de choques e transição de fase. A Equação de Boltzmann, por sua vez, é válida para todos os regimes hidrodinâmicos, e especialmente útil em regimes onde o número de Knudsen é moderado,

sendo a equação discreta de Boltzmann uma simples e poderosa ferramenta capaz de resolver essa equação.

A análise de Chapman–Enskog revela uma outra característica importante. Como é uma expansão recursiva onde $f^{(0)}$ depende de $f^{(eq)}$, $f^{(1)}$ depende de $f^{(0)}$, e assim por diante, de certa forma, independentemente da ordem de aproximação em Knudsen, recai-se sempre na correta determinação dos fluxos dos momentos de alta ordem da função de distribuição de equilíbrio. A correta recuperação das Equações de Euler (ordem 1) requer a correta avaliação dos momentos $\vec{\xi}\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}\vec{\xi}^2$ da função de equilíbrio. Na ordem 2 (NSE), os momentos $\vec{\xi}\vec{\xi}\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}\vec{\xi}\vec{\xi}^2$ são necessários, e assim sucessivamente. É nessa característica que os modelos de baixa ordem falham na tarefa de simular corretamente escoamentos compressíveis e não isotérmicos. A rede de segunda ordem em tensores de Hermite D2Q9 não recupera corretamente o momento $\vec{\xi}\vec{\xi}^2$ da função de distribuição de equilíbrio, que é uma contração de um momento de terceira ordem. A expansão em tensores de Hermite, contudo, garante a conservação dos momentos da função de distribuição de equilíbrio até qualquer ordem N , sendo que, de forma genérica, para que momentos de ordem n para uma aproximação de ordem k em Knudsen sejam corretamente representados, uma expansão de ordem $N = n + k$ em tensores de Hermite é requerida (SHAN; YUAN; CHEN, 2006).

Geralmente se está interessado na conservação da massa (momento de ordem zero), da quantidade de movimento (momento de ordem 1) e da energia (momento de ordem 2) para uma aproximação de ordem 2 em Knudsen (Equações de Navier-Stokes-Fourier), de sorte que necessita-se uma expansão de ao menos ordem 4 em tensores de Hermite. O método, entretanto, é amplo e irrestrito, servindo para se alcançar qualquer regime desejado.

2.7 MODELOS DISCRETOS

A correta discretização do espaço de velocidades garante a conservação dos momentos de equilíbrio até a ordem desejada e, conseqüentemente, a obtenção de qualquer regime hidrodinâmico que se queira alcançar. A discretização do tempo e do espaço, contudo, caracterizam apenas uma aproximação para a Equação Contínua de Boltzmann, sendo essa aproximação uma fonte de erros que também podem ser estimados com o auxílio da Análise de Chapman-Enskog. Tomando novamente a equação (70)

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i h, t + \delta) = \frac{1}{0!} f_i(\vec{x}, t) + \underbrace{\frac{1}{1!} (\delta \partial_t + h e_{i_\alpha} \partial_\alpha)}_{\mathcal{O}=1} f_i(\vec{x}, t) + \underbrace{\frac{1}{2!} (\delta \partial_t + h e_{i_\alpha} \partial_\alpha) (\delta \partial_t + h e_{i_\beta} \partial_\beta)}_{\mathcal{O}=2} f_i(\vec{x}, t) + \dots, \quad (149)$$

tem-se para o método da colisão-propagação que

$$\begin{aligned} \frac{f_i(\vec{x} + \vec{e}_i h, t + \delta) - \frac{1}{0!} f_i(\vec{x}, t)}{\delta} &= \underbrace{\frac{1}{1!} (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i(\vec{x}, t)}_{\text{Eq. Boltzmann}} + \\ &\underbrace{\frac{1}{2!} \delta (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) (\partial_t + c_{i\beta} \partial_\beta) f_i(\vec{x}, t) + \dots}_{\text{Erros } \mathcal{O}=2} = \Omega_i, \end{aligned} \quad (150)$$

onde os termos de ordem mais alta na expansão em série de Taylor aparecem como erros de discretização. O segundo termo da expansão representa os erros mais altos, e será incorporado na análise apresentada previamente.

Introduzindo as variáveis adimensionais $t^* = t/\Gamma$, $\vec{x}^* = \vec{x}/L$ e $\vec{c}_i^* = \delta \vec{c}_i/h$, pode-se escrever

$$\begin{aligned} \underbrace{\left(\frac{\delta}{\Gamma} \frac{\partial}{\partial t^*} + \frac{h}{L} c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \right) f_i(\vec{x}, t)}_{\text{Eq. Boltzmann}} + \\ \frac{1}{2} \underbrace{\left(\frac{\delta}{\Gamma} \frac{\partial}{\partial t^*} + \frac{h}{L} c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \right) \left(\frac{\delta}{\Gamma} \frac{\partial}{\partial t^*} + \frac{h}{L} c_{i\beta}^* \frac{\partial}{\partial x_\beta^*} \right) f_i(\vec{x}, t) + \dots}_{\text{Erros } \mathcal{O}=2} = \delta \Omega_i. \end{aligned} \quad (151)$$

Seguindo a hipótese de que $\delta/\Gamma \approx h/L \approx \text{Kn}$,

$$\begin{aligned} \underbrace{\text{Kn} \left(\frac{\partial}{\partial t^*} + c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \right) f_i(\vec{x}, t)}_{\text{Eq. Boltzmann}} + \\ \frac{1}{2} \text{Kn}^2 \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t^*} \frac{\partial}{\partial t^*} + 2c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial t^*} + c_{i\alpha}^* c_{i\beta}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial x_\beta^*} \right) f_i(\vec{x}, t) + \dots}_{\text{Erros } \mathcal{O}=2} = \delta \Omega_i, \end{aligned} \quad (152)$$

onde, com o termo de colisão BGK,

$$\begin{aligned} &\text{Kn} \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} + \dots + c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \right) (f_i^{(0)} + \text{Kn} f_i^{(1)} + \dots) + \\ &\frac{\text{Kn}^2}{2} \left(\left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} + \dots \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} + \dots \right) + \right. \\ &2c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} + \dots \right) + c_{i\alpha}^* c_{i\beta}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial x_\beta^*} \left. \right) \times \\ &(f_i^{(0)} + \text{Kn} f_i^{(1)} + \dots) = \frac{\delta}{\tau} (f_i^{eq} - f_i^{(0)} - \text{Kn} f_i^{(1)} - \dots). \end{aligned} \quad (153)$$

Isolando cada ordem em Knudsen, tem-se as formulações recursivas

$$f_i^{(0)} = f_i^{eq}, \quad (154a)$$

$$\frac{\delta}{\tau} \text{Kn} f_i^{(1)} = -\text{Kn} \left(\frac{\partial}{\partial t_1^*} f_i^{eq} + c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} f_i^{eq} \right), \quad (154b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\tau} \text{Kn}^2 f_i^{(2)} = & -\text{Kn}^2 \left(\frac{\partial}{\partial t_1^*} f_i^{(eq)} + \frac{\partial}{\partial t_0^*} f_i^{(1)} + c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} f_i^{(1)} + \right. \\ & \left. \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \frac{\partial}{\partial t_0^*} f_i^{eq} + c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial t_0^*} f_i^{eq} + \frac{1}{2} c_{i\alpha}^* c_{i\beta}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial x_\beta^*} f_i^{eq}}_{\text{erros}} \right). \end{aligned} \quad (154c)$$

Mas,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \frac{\partial}{\partial t_0^*} f_i^{eq} + c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial t_0^*} f_i^{eq} + \frac{1}{2} c_{i\alpha}^* c_{i\beta}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial x_\beta^*} f_i^{eq} = \\ - \frac{\delta}{2\tau} \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} f_i^{(1)} + c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} f_i^{(1)} \right), \end{aligned} \quad (155)$$

e, então,

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\tau} \text{Kn}^2 f_i^{(2)} = & -\text{Kn}^2 \left(\frac{\partial}{\partial t_1^*} f_i^{(eq)} + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right) \frac{\partial}{\partial t_0^*} f_i^{(1)} + \right. \\ & \left. \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right) c_{i\alpha}^* \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} f_i^{(1)} \right), \end{aligned} \quad (156)$$

de onde, por comparação com a análise aplicada à equação contínua, conclui-se que o termo $-\delta/2\tau$ aparece como um erro de segunda ordem em Knudsen, alterando os coeficientes de transporte.

Calculando os momentos $\{1, \vec{c}_i, c_i^2\}$ em relação às velocidades discretas, para a ordem 1 em Knudsen, tem-se

$$\begin{aligned} - \frac{\delta}{\tau} \text{Kn} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} &= \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} + \delta \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_{i\gamma} \\ \implies \boxed{\frac{\text{Kn}}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_0^*} (\rho^*) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\rho^* u_\gamma^*)} &= 0, \end{aligned} \quad (157a)$$

$$\begin{aligned} - \frac{\delta}{\tau} \text{Kn} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_{i\alpha} &= \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_{i\alpha} + \delta \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_{i\alpha} c_{i\gamma} \\ \implies \boxed{\frac{\text{Kn}}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_0^*} (\rho^* u_\alpha^*) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\rho^* u_\alpha^* u_\gamma^*)} &= - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \right), \end{aligned} \quad (157b)$$

$$\begin{aligned}
-\frac{\delta}{\tau} \text{Kn} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_i^2 &= \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_0^*} f_i^{eq} c_i^2 + \delta \frac{\partial}{\partial x_\gamma} f_i^{eq} c_i^2 c_{i_\gamma} \implies \\
\boxed{\frac{\text{Kn}}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \left(\frac{\rho^* u^{*2}}{2} + \frac{D \rho^* \theta}{2 a_s^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\frac{\rho^* u^{*2}}{2} u_\gamma^* + \frac{D \rho^* \theta}{2 a_s^2} u_\gamma^* \right)} &= \\
\boxed{-\frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\frac{\rho^* \theta}{a_s^2} u_\gamma^* \right)}. &
\end{aligned} \tag{157c}$$

Das equações acima pode-se retirar as relações

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_{i_\alpha} c_{i_\beta} &= -\frac{\tau}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_{i_\alpha} c_{i_\beta} - \frac{\tau}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_{i_\alpha} c_{i_\beta} c_{i_\gamma} = \\
-\frac{\tau}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \left(\rho^* u_\alpha^* u_\beta^* + \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \right) - & \\
\frac{\tau}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\rho^* u_\alpha^* u_\beta^* u_\gamma^* + \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \left(u_\alpha^* \delta_{\beta\gamma} + u_\beta^* \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma^* \delta_{\alpha\beta} \right) \right) &= \\
-\frac{\tau}{\text{Kn}} \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \left(\frac{\partial}{\partial x_\beta} u_\alpha^* + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} u_\beta^* - \delta_{\alpha\beta} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} u_\gamma^* \right), &
\end{aligned} \tag{158a}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_{i_\alpha} c_i^2 &= -\frac{\tau}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_{i_\alpha} c_i^2 - \frac{\tau}{\text{Kn}} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_{i_\alpha} c_{i_\gamma} c_i^2 = \\
-\frac{\tau}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_0^*} \left(\rho^* u_\alpha^* u^{*2} + (D+2) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} u_\alpha^* \right) - \frac{\tau}{\delta} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\rho^* u_\alpha^* u_\beta^* u^{*2} + \right. & \\
\left. \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \left((D+4) u_\alpha^* u_\beta^* + \delta_{\alpha\beta} u^{*2} \right) + \frac{\rho^* \theta^2}{a_s^4} (D+2) \delta_{\alpha\beta} \right) &= -\frac{\tau}{\text{Kn}} 2 \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \\
\times \left(u_\beta^* \left(\frac{\partial}{\partial x_\beta} u_\alpha^* + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} u_\beta^* - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_\delta} u_\delta^* \right) + \frac{(D+2)}{2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\theta}{a_s^2} \right) \right). &
\end{aligned} \tag{158b}$$

Os mesmos momentos para a ordem 2 em Knudsen rendem

$$\begin{aligned}
\frac{\delta}{\tau} \text{Kn}^2 \sum_{i=1}^b f_i^{(2)} &= -\text{Kn}^2 \left(\frac{\partial}{\partial t_1^*} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right) \frac{\partial}{\partial t_0^*} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} \right. \\
\left. + \frac{\delta}{\text{Kn}} \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right) \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_{i_\gamma} \right) &\implies \boxed{\frac{\text{Kn}^2}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_1^*} (\rho^*) = 0},
\end{aligned} \tag{159a}$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\tau} \text{Kn}^2 \sum_{i=1}^b f_i^{(2)} c_{i\alpha} &= -\text{Kn}^2 \left(\frac{\partial}{\partial t_1^*} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_{i\alpha} + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\partial}{\partial t_0^*} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_{i\alpha} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta}{\text{Kn}} \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_{i\gamma} c_{i\alpha} \right) \end{aligned} \quad (159b)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad &\boxed{\frac{\text{Kn}^2}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_1^*} (\rho^* u_\alpha^*) =} \\ &\boxed{\frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} u_\gamma^* + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} u_\alpha^* - \delta_{\gamma\alpha} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_\delta} u_\delta^* \right) \right)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\tau} \text{Kn}^2 \sum_{i=1}^b f_i^{(2)} c_i^2 &= -\text{Kn}^2 \left(\frac{\partial}{\partial t_1^*} \sum_{i=1}^b f_i^{eq} c_i^2 + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\partial}{\partial t_0^*} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_i^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta}{\text{Kn}} \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_{i=1}^b f_i^{(1)} c_{i\gamma} c_i^2 \right) \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{\text{Kn}^2}{\delta} \frac{\partial}{\partial t_1^*} \left(\frac{\rho^* u^{*2}}{2} + \frac{D \rho^* \theta}{2 a_s^2} \right) =} \quad (159c)$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\rho^* \theta (D+2)}{a_s^2} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\theta) \right)}$$

$$\boxed{+ \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} u_\beta^* \left(\frac{\partial}{\partial x_\beta} u_\gamma^* + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} u_\beta^* - \frac{2}{D} \delta_{\gamma\beta} \frac{\partial}{\partial x_\delta} u_\delta^* \right) \right)}.$$

A conservação da massa para uma aproximação de segunda ordem em Knudsen é, portanto,

$$\begin{aligned} \frac{\text{Kn}}{\delta} \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} \right) (\rho^*) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\rho^* u_\gamma^*) &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\rho^*) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\rho^* u_\gamma^*) &= 0, \end{aligned} \quad (160)$$

o balanço da quantidade de movimento,

$$\begin{aligned} \frac{\text{Kn}}{\delta} \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} \right) (\rho^* u_\alpha^*) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\rho^* u_\gamma^* u_\alpha^*) &= -\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \right) + \\ \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} u_\gamma^* + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} u_\alpha^* - \delta_{\gamma\alpha} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_\delta} u_\delta^* \right) \right) & \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\rho^* u_\alpha^*) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\rho^* u_\gamma^* u_\alpha^*) &= -\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \right) + \\ \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} u_\gamma^* + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} u_\alpha^* - \delta_{\gamma\alpha} \frac{2}{D} \frac{\partial}{\partial x_\delta} u_\delta^* \right) \right), & \end{aligned} \quad (161)$$

e a conservação da energia total,

$$\begin{aligned}
& \frac{\text{Kn}}{\delta} \left(\frac{\partial}{\partial t_0^*} + \text{Kn} \frac{\partial}{\partial t_1^*} \right) \left(\frac{\rho^* u^{*2}}{2} + \frac{D \rho^* \theta}{2 a_s^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\frac{\rho^* u^{*2}}{2} u_\gamma^* + \frac{D \rho^* \theta}{2 a_s^2} u_\gamma^* \right) \\
&= - \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\frac{\rho^* \theta}{a_s^2} u_\gamma^* \right) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \frac{(D+2)}{2} \frac{1}{a_s^2} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\theta) \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} u_\beta^* \left(\frac{\partial}{\partial x_\beta} u_\gamma^* + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} u_\beta^* - \frac{2}{D} \delta_{\gamma\beta} \frac{\partial}{\partial x_\delta} u_\delta^* \right) \right) \implies \\
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho^* u^{*2}}{2} + \frac{D \rho^* \theta}{2 a_s^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\frac{\rho^* u^{*2}}{2} u_\gamma^* + \frac{D \rho^* \theta}{2 a_s^2} u_\gamma^* \right) = - \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\frac{\rho^* \theta}{a_s^2} u_\gamma^* \right) \\
& + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} u_\beta^* \left(\frac{\partial}{\partial x_\beta} u_\gamma^* + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} u_\beta^* - \frac{2}{D} \delta_{\gamma\beta} \frac{\partial}{\partial x_\delta} u_\delta^* \right) \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \left(\tau \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right) \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \frac{(D+2)}{2} \frac{1}{a_s^2} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (\theta) \right). \tag{162}
\end{aligned}$$

Nas unidades adimensionais da rede, por comparação com as Equações de Navier-Stokes-Fourier, tem-se para a viscosidade dinâmica e condutividade térmica, respectivamente,

$$\mu^* = \tau \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right), \tag{163a}$$

$$\kappa^* = \tau \frac{\rho^* \theta}{a_s^2} \frac{1}{a_s^2} \frac{(D+2)}{2} \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right). \tag{163b}$$

Reconhecendo que $c_p = \frac{1}{a_s^2} \frac{(D+2)}{2}$, tem-se para a difusividade térmica $\alpha^* = \kappa^* / \rho^* c_p$ e viscosidade cinemática $\nu^* = \mu^* / \rho^*$,

$$\nu^* = \tau \frac{\theta}{a_s^2} \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right), \tag{164a}$$

$$\alpha^* = \tau \frac{\theta}{a_s^2} \left(1 - \frac{\delta}{2\tau} \right). \tag{164b}$$

Novamente, tem-se coeficientes de transporte idênticos para o modelo de colisão BGK. Os erros de discretização introduzidos limitam também os valores possíveis que o tempo de relaxação τ pode assumir, já que valores menores que 1/2 resultariam em valores (não-físicos) de viscosidades negativas. Modelos mais realistas devem ser capazes de lidar com valores distintos para os coeficientes de transporte, e só podem ser alcançados com modelos de colisão mais sofisticados que o BGK. Ressalta-se também que os erros de discretização podem ser diminuídos pelo emprego de ordens mais altas de discretização espacial e temporal. Muitas vezes, contudo, discretizações de alta ordem resultam em modelos numéricos implícitos (MATTILA *et al.*, 2013), geralmente mais custosos de serem resolvidos numericamente.

3 CONDIÇÕES DE CONTORNO

3.1 INTRODUÇÃO

Ao se limitar o domínio de simulação, suposições acerca das características do escoamento nas fronteiras devem ser feitas, sendo essas suposições e as maneiras como são incorporadas chamadas de condições de contorno. Em métodos tradicionais, as condições de contorno se dão pela aplicação direta dos valores desejados das variáveis macroscópicas como a velocidade ou a pressão e/ou de suas derivadas diretamente nos nós ou volumes que formam o contorno do domínio em questão. A forma como condições de contorno são impostas em métodos cinéticos, entretanto, é substancialmente diferente da forma adotada em métodos baseados na teoria do contínuo. Além das diferenças inerentes a cada método de discretização, como Volumes Finitos ou Diferenças Finitas, por exemplo, há nos métodos cinéticos a impossibilidade de se lidar diretamente com as variáveis macroscópicas, que devem ser transpostas, no caso da equação de Boltzmann, em funções de distribuição.

Conforme a simulação evolui, funções de distribuição deixam o domínio, ao passo que outras funções de distribuição, a priori, desconhecidas, adentram o domínio. As condições de contorno em métodos cinéticos são dadas pelas propriedades dessas funções de distribuição desconhecidas que entram no domínio. Não existe, entretanto, um consenso quanto a forma pela qual as funções de distribuição que formam as condições de contorno devam ser determinadas, sendo a adequada imposição dessas funções de distribuição um dos mais importantes e críticos pontos na equação discreta de Boltzmann (JAHANSHALOO *et al.*, 2016). O objetivo deste capítulo é propor uma metodologia para a determinação das funções de distribuição que entram no domínio para quando as fronteiras sejam compostas por barreiras sólidas.

3.2 DEFINIÇÕES

Na equação discreta de Boltzmann baseada no método da colisão-propagação, na etapa de propagação, nas fronteiras do domínio, algumas funções de distribuição são deslocadas para fora do espaço de simulação, ao passo que as direções opostas às que deixam o domínio teriam de vir de pontos externos inexistentes, sendo assim, incógnitas. Essa condição é ilustrada na figura 4, onde a rede D2V37, ilustrada na figura 5, é utilizada como exemplo. Apesar de aqui se estar representando uma fronteira sólida, a ideia é essencialmente a mesma no caso onde as fronteiras são abertas, como em um campo distante ou na imposição de um fluxo de massa, por exemplo.

Pode-se identificar, neste caso, quatro tipos diferentes de pontos na simulação. Os pontos de fronteira, cujas posições são escritas como \vec{x}_b , que são quaisquer pontos que tenham ao menos uma velocidade discreta que, após a etapa de propagação, se encontre fora do domínio. Pontos que se encontrariam fora do domínio, chamados de

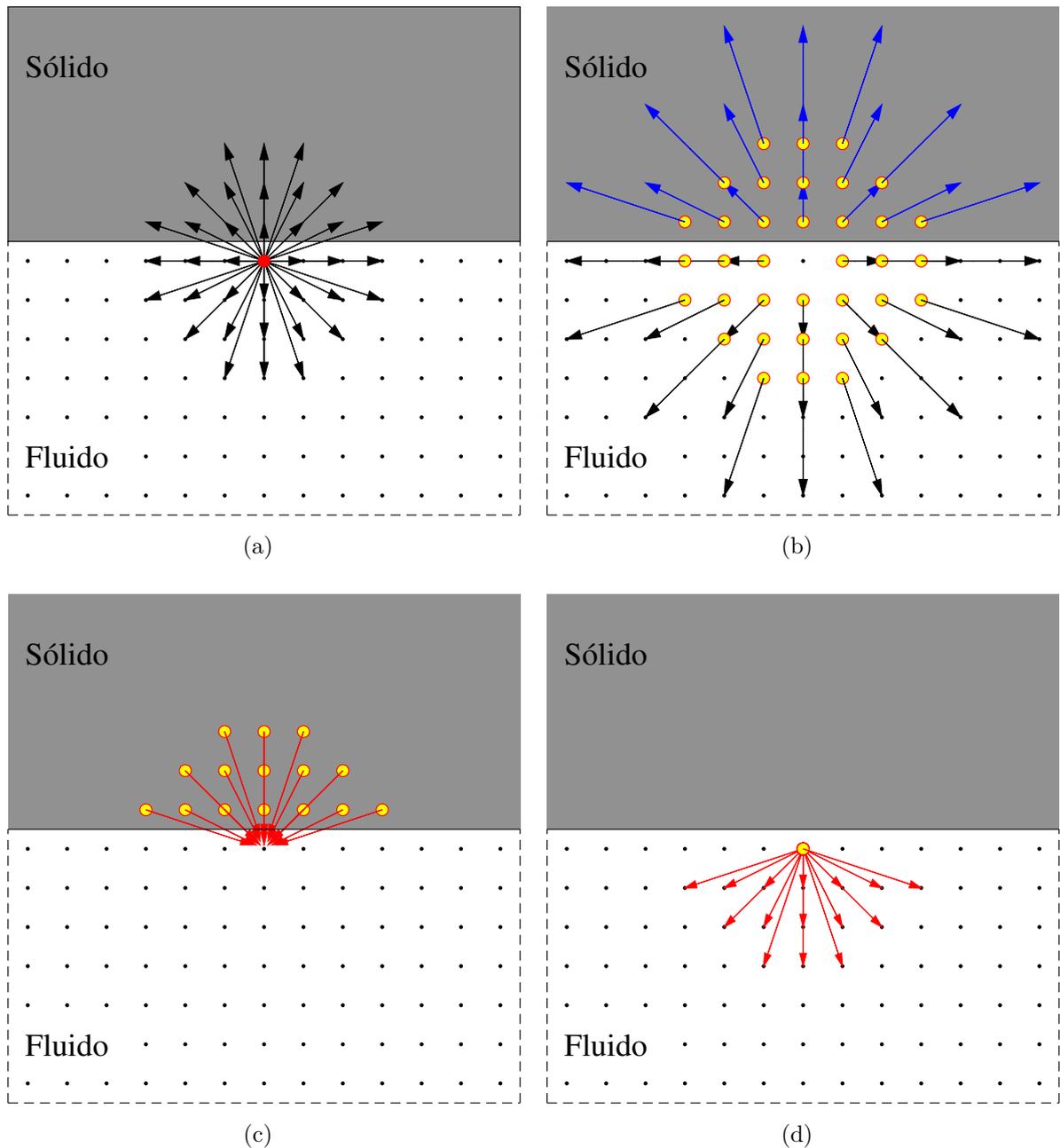


Figura 4 – Diferentes condições antes e após a etapa de propagação. (a) Velocidades discretas em um ponto próximo à parede antes da propagação. (b) Posições ocupadas por essas velocidades após a propagação. Em azul, as velocidades que deixam o domínio. (c) Pontos fora do domínio antes da etapa de propagação de onde viriam as funções de distribuição ocupadas em (d) após a propagação.

pontos fictícios, cujas posições são denominadas \vec{x}_g , pontos onde as funções colidem com a parede, denominados \vec{x}_w e os demais pontos, que são os pontos do fluido, com suas posições denominadas \vec{x}_f . Esses pontos são ilustrados na figura 6, onde a fronteira é composta por uma parede plana alinhada com o eixo x localizada na parte inferior de um espaço bidimensional.

Nos pontos de fronteira \vec{x}_b as funções de distribuição que atingem a parede na etapa

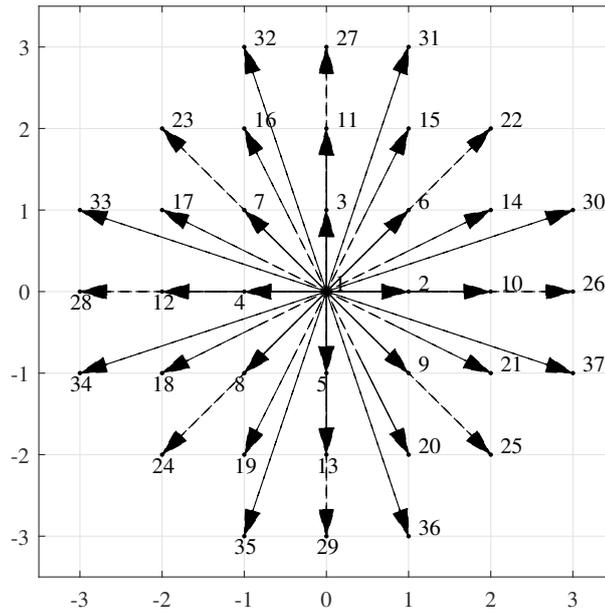


Figura 5 – Conjunto de velocidades discretas D2V37.

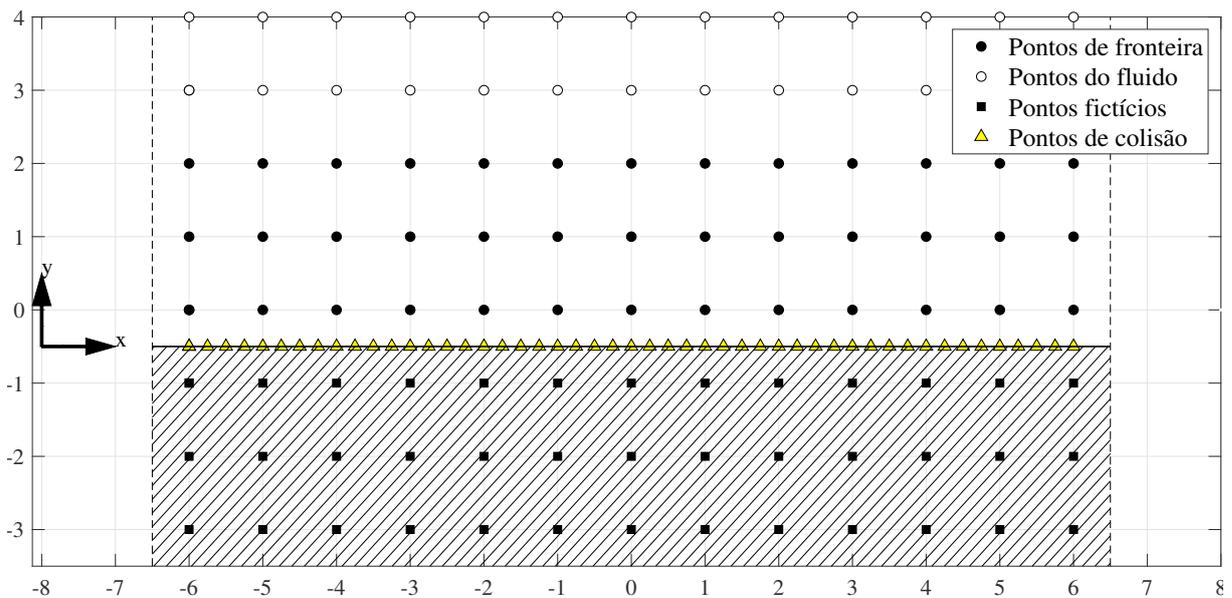


Figura 6 – Diferentes tipos de pontos em um domínio.

de propagação formam um conjunto $\{f_i^{\vec{x}_b, I}\}$, e as funções que viriam de fora do domínio e atingiriam esses pontos formam um conjunto $\{f_i^{\vec{x}_b, O}\}$. Esses conjuntos dependem da rede utilizada e da distância do ponto de fronteira à parede, como indicado na figura 7 para o caso da rede D2V37. Para o ponto de fronteira $\vec{x}_b = (0, 0)$, ilustrado na figura 7(a), os conjuntos de funções de distribuição

$$f_i^{(0,0), I} = \{f_5, f_8, f_9, f_{13}, f_{18}, f_{19}, f_{20}, f_{21}, f_{24}, f_{25}, f_{29}, f_{34}, f_{35}, f_{36}, f_{37}\}, \quad (165a)$$

$$f_i^{(0,0),O} = \{f_3, f_6, f_7, f_{11}, f_{14}, f_{15}, f_{16}, f_{17}, f_{22}, f_{23}, f_{27}, f_{30}, f_{31}, f_{32}, f_{33}\}, \quad (165b)$$

são identificados. Da mesma forma, para o ponto $\vec{x}_b = (0, 1)$ (figura 7(b)) tem-se os conjuntos

$$f_i^{(0,1),I} = \{f_{13}, f_{19}, f_{20}, f_{24}, f_{25}, f_{29}, f_{35}, f_{36}\}, \quad (166a)$$

$$f_i^{(0,1),O} = \{f_{11}, f_{15}, f_{16}, f_{22}, f_{23}, f_{27}, f_{31}, f_{32}\}, \quad (166b)$$

e para o ponto $\vec{x}_b = (0, 2)$ (figura 7(c)) os conjuntos

$$f_i^{(0,2),I} = \{f_{29}, f_{35}, f_{36}\}, \quad (167a)$$

$$f_i^{(0,2),O} = \{f_{27}, f_{31}, f_{32}\}. \quad (167b)$$

O objetivo de qualquer condição de contorno é determinar as funções de distribuição contidas no conjunto $\{f_i^{\vec{x}_b}, O\}$, que são incógnitas, com base nas funções de distribuição do conjunto $\{f_i^{\vec{x}_b}, I\}$, que deixam o domínio, e nas condições de velocidade \vec{u}_w e temperatura T_w da parede.

As razões pelas quais se utilizou como exemplo uma rede com tantas velocidades são duas. Primeiro, esta rede garante uma aproximação de quarta ordem à equação contínua de Boltzmann, necessária para se obter regimes hidrodinâmicos compressíveis e com troca térmica. Segundo, para ilustrar como os modelos de alta ordem diferem substancialmente dos modelos de ordens mais baixas. Se utilizar-se a rede de segunda ordem D2Q9, por exemplo, teria-se a situação indicada na figura 8, onde nota-se que o número de funções de distribuição incógnitas é apenas 3. A quantidade baixa de incógnitas é um dos motivos pelo qual a grande maioria dos trabalhos sobre condições de contorno lidam com redes de baixa ordem. Os modelos desenvolvidos com redes de baixa ordem, contudo, nem sempre podem ser estendidos para redes arbitrárias com qualquer número de velocidades, sendo que a limitação na disponibilidade de condições de contorno aplicáveis a modelos com um alto número de velocidades discretas acaba restringindo o uso de modelos de alta ordem e, conseqüentemente, a simulação de regimes hidrodinâmicos mais complexos.

3.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO *BOUNCE-BACK* E ESPECULAR

Existem várias condições de contorno comumente utilizadas para representar fronteiras sólidas na equação discreta de Boltzmann, como a condição de contorno *Bounce-Back* de Não Equilíbrio (BBNE) (ZOU; HE, 1997) e a Extrapolação de Não Equilíbrio (ENE) (CHEN; MARTÍNEZ; MEI, 1996) que são, de certa forma, derivadas da condição de contorno do tipo *Bounce-Back* (BB) (ZIEGLER, 1993). A condição do tipo *bounce-back*,

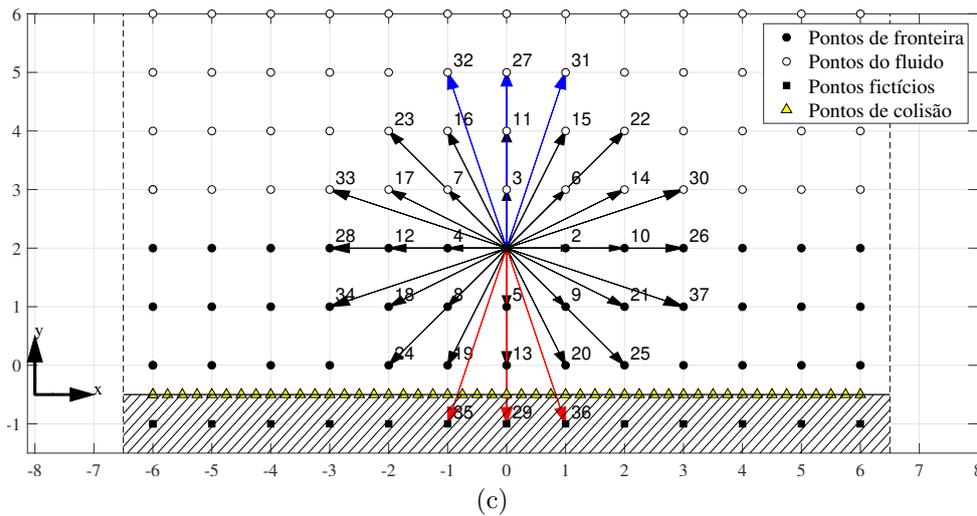
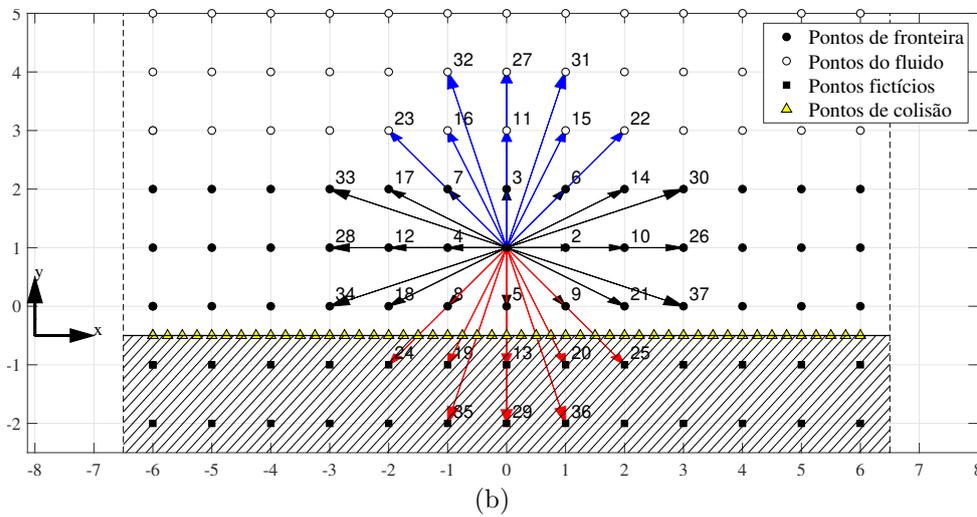
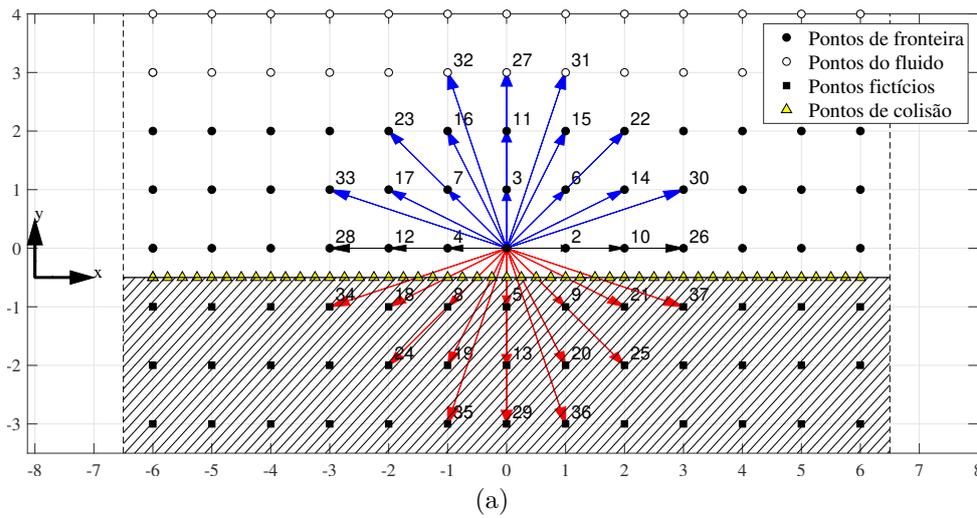


Figura 7 – Diferentes conjuntos de funções de distribuição de acordo com a distância do ponto de fronteira à parede. (a) $\vec{x}_b = (0, 0)$, (b) $\vec{x}_b = (0, 1)$ e (c) $\vec{x}_b = (0, 2)$. Em vermelho, as funções que atingem as parede, e em azul, as funções incógnitas.

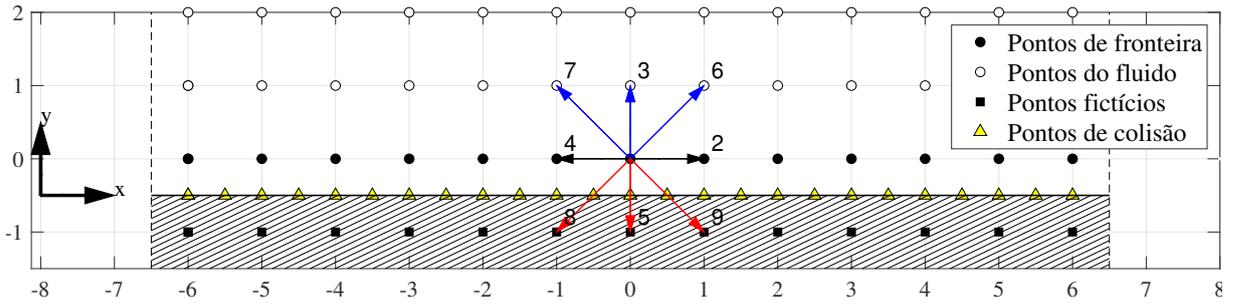
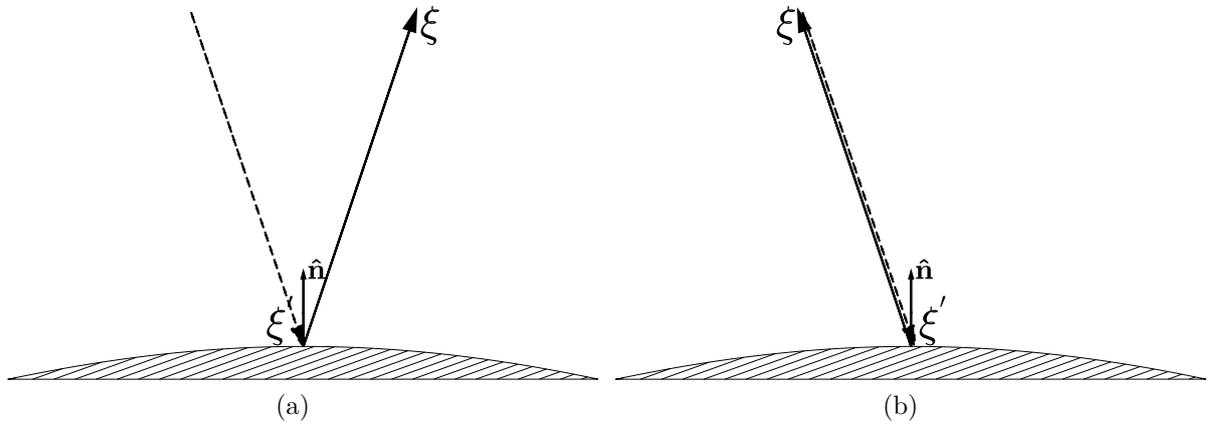


Figura 8 – Exemplo com o D2Q9.


 Figura 9 – Condições de contorno do tipo (a) especular e (b) *bounce-back*. $\vec{\xi}'$ é a velocidade antes da colisão e $\vec{\xi}$ é a velocidade após a colisão.

juntamente com a condição de contorno especular, constituem os modelos mais simples e fundamentais no método. Ambas as condições baseiam-se na ideia de simplesmente refletir de volta ao domínio quaisquer funções de distribuição que atinjam as paredes. Ambas as condições são indicadas na figura 9.

Matematicamente, se $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ é o número esperado de partículas com velocidade $\vec{\xi}$ no ponto \vec{x} , e \mathbf{R} é um domínio com fronteira $\partial\mathbf{R}$, para a condição de contorno especular tem-se que,

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = f(\vec{x}, \vec{\xi} - 2\hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\xi}'), t); (\vec{x} \in \partial\mathbf{R}, \vec{\xi}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0), \quad (168)$$

indicando que um conjunto de partículas que atinge a parede com velocidade $\vec{\xi}'$ é refletido de forma especular com velocidade $\vec{\xi}$ e, para a condição de contorno do tipo *bounce-back*, tem-se

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = f(\vec{x}, -\vec{\xi}', t); (\vec{x} \in \partial\mathbf{R}, \vec{\xi}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0), \quad (169)$$

indicando que um conjunto de partículas que atinge a parede com velocidade $\vec{\xi}'$ é refletida com velocidade $\vec{\xi} = -\vec{\xi}'$.

A condição de contorno do tipo *bounce back* é bastante utilizada por ser facilmente implementada e por ter como efeito prático a existência de uma parede fixa localizada exatamente entre dois pontos consecutivos da rede (CORNUBERT; D'HUMIÈRES; LEVERMORE, 1991). As funções de distribuição incógnitas dependem somente das funções de distribuição conhecidas que atingem as parede, ou seja, o conjunto $\{f_i^{\vec{x}_b, O}\}$ depende somente do conjunto $\{f_i^{\vec{x}_b, I}\}$. As variações da condição de contorno do tipo *bounce back*, como a BBNE (ZOU; HE, 1997) e a ENE (CHEN; MARTÍNEZ; MEI, 1996), por exemplo, buscam ampliar a limitação de que a parede seja estacionária, permitindo se impor uma velocidade à superfície. A BBNE, contudo, faz uso de um sistema de equações que não pode ser generalizado para qualquer número de incógnitas e a ENE, por sua vez, utiliza-se de extrapolações que afetam a estabilidade da simulação.

A maior imprecisão dessas condições de contorno, entretanto, não é estabilidade ou a impossibilidade de se trabalhar com um grande número de incógnitas e sim, a hipótese de que um conjunto de partículas com uma dada velocidade possui uma única e bem definida direção de saída que se conhece com certeza. Como em muitos casos a representação de fronteiras sólidas como sendo paredes fixas junto das quais a velocidade é nula e não há troca de calor é uma aproximação válida, a condição de contorno do tipo “*bounce-back*” é ainda amplamente empregada em modelos de baixa ordem que visam a simulação de escoamentos isotérmicos.

A razão pela qual essas condições de contorno extremamente simplificadas e pouco realistas ainda serem empregadas é a imensa dificuldade de se representar corretamente e de forma fidedigna a complexa interação entre um fluido e uma superfície sólida. A real interação depende de inúmeros fatores como o grau de afinidade química entre o fluido e a superfície, do grau de adsorção, da temperatura da superfície e da rugosidade, por exemplo. O conhecimento e representação de todos esses fatores, entretanto, é impraticável seja teórica ou experimentalmente. As condições de contorno são então idealizações das reais interações possíveis e, do ponto de vista da teoria cinética, o que se deseja determinar com as condições de contorno é o núcleo de espalhamento

$$R\left(\vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi}; \vec{x}, t; \tau | \vec{x} \in \partial\mathbf{R}; \vec{\xi}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0; \vec{\xi} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0\right), \quad (170)$$

que é a probabilidade de uma partícula com velocidade $\vec{\xi}'$ atingir o ponto \vec{x} e ser refletida no mesmo ponto com velocidade $\vec{\xi}$ após o tempo τ (tempo que a partícula fica em contato com a parede), de acordo com as condições de temperatura e velocidade dessa parede (CERCIGNANI, Carlo, 1988). Dessa forma, o valor final da função $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ é dado pela soma da contribuição de todas as possíveis velocidades $\vec{\xi}'$ serem refletidas com velocidade

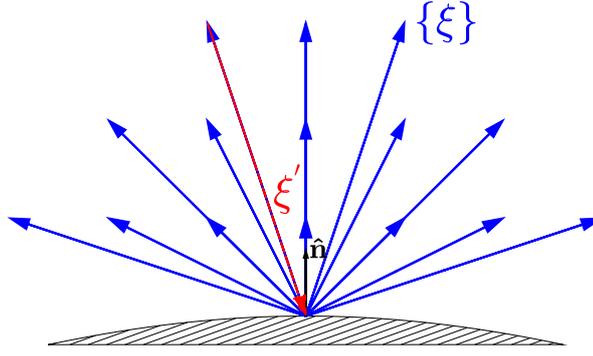


Figura 10 – Condição de contorno difusa.

 $\vec{\xi},$

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \int_0^\infty d\tau \int_{\vec{\xi}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} R(\vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi}; \vec{x}, t; \tau) f(\vec{\xi}', \vec{x}, t - \tau); \quad (171)$$

$$(\vec{x} \in \partial\mathbf{R}, \vec{\xi} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0).$$

3.4 CONDIÇÃO DE CONTORNO DIFUSA

Uma forma idealizada para a determinação do núcleo de dispersão R é adotada na condição de contorno difusa de Maxwell (MAXWELL, 1879), que assume que o tempo de interação entre as partículas e a parede τ é muito pequeno, de modo que possa ser desprezado, e que as funções que atingem a parede perdem qualquer informação anterior ao impacto, a não ser o número de partículas. O núcleo de dispersão é então determinado considerando que as funções são refletidas parte de forma especular e parte de acordo com a função de distribuição de Maxwell-Boltzmann à temperatura T_w e velocidade \vec{u}_w da parede,

$$R(\vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi}; \vec{x}, t) =$$

$$(1 - \alpha) \delta(\vec{\xi} - \vec{\xi}' + 2\hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\xi}')) + \alpha \frac{f^{eq}(\vec{\xi}, \vec{u}_w, T_w)}{\int_{\vec{\xi} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0} f^{eq}(\vec{\xi}, \vec{u}_w, T_w)}, \quad (172)$$

onde α é chamado de coeficiente de acomodação. Com $\alpha = 0$ tem-se uma reflexão totalmente especular, e com $\alpha = 1$ uma reflexão totalmente difusiva, como ilustrado esquematicamente na figura 10.

No âmbito de modelos com velocidades discretas, esse tipo de condição de contorno aparece em 1977 no trabalho de Gatignol (GATIGNOL, R., 1977), que pode ser adaptado

para a equação discreta de Boltzmann definindo o núcleo de dispersão discreto como

$$R\left(\vec{e}'_i \rightarrow \vec{e}_i; \vec{x}, t\right) = \frac{g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w)}{\sum_{\vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0} g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w)}, \quad (173)$$

onde $g_i^{eq} = f_i^{eq}/\rho$. A condição de contorno é dada pela função de distribuição resultante da soma da contribuição de todas as velocidades com direções \vec{e}'_i que atingem a parede no ponto \vec{x} no instante t

$$f(\vec{e}_i, \vec{x}, t) = \frac{g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w)}{\sum_{\vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0} g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w)} \sum_{\vec{e}'_i \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} f(\vec{e}'_i, \vec{x}, t); \quad (174)$$

$$\left(\vec{x} \in \partial\mathbf{R}, \vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0, \vec{e}'_i \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0\right).$$

Este tipo de condição de contorno é chamada de condição de contorno cinética, ou difusa. As dificuldades na sua implementação na equação discreta de Boltzmann surgem do fato de que, primeiramente, modelos de alta ordem possuem velocidades que percorrem mais de um espaçamento de distância por iteração na etapa de propagação, de sorte que o conjunto $\{\vec{e}'_i\}$ de velocidades que atingem as superfícies variam de acordo com a distância do ponto à parede, como indicado na figura 7. Segundo, e mais importante, porque as posições finais que as partículas ocupariam após a colisão no ponto \vec{x}_w nem sempre correspondem a um ponto da rede.

Se consideramos que a interação com as paredes ocorrem durante a etapa de propagação, é sensato admitir que cada direção atingirá a parede em um instante de tempo diferente entre t e $t + \delta t$. Denominando esse intervalo de tempo por τ_{in} , e considerando que o tempo em que a partícula fica em contato com a parede é muito menor que δt , pode-se determinar o tempo restante após a colisão como sendo $\tau_{out} = \delta t - \tau_{in}$. Se $\hat{\mathbf{n}}$ for o vetor normal à parede, o grupo de velocidades $\{\vec{e}_i\}$ que serão refletidas de volta ao domínio pode ser determinado por $\{\vec{e}_i | \vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0\}$, e a posição final da partícula seria, portanto, dada por $\vec{x}_b = \vec{x}_{b_0} + (\tau_{in}/\delta t) \vec{e}'_i + (\tau_{out}/\delta t) \{\vec{e}_i\}$, sendo \vec{e}'_i a direção que deu origem à colisão e \vec{x}_{b_0} o ponto ocupado inicialmente pela função de distribuição. Essa condição é ilustrada na figura 11, onde a parede foi posicionada a meio espaçamento de distância dos nós mais próximos (conhecida como implementação “*half-way*”). São destacadas na figura como nem todas as posições finais das velocidades são pontos da rede.

Para contornar essas dificuldades, diferentes abordagens podem ser encontradas. Em geral, conta-se com o auxílio de pontos fictícios nas paredes. Os pontos fictícios servem de “*buffers*” para as funções de distribuição que serão refletidas de volta ao domínio. Uma vez que se conhecem a temperatura e a velocidade da parede, as funções de distribuição refletidas seriam totalmente determinadas pela estimativa da densidade em cada ponto fictício. Uma extrapolação de segunda ordem segundo cada direção característica (SOFONEA; SEKERKA, 2005) ou uma propagação em dois passos (MENG; ZHANG, 2014)

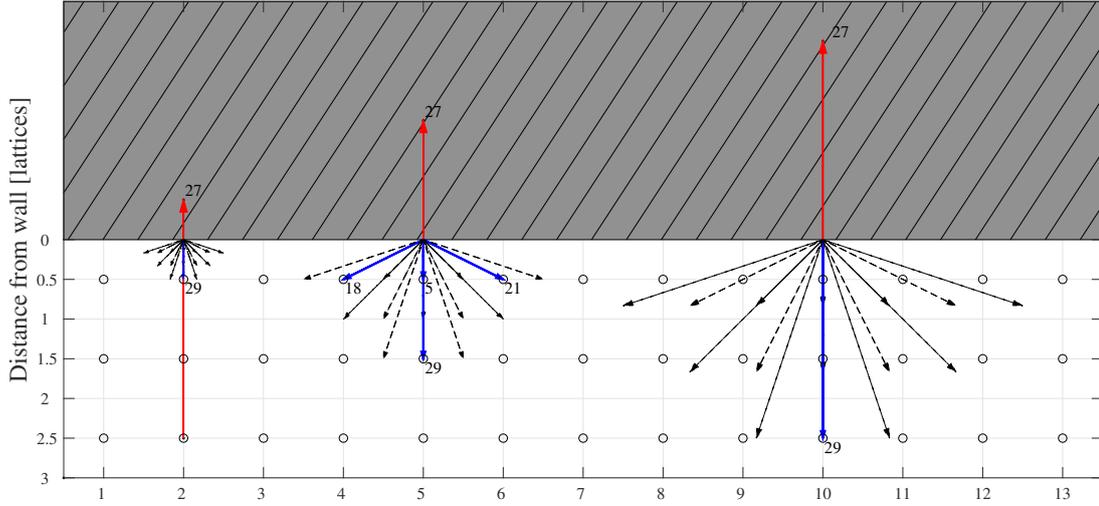


Figura 11 – Velocidades refletidas de acordo com a distância até a parede. Vermelho: Velocidade incidente; Preto: Velocidades refletidas; Azul: Velocidades refletidas cuja posição final é um ponto da rede.

podem ser utilizadas para esse fim. Propõe-se neste trabalho uma alternativa aos métodos anteriores: a adição da restrição ao conjunto de velocidades refletidas de que nesses conjuntos somente constem velocidades cuja posição final seja também um ponto da rede.

Novamente, se \vec{x}_{b_0} é um ponto da rede e \vec{e}'_i é uma direção nesse ponto que atinge a parede ($\vec{e}'_i \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0$), pode-se determinar a distância d desse ponto à parede segundo a direção \vec{e}'_i . A função $f(\vec{e}'_i, \vec{x}_{b_0}, t)$ atinge a parede no ponto $\vec{x}_w = \vec{x}_{b_0} + \frac{d}{|\vec{e}'_i|} \vec{e}'_i$, sendo $d/|\vec{e}'_i|$ a fração de tempo (em uma iteração) que a função de distribuição leva para atingir esse ponto. Na condição de contorno cinética como descrita anteriormente, todas as direções \vec{e}_i com $\vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0$ seriam refletidas de volta. A ideia agora é restringir esse grupo somente às direções em que $\vec{x}_b = \vec{x}_w + \left(1 - \frac{d}{|\vec{e}'_i|}\right) \vec{e}_i$ seja também um ponto da rede, sendo $\left(1 - \frac{d}{|\vec{e}'_i|}\right)$ a fração de tempo restante na iteração. As funções que emergem do ponto \vec{x}_w são a soma de todas as funções que atingem esse ponto no instante t

$$f(\vec{e}_i, \vec{x}_w, t) = \frac{g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w)}{\sum_{\vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0; \vec{x}_f \in \text{lat}} g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w)} \sum_{\vec{e}'_i \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} f(\vec{e}'_i, \vec{x}_w, t); \quad (175)$$

$$\left(\vec{x}_w \in \partial \mathbf{R}, \vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0, \vec{e}'_i \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0, \vec{x}_b \in \text{lattice}\right),$$

sabe-se então a posição final \vec{x}_b na rede e a direção \vec{e}_i , ou seja, conhece-se $f(\vec{e}_i, \vec{x}_b, t + \delta t) \equiv f_i^{\vec{x}_b, O}(t + \delta t)$, que a incógnita que se busca suprir com a condição de contorno.

Para ilustrar a afirmação acima, nas figuras 12 a 27 são indicadas, em vermelho, todas as funções de distribuição que atingem um ponto \vec{x}_w num mesmo instante de tempo e, em azul, as funções que após percorrerem o domínio pelo tempo restante atingiriam um

ponto da rede. Ou seja, o conjunto $\left\{ \sum_{\vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} f(\vec{e}_i, \vec{x}_w, t) \right\}$ na equação (175) é dado pelas funções de distribuição indicadas em azul e o conjunto $\left\{ \sum_{\vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0; \vec{x}_f \in \text{lat}} g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w) \right\}$ pelas funções de distribuição indicadas em vermelho. As figuras são, portanto, representações gráficas da equação (175) para cada incógnita, equações essas escritas explicitamente nas equações (176) a (201).

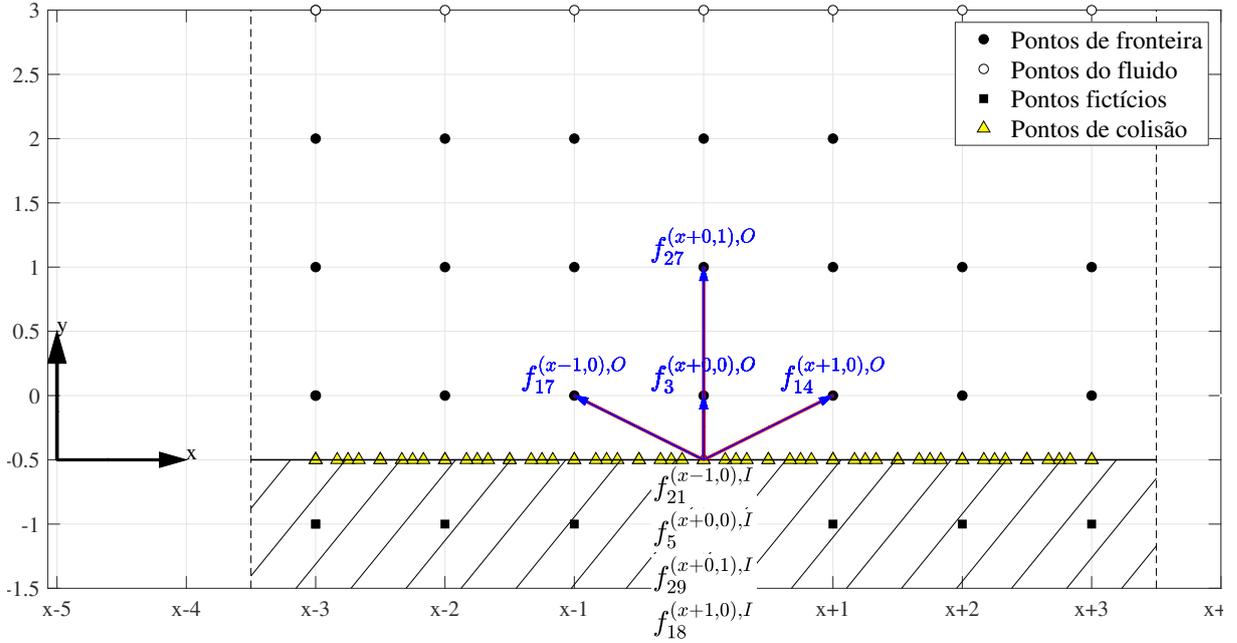


Figura 12 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_3^{(x,0),O}$, $f_{14}^{(x,0),O}$, $f_{17}^{(x,0),O}$ e $f_{27}^{(x,1),O}$.

$$f_3^{(x,0),O} = \frac{g_3^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_3^{(eq)} + g_{14}^{(eq)} + g_{17}^{(eq)} + g_{27}^{(eq)}} \times (f_5^{(x,0),I} + f_{18}^{(x+1,0),I} + f_{21}^{(x-1,0),I} + f_{29}^{(x,1),I}), \quad (176)$$

$$f_{14}^{(x,0),O} = \frac{g_{14}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_3^{(eq)} + g_{14}^{(eq)} + g_{17}^{(eq)} + g_{27}^{(eq)}} \times (f_5^{(x-1,0),I} + f_{18}^{(x,0),I} + f_{21}^{(x-2,0),I} + f_{29}^{(x-1,1),I}), \quad (177)$$

$$f_{17}^{(x,0),O} = \frac{g_{17}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_3^{(eq)} + g_{14}^{(eq)} + g_{17}^{(eq)} + g_{27}^{(eq)}} \times (f_5^{(x+1,0),I} + f_{18}^{(x+2,0),I} + f_{21}^{(x,0),I} + f_{29}^{(x+1,1),I}), \quad (178)$$

$$f_{27}^{(x,1),O} = \frac{g_{27}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_3^{(eq)} + g_{14}^{(eq)} + g_{17}^{(eq)} + g_{27}^{(eq)}} \times (f_5^{(x,0),I} + f_{18}^{(x+1,0),I} + f_{21}^{(x-1,0),I} + f_{29}^{(x,1),I}). \quad (179)$$

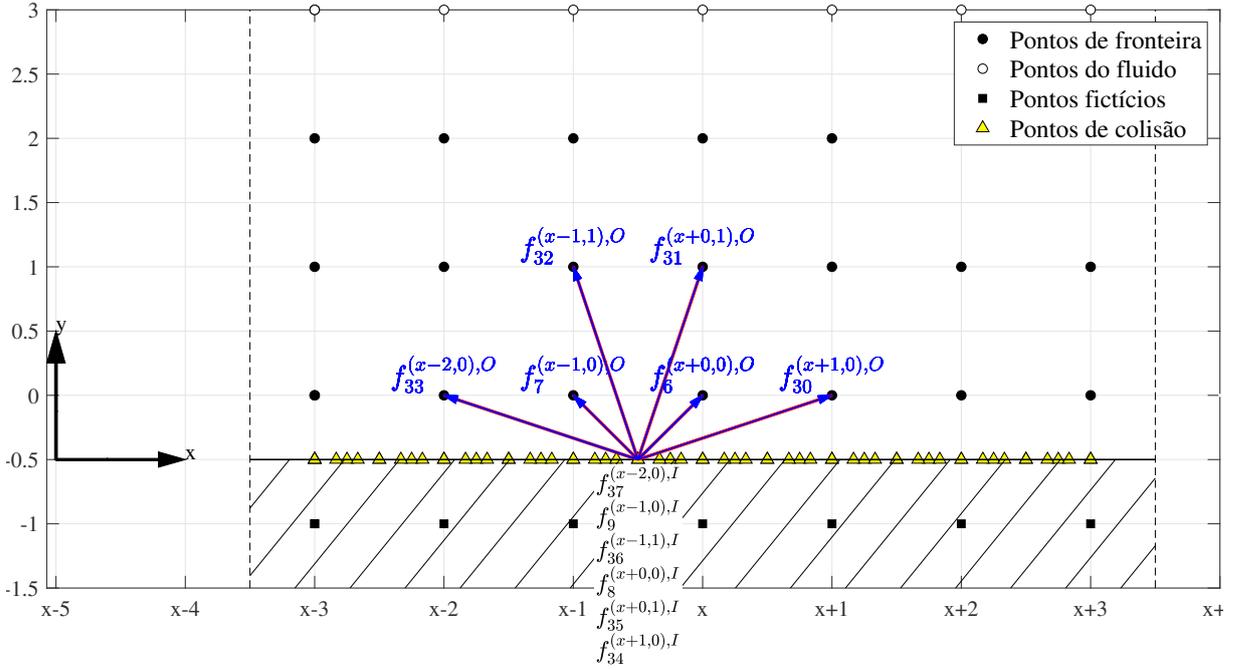


Figura 13 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_6^{(x,0),O}$, $f_7^{(x,0),O}$, $f_{30}^{(x,0),O}$, $f_{31}^{(x,1),O}$, $f_{33}^{(x,1),O}$ e $f_{33}^{(x,0),O}$.

$$f_6^{(x,0),O} = \frac{g_6^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_7^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{32}^{(eq)} + g_{33}^{(eq)}} \times (f_8^{(x,0),I} + f_9^{(x-1,0),I} + f_{34}^{(x+1,0),I} + f_{35}^{(x,1),I} + f_{36}^{(x-1,1),I} + f_{37}^{(x-2,0),I}), \quad (180)$$

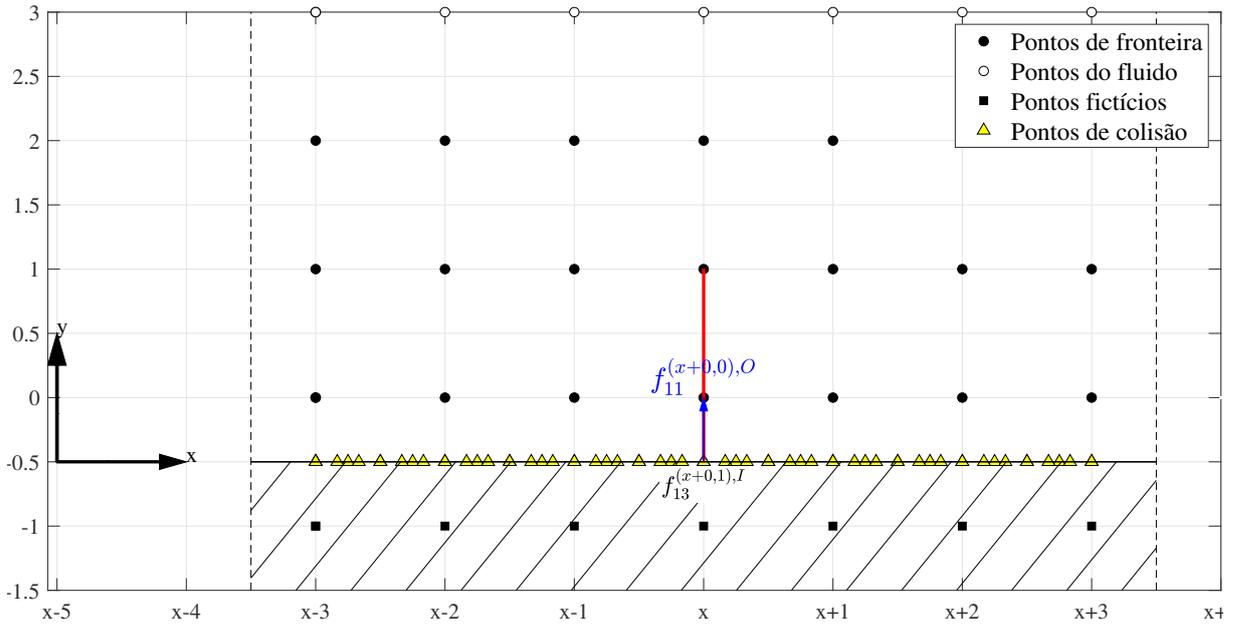
$$f_7^{(x,0),O} = \frac{g_7^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_7^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{32}^{(eq)} + g_{33}^{(eq)}} \times (f_8^{(x+1,0),I} + f_9^{(x,0),I} + f_{34}^{(x+2,0),I} + f_{35}^{(x+1,1),I} + f_{36}^{(x,1),I} + f_{37}^{(x-1,0),I}), \quad (181)$$

$$f_{30}^{(x,0),O} = \frac{g_{30}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_7^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{32}^{(eq)} + g_{33}^{(eq)}} \times (f_8^{(x-1,0),I} + f_9^{(x-2,0),I} + f_{34}^{(x,0),I} + f_{35}^{(x-1,1),I} + f_{36}^{(x-2,1),I} + f_{37}^{(x-3,0),I}), \quad (182)$$

$$f_{31}^{(x,1),O} = \frac{g_{31}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_7^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{32}^{(eq)} + g_{33}^{(eq)}} \times (f_8^{(x,0),I} + f_9^{(x-1,0),I} + f_{34}^{(x+1,0),I} + f_{35}^{(x,1),I} + f_{36}^{(x-1,1),I} + f_{37}^{(x-2,0),I}), \quad (183)$$

$$f_{32}^{(x,1),O} = \frac{g_{32}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_7^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{32}^{(eq)} + g_{33}^{(eq)}} \times (f_8^{(x+1,0),I} + f_9^{(x,0),I} + f_{34}^{(x+2,0),I} + f_{35}^{(x+1,1),I} + f_{36}^{(x,1),I} + f_{37}^{(x-1,0),I}), \quad (184)$$

$$f_{33}^{(x,0),O} = \frac{g_{33}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_7^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{32}^{(eq)} + g_{33}^{(eq)}} \times (f_8^{(x+2,0),I} + f_9^{(x+1,0),I} + f_{34}^{(x+3,0),I} + f_{35}^{(x+2,1),I} + f_{36}^{(x+1,1),I} + f_{37}^{(x,0),I}). \quad (185)$$


 Figura 14 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{11}^{(0,0),O}$.

$$f_{11}^{(x,0),O} = f_{13}^{(x,1),I}. \quad (186)$$

$$f_{15}^{(x,0),O} = f_{20}^{(x-1,1),I}. \quad (187)$$

$$f_{16}^{(x,0),O} = f_{19}^{(x+1,1),I}. \quad (188)$$

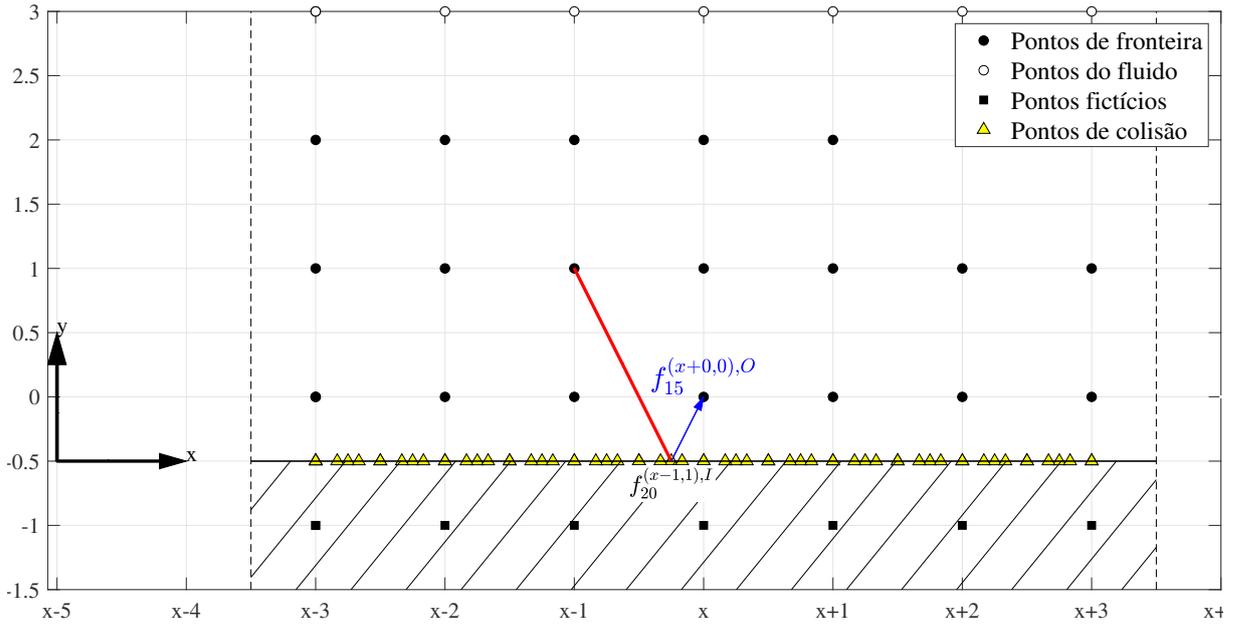


Figura 15 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{15}^{(0,0),O}$.

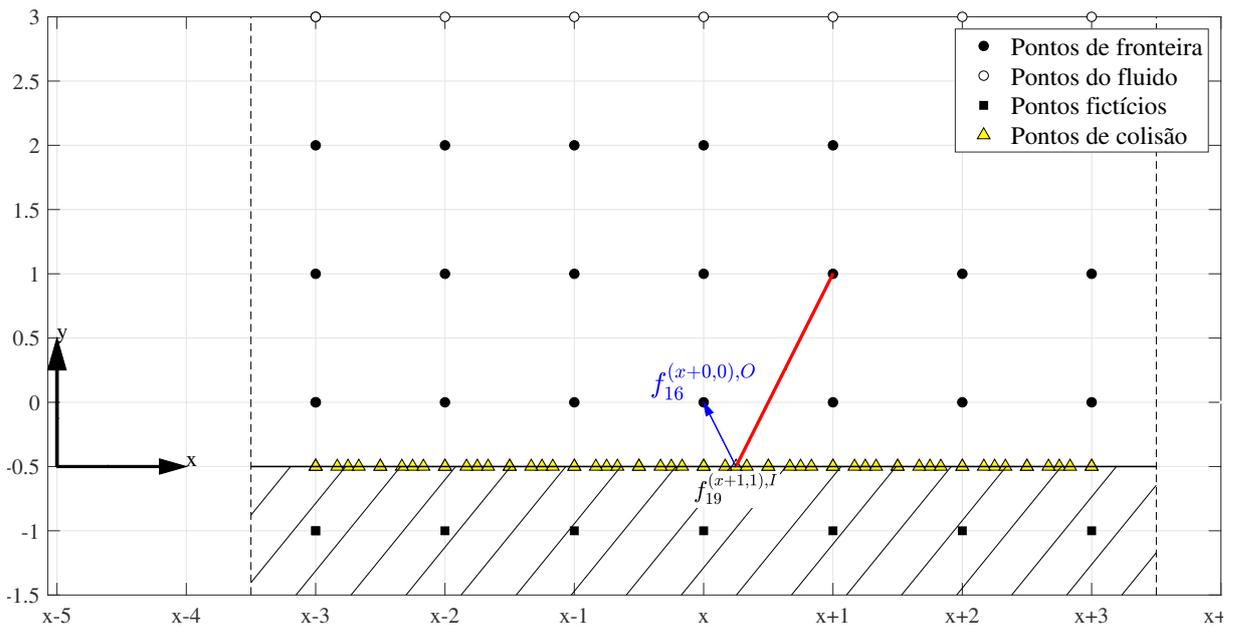


Figura 16 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{16}^{(0,0),O}$.

$$f_{22}^{(x,0),O} = \frac{g_{22}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_{22}^{(eq)} + g_{23}^{(eq)}} \left(f_{24}^{(x+1,1),I} + f_{25}^{(x-2,1),I} \right), \quad (189)$$

$$f_{23}^{(x,0),O} = \frac{g_{23}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_{22}^{(eq)} + g_{23}^{(eq)}} \left(f_{24}^{(x+2,1),I} + f_{25}^{(x-1,1),I} \right). \quad (190)$$

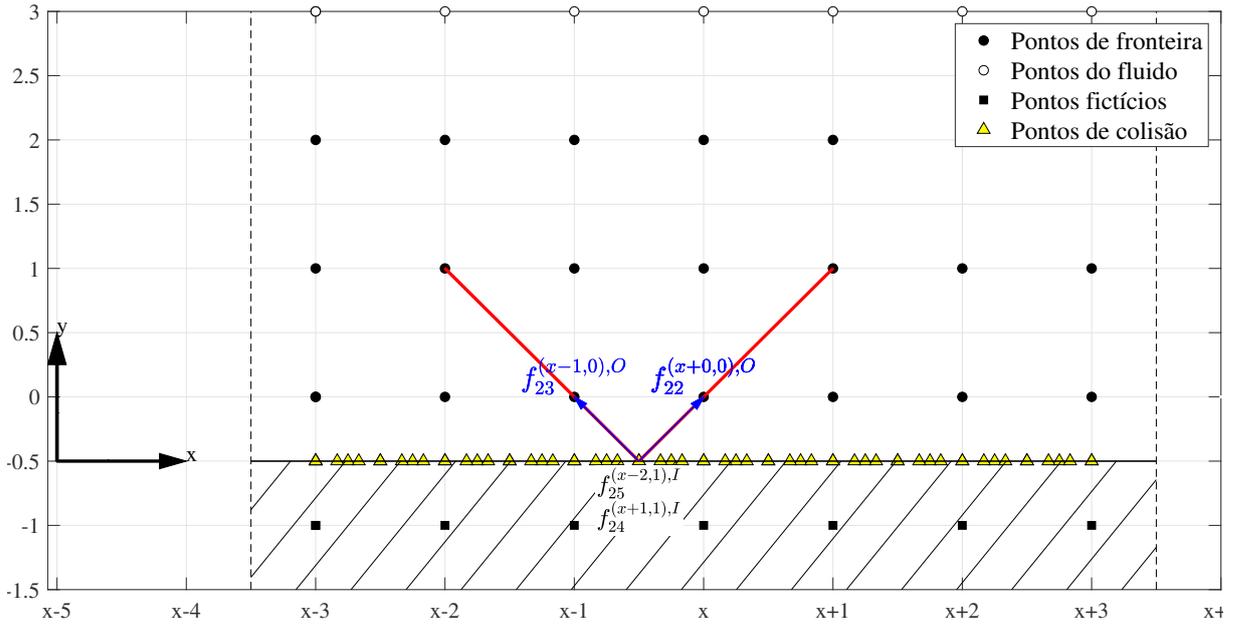


Figura 17 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{22}^{(0,0),O}$ e $f_{23}^{(0,0),O}$.

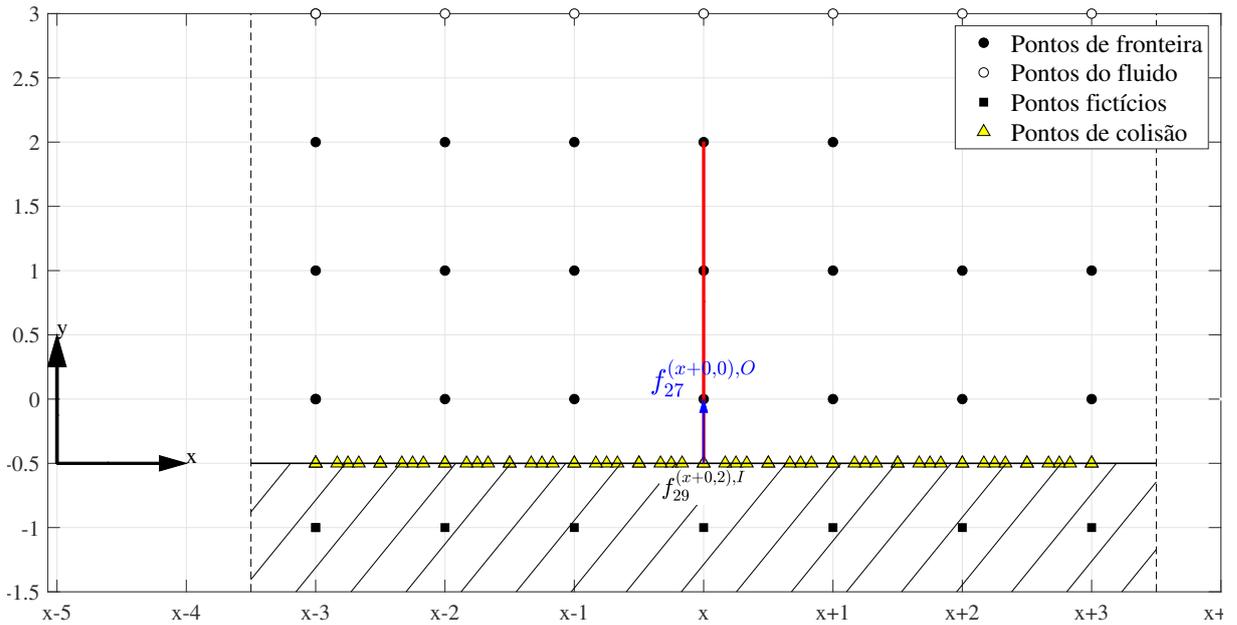


Figura 18 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{27}^{(0,0),O}$.

$$f_{27}^{(x,0),O} = f_{29}^{(x,2),I}. \quad (191)$$

$$f_{31}^{(x,0),O} = f_{36}^{(x-1,2),I}. \quad (192)$$

$$f_{32}^{(x,0),O} = f_{35}^{(x+1,2),I}. \quad (193)$$

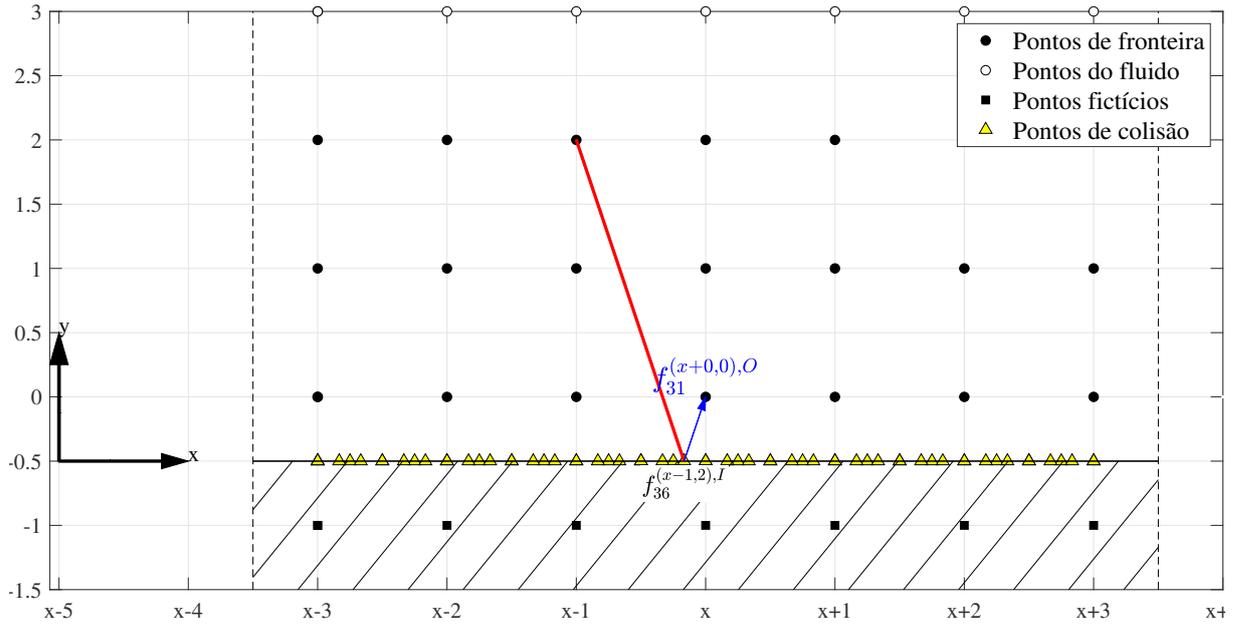


Figura 19 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{31}^{(0,0),O}$.

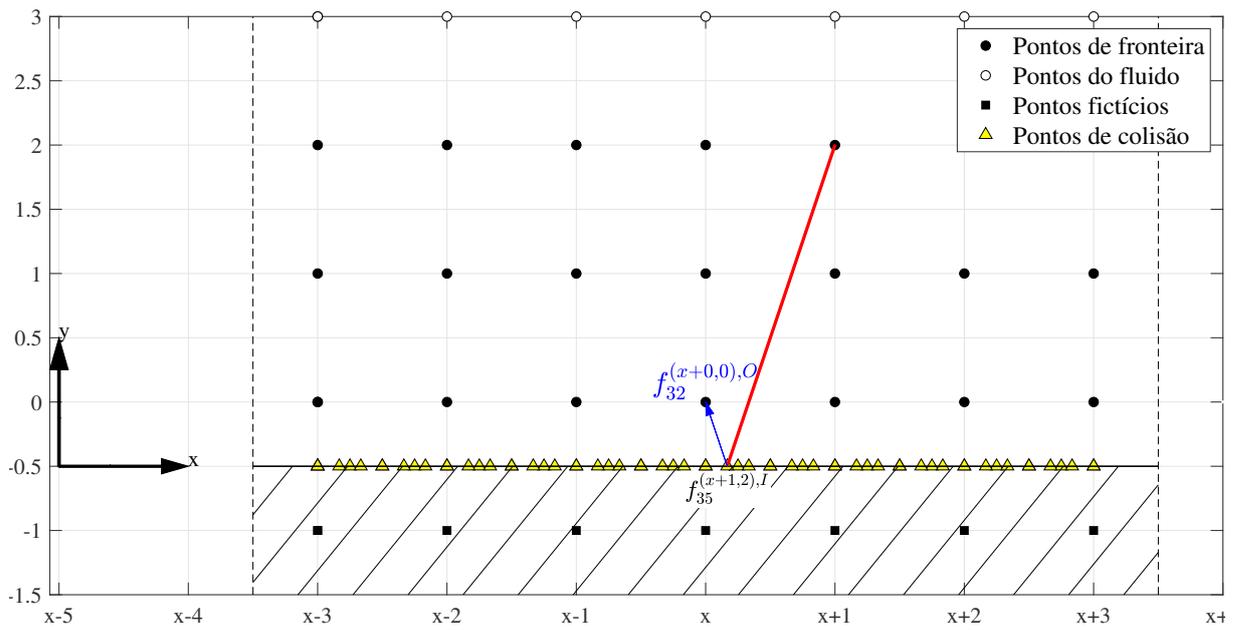


Figura 20 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{32}^{(0,0),O}$.

$$f_{11}^{(x,1),O} = f_{13}^{(x,0),I}. \quad (194)$$

$$f_{15}^{(x,1),O} = f_{20}^{(x-1,0),I}. \quad (195)$$

$$f_{16}^{(x,1),O} = f_{19}^{(x+1,0),I}. \quad (196)$$

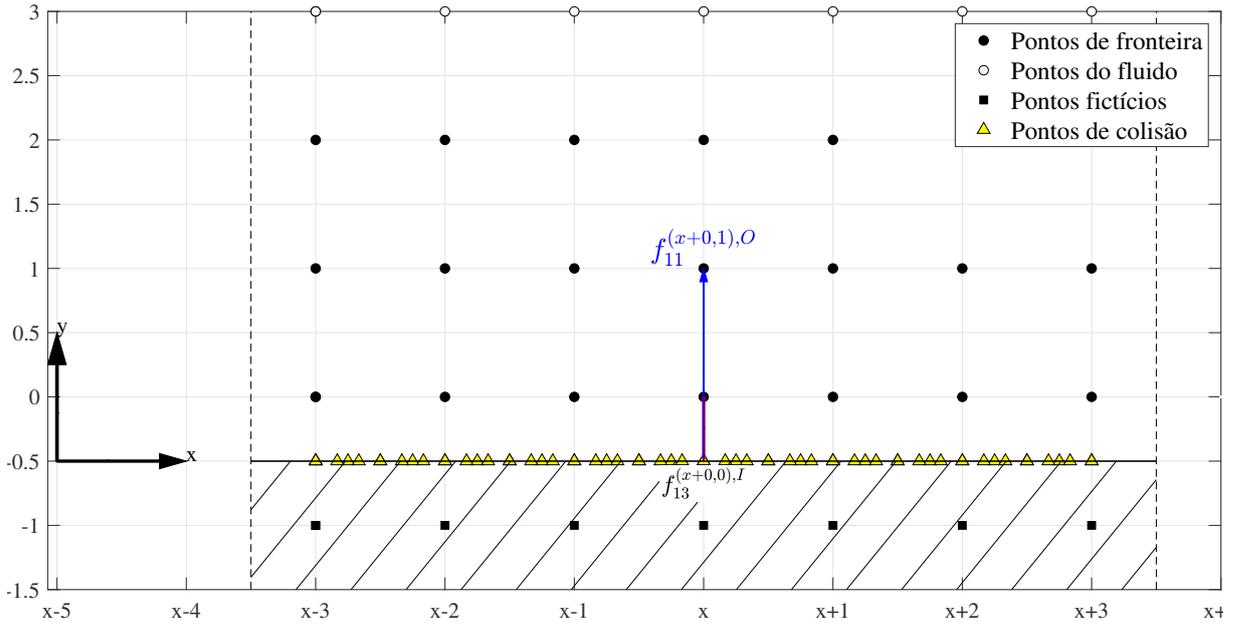


Figura 21 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{11}^{(0,1),O}$.

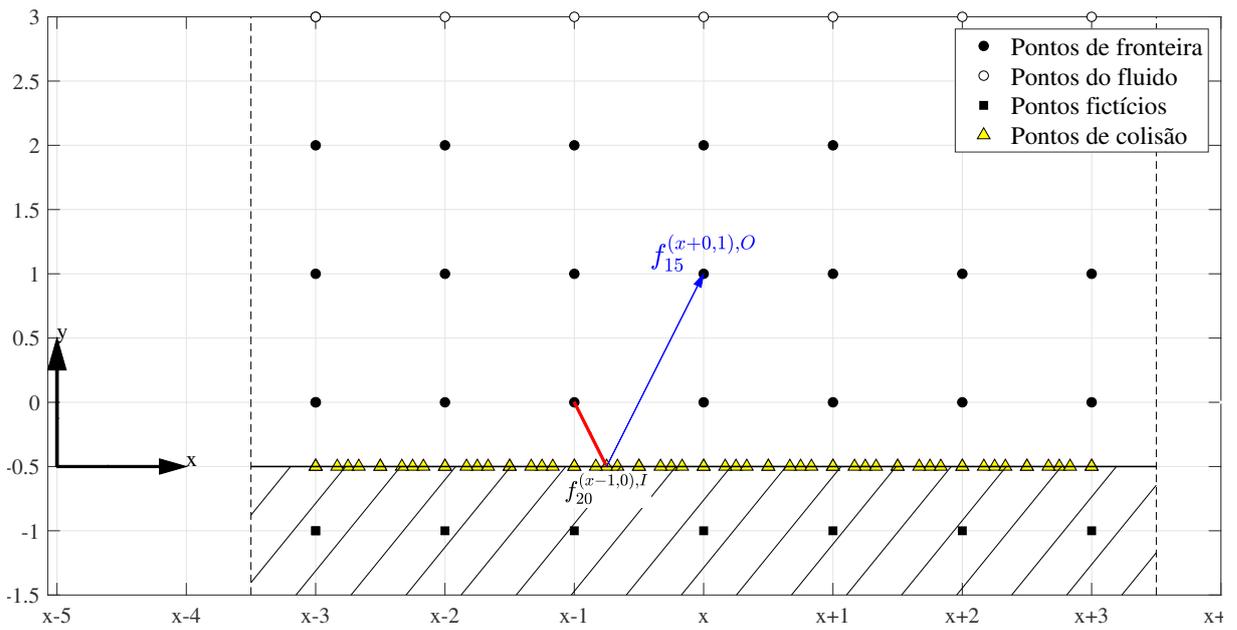


Figura 22 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{15}^{(0,1),O}$.

$$f_{22}^{(x,1),O} = \frac{g_{22}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_{22}^{(eq)} + g_{23}^{(eq)}} \left(f_{24}^{(x-1,0),I} + f_{25}^{(x-2,0),I} \right), \quad (197)$$

$$f_{23}^{(x,1),O} = \frac{g_{23}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_{22}^{(eq)} + g_{23}^{(eq)}} \left(f_{24}^{(x+2,0),I} + f_{25}^{(x+1,0),I} \right). \quad (198)$$

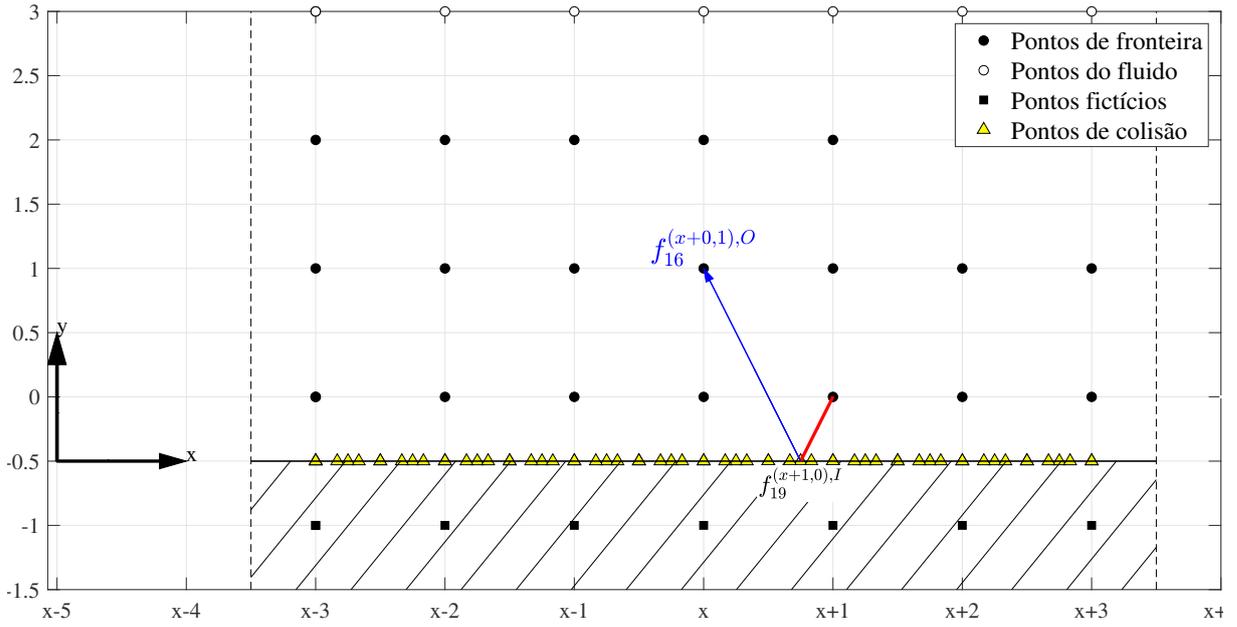


Figura 23 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{16}^{(0,1),O}$.

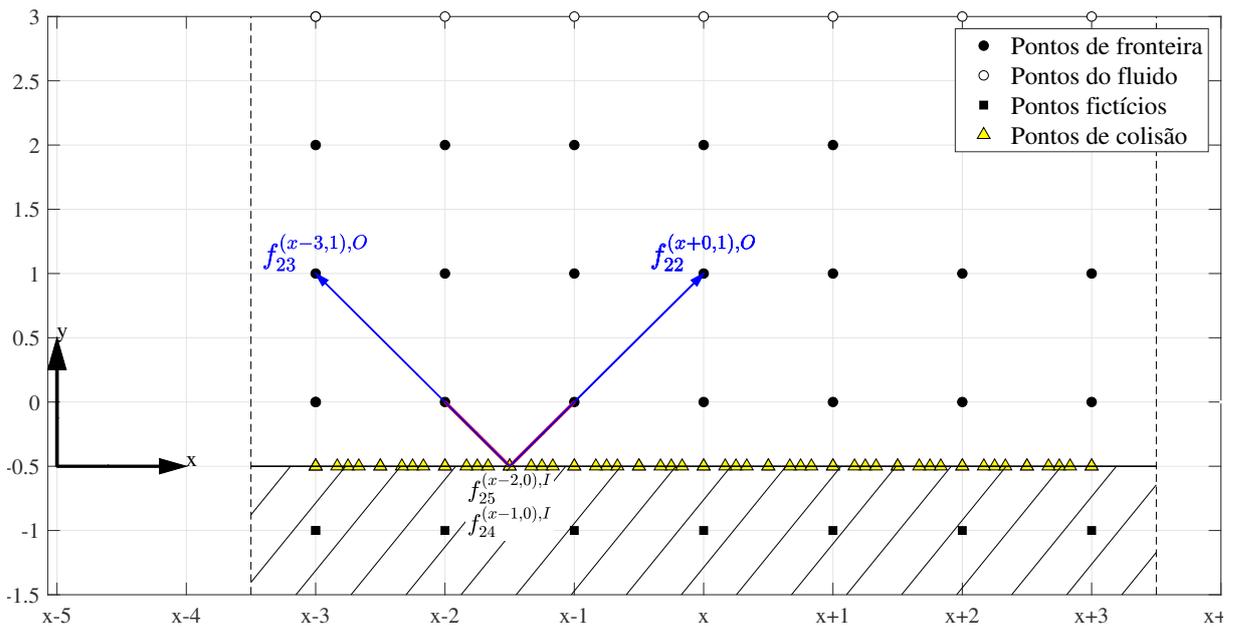


Figura 24 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{22}^{(0,1),O}$ e $f_{23}^{(0,1),O}$.

$$f_{27}^{(x,2),O} = f_{29}^{(x,0),I}. \quad (199)$$

$$f_{31}^{(x,2),O} = f_{36}^{(x-1,0),I}. \quad (200)$$

$$f_{32}^{(x,2),O} = f_{35}^{(x+1,0),I}. \quad (201)$$

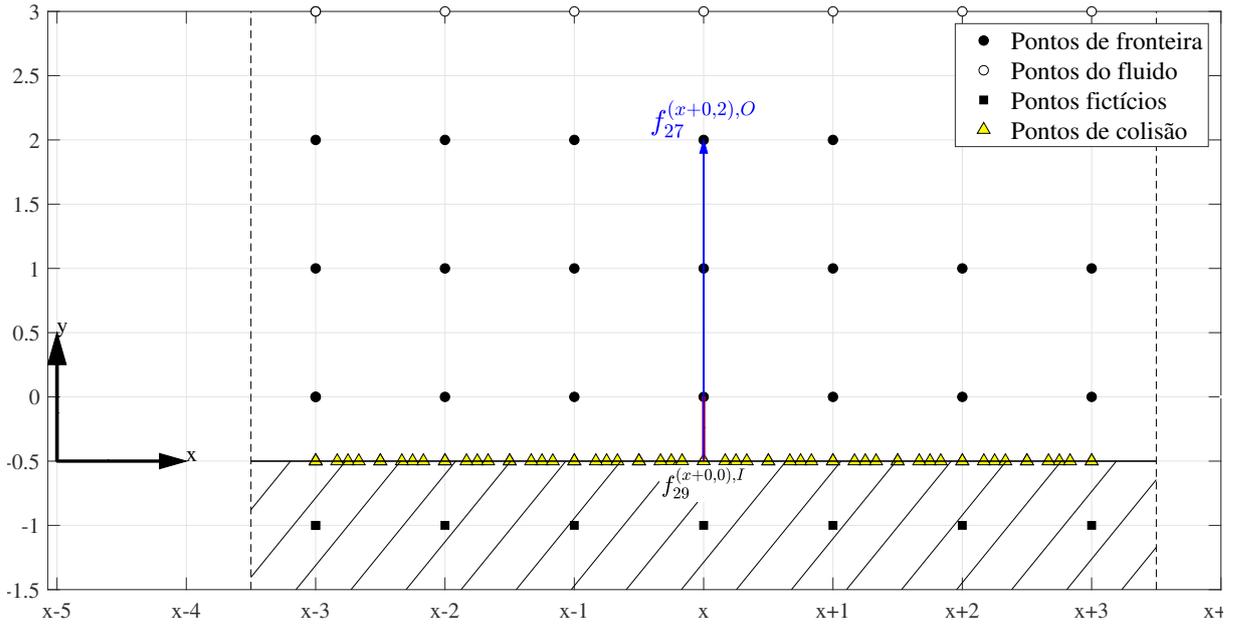


Figura 25 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{27}^{(0,2),O}$.

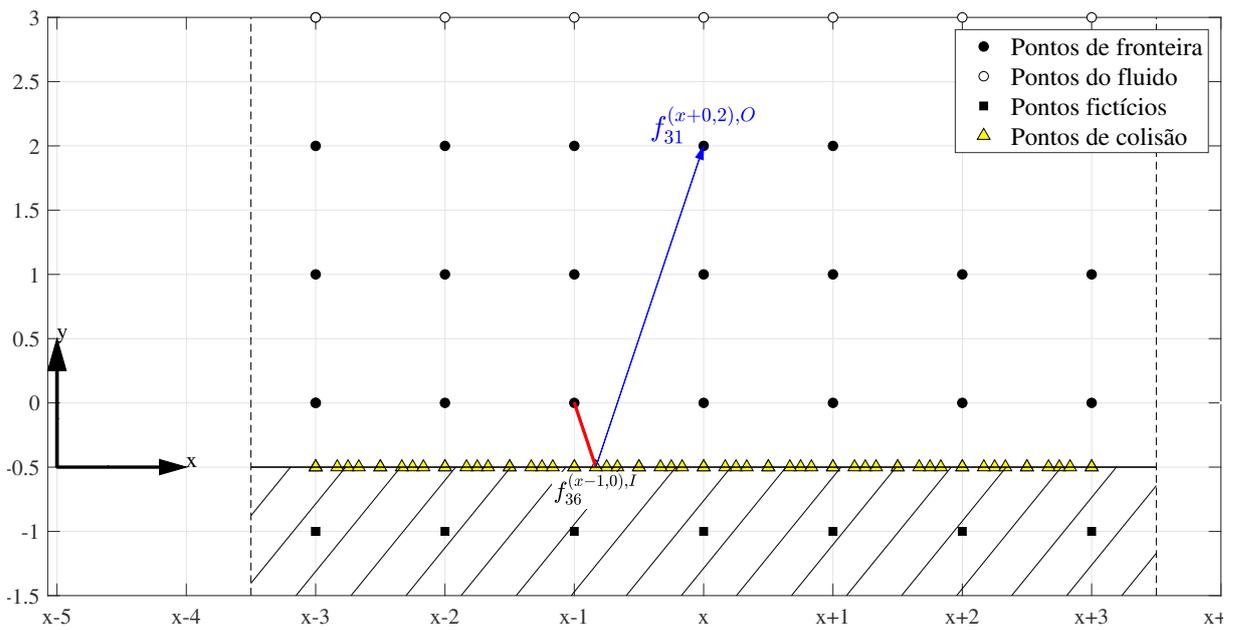
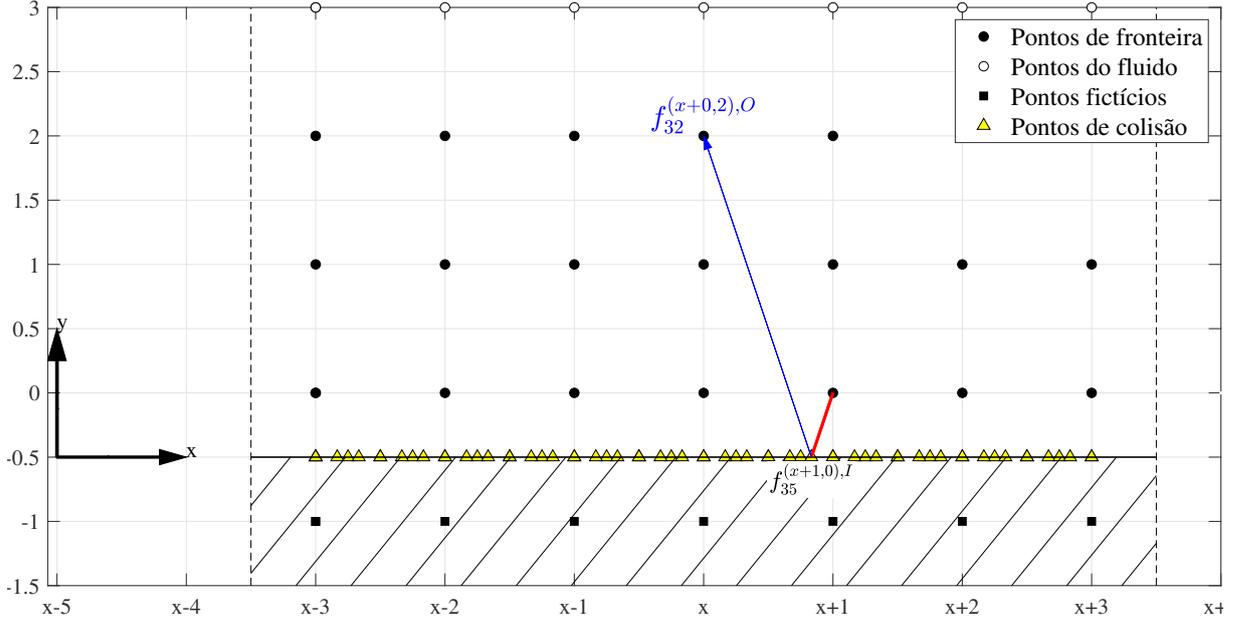


Figura 26 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{31}^{(0,2),O}$.

Apesar de aqui se ter representado uma parede localizada na parte inferior do domínio, as equações podem ser facilmente estendidas para uma parede localizada na parte superior, bastando que as funções de distribuição envolvidas sejam refletidas em relação ao eixo y , ou seja, trocar $f_3 \rightarrow f_5$, $f_6 \rightarrow f_9$, $f_7 \rightarrow f_8$, $f_{11} \rightarrow f_{13}$, $f_{14} \rightarrow f_{21}$, $f_{15} \rightarrow f_{20}$, $f_{16} \rightarrow f_{19}$, $f_{17} \rightarrow f_{18}$, $f_{22} \rightarrow f_{25}$, $f_{23} \rightarrow f_{24}$, $f_{27} \rightarrow f_{29}$, $f_{30} \rightarrow f_{37}$, $f_{31} \rightarrow f_{36}$, $f_{32} \rightarrow f_{35}$ e $f_{33} \rightarrow f_{34}$. Para uma parede localizada na fronteira esquerda de um domínio, as funções


 Figura 27 – Determinação da função de distribuição incógnita $f_{32}^{(0,2),O}$.

de distribuição envolvidas são as indicadas nas figuras 28 a 35.

$$f_2^{(0,y),O} = \frac{g_2^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_2^{(eq)} + g_{15}^{(eq)} + g_{20}^{(eq)} + g_{26}^{(eq)}} \times (f_4^{(0,y),I} + f_{16}^{(0,y-1),I} + f_{19}^{(0,y+1),I} + f_{28}^{(0,y),I}), \quad (202)$$

$$f_{15}^{(0,y),O} = \frac{g_{15}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_2^{(eq)} + g_{15}^{(eq)} + g_{20}^{(eq)} + g_{26}^{(eq)}} \times (f_4^{(0,y-1),I} + f_{16}^{(0,y-2),I} + f_{19}^{(0,y),I} + f_{28}^{(0,y-1),I}), \quad (203)$$

$$f_{20}^{(0,y),O} = \frac{g_{20}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_2^{(eq)} + g_{15}^{(eq)} + g_{20}^{(eq)} + g_{26}^{(eq)}} \times (f_4^{(0,y+1),I} + f_{16}^{(0,y),I} + f_{19}^{(0,y+2),I} + f_{28}^{(0,y+1),I}), \quad (204)$$

$$f_{26}^{(1,y),O} = \frac{g_{26}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_2^{(eq)} + g_{15}^{(eq)} + g_{20}^{(eq)} + g_{26}^{(eq)}} \times (f_4^{(0,y),I} + f_{16}^{(0,y-1),I} + f_{19}^{(0,y+1),I} + f_{28}^{(0,y),I}), \quad (205)$$

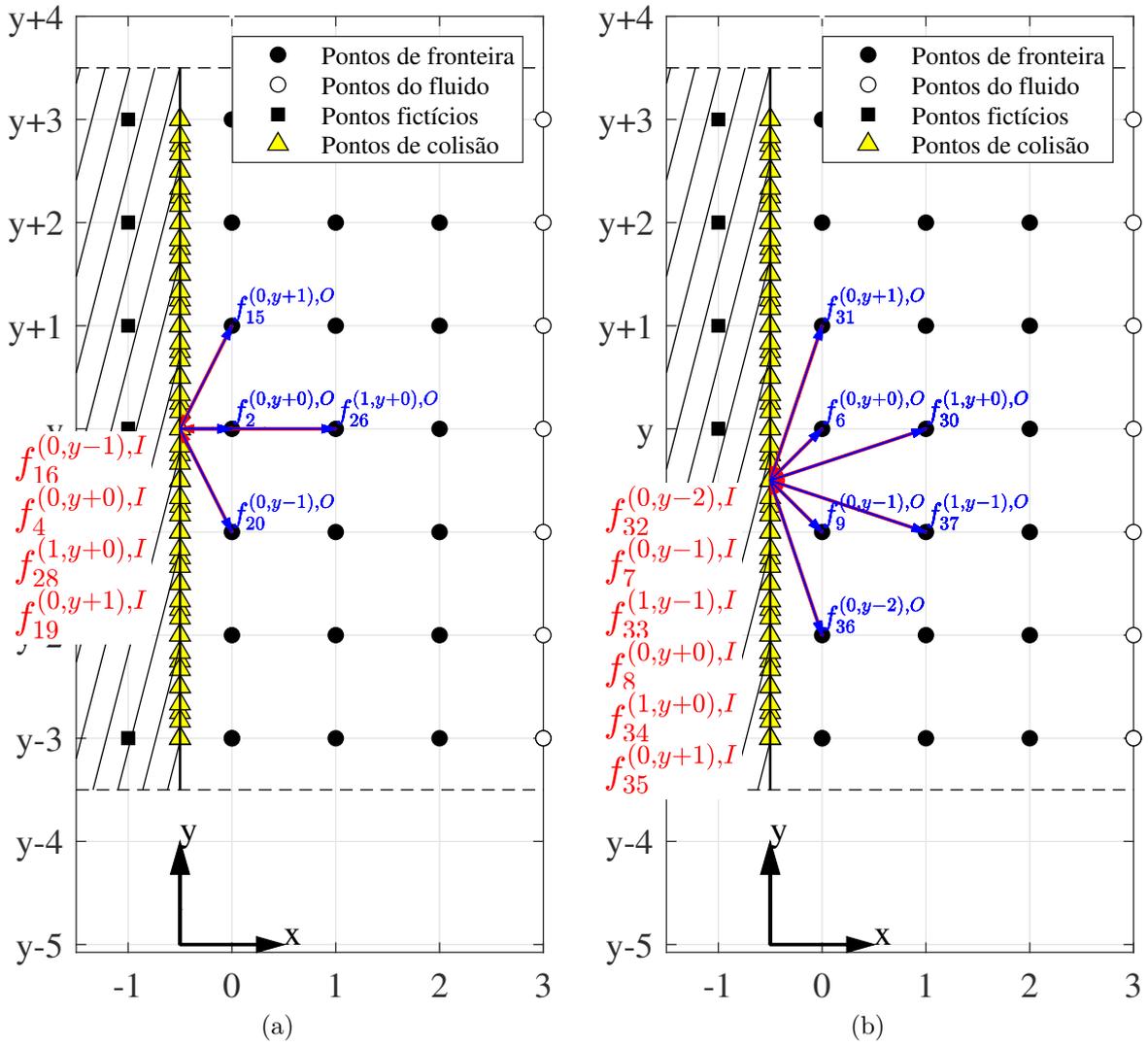


Figura 28 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_2^{(0,0),O}$, $f_{15}^{(0,0),O}$, $f_{20}^{(0,0),O}$, $f_{26}^{(1,0),O}$, $f_6^{(0,0),O}$, $f_9^{(0,0),O}$, $f_{30}^{(1,0),O}$, $f_{31}^{(0,0),O}$, $f_{36}^{(0,0),O}$ e $f_{37}^{(1,0),O}$.

$$f_6^{(0,y),O} = \frac{g_6^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_9^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{36}^{(eq)} + g_{37}^{(eq)}} \times (f_7^{(0,y-1),I} + f_8^{(0,y),I} + f_{32}^{(0,y-2),I} + f_{33}^{(1,y-1),I} + f_{34}^{(1,y),I} + f_{35}^{(0,y+1),I}), \quad (206)$$

$$f_9^{(0,y),O} = \frac{g_9^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_9^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{36}^{(eq)} + g_{37}^{(eq)}} \times (f_7^{(0,y),I} + f_8^{(0,y+1),I} + f_{32}^{(0,y-1),I} + f_{33}^{(1,y),I} + f_{34}^{(1,y+1),I} + f_{35}^{(0,y+2),I}), \quad (207)$$

$$f_{30}^{(1,y),O} = \frac{g_{30}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_9^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{36}^{(eq)} + g_{37}^{(eq)}} \times \left(f_7^{(0,y-1),I} + f_8^{(0,y),I} + f_{32}^{(0,y-2),I} + f_{33}^{(1,y-1),I} + f_{34}^{(1,y),I} + f_{35}^{(0,y+1),I} \right), \quad (208)$$

$$f_{31}^{(0,y),O} = \frac{g_{31}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_9^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{36}^{(eq)} + g_{37}^{(eq)}} \times \left(f_7^{(0,y-2),I} + f_8^{(0,y-1),I} + f_{32}^{(0,y-3),I} + f_{33}^{(1,y-2),I} + f_{34}^{(1,y-1),I} + f_{35}^{(0,y),I} \right), \quad (209)$$

$$f_{36}^{(0,y),O} = \frac{g_{36}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_9^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{36}^{(eq)} + g_{37}^{(eq)}} \times \left(f_7^{(0,y+1),I} + f_8^{(0,y+2),I} + f_{32}^{(0,y),I} + f_{33}^{(1,y+1),I} + f_{34}^{(1,y+2),I} + f_{35}^{(0,y+3),I} \right), \quad (210)$$

$$f_{37}^{(1,y),O} = \frac{g_{37}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_6^{(eq)} + g_9^{(eq)} + g_{30}^{(eq)} + g_{31}^{(eq)} + g_{36}^{(eq)} + g_{37}^{(eq)}} \times \left(f_7^{(0,y),I} + f_8^{(0,y+1),I} + f_{32}^{(0,y-1),I} + f_{33}^{(1,y),I} + f_{34}^{(1,y+1),I} + f_{35}^{(0,y+2),I} \right). \quad (211)$$

$$f_{10}^{(0,y),O} = f_{12}^{(1,y),I}, \quad (212)$$

$$f_{14}^{(0,y),O} = f_{17}^{(1,y-1),I}. \quad (213)$$

$$f_{21}^{(0,y),O} = f_{18}^{(1,y+1),I}, \quad (214)$$

$$f_{22}^{(0,y),O} = \frac{g_{22}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_{22}^{(eq)} + g_{25}^{(eq)}} \left(f_{23}^{(1,y-2),I} + f_{24}^{(1,y+1),I} \right), \quad (215)$$

$$f_{25}^{(0,y),O} = \frac{g_{25}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_{22}^{(eq)} + g_{25}^{(eq)}} \left(f_{23}^{(1,y-1),I} + f_{24}^{(1,y+2),I} \right). \quad (216)$$

$$f_{26}^{(0,y),O} = f_{28}^{(2,y),I}, \quad (217)$$

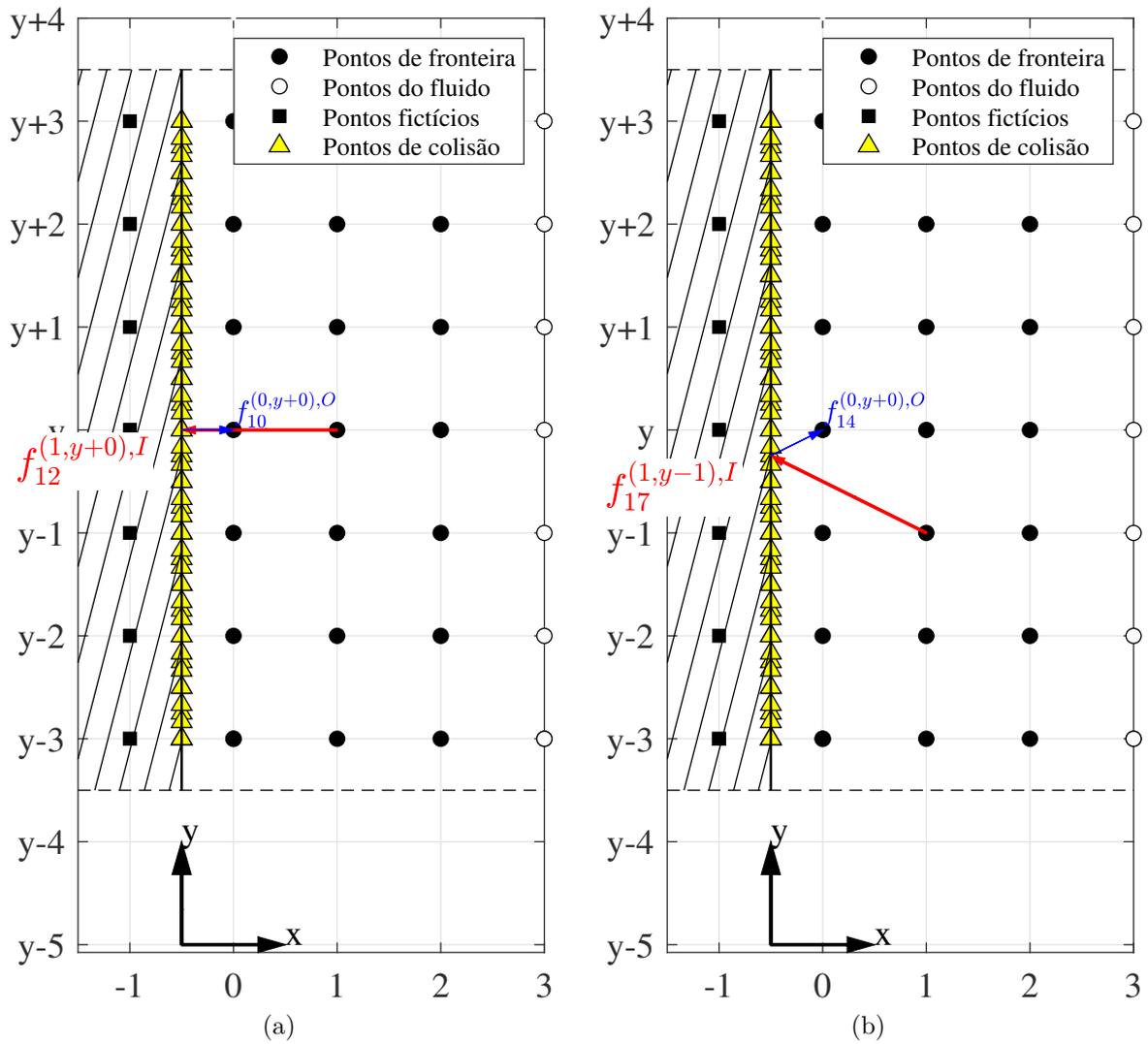


Figura 29 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{10}^{(0,0),O}$ e $f_{14}^{(0,0),O}$.

$$f_{30}^{(0,y),O} = f_{33}^{(2,y-1),I}. \quad (218)$$

$$f_{37}^{(0,y),O} = f_{34}^{(2,y+1),I}, \quad (219)$$

$$f_{10}^{(1,y),O} = f_{12}^{(0,y),I}. \quad (220)$$

$$f_{14}^{(1,y),O} = f_{17}^{(0,y-1),I}, \quad (221)$$

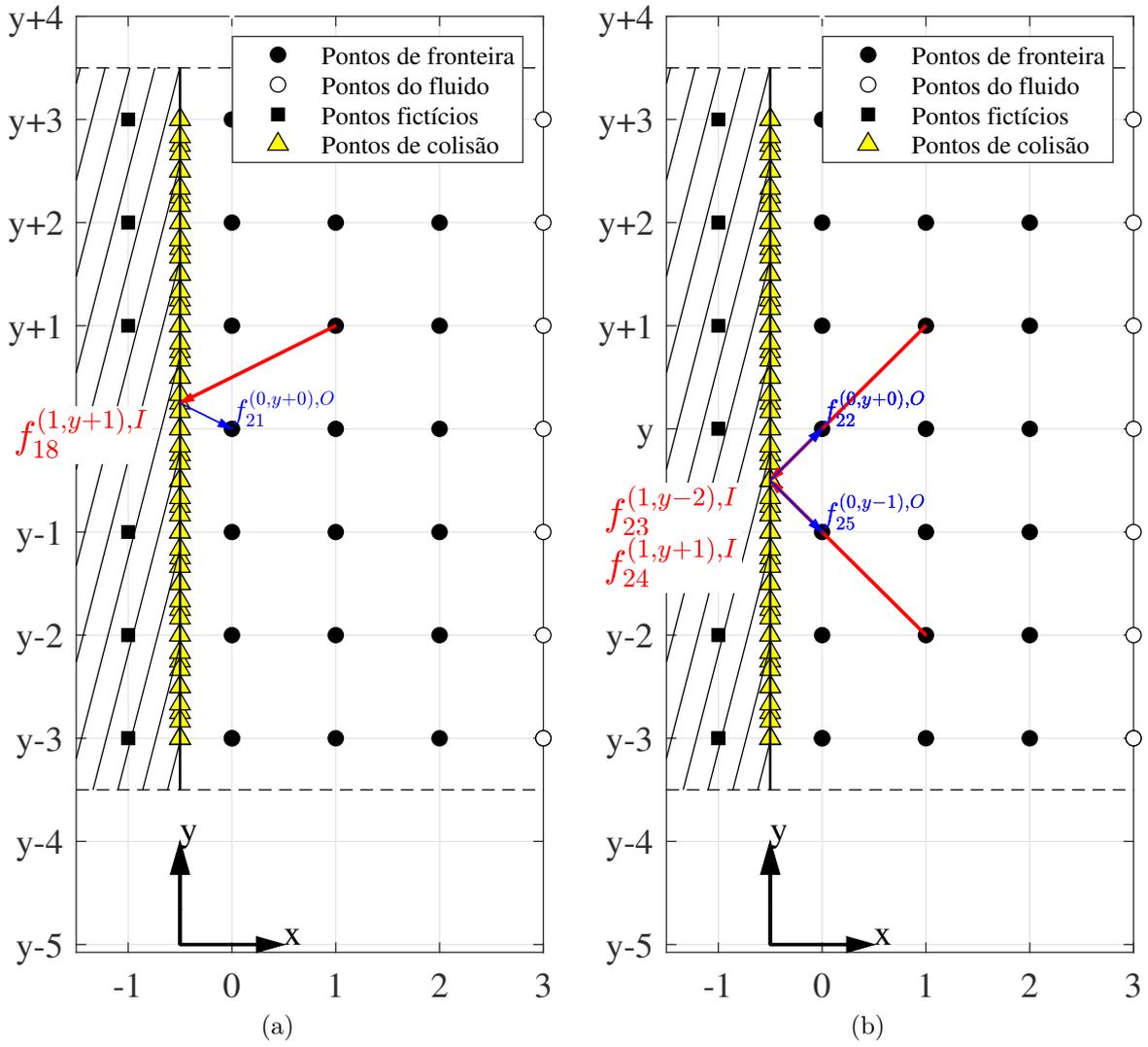


Figura 30 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{21}^{(0,0),O}$, $f_{22}^{(0,0),O}$ e $f_{25}^{(0,0),O}$.

$$f_{21}^{(1,y),O} = f_{18}^{(0,y+1),I}. \quad (222)$$

$$f_{22}^{(1,y),O} = \frac{g_{22}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_{22}^{(eq)} + g_{25}^{(eq)}} \left(f_{23}^{(0,y-2),I} + f_{24}^{(0,y-1),I} \right), \quad (223)$$

$$f_{25}^{(1,y),O} = \frac{g_{25}^{(eq)}(\vec{u}_w, T_w)}{g_{22}^{(eq)} + g_{25}^{(eq)}} \left(f_{23}^{(0,y+1),I} + f_{24}^{(0,y+2),I} \right), \quad (224)$$

$$f_{26}^{(2,y),O} = f_{28}^{(0,y),I}. \quad (225)$$

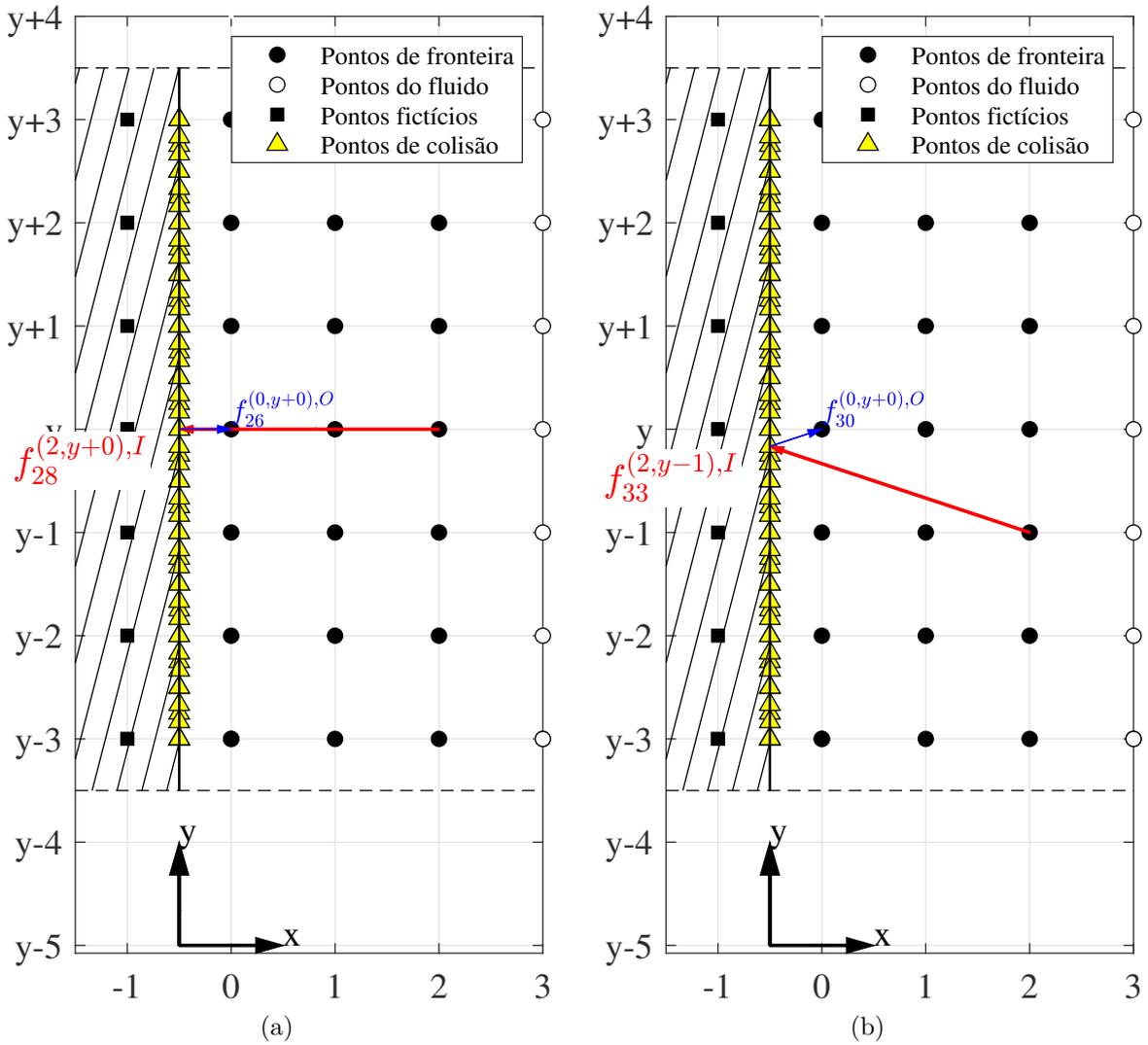


Figura 31 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{26}^{(0,0),O}$ e $f_{30}^{(0,0),O}$.

$$f_{30}^{(2,y),O} = f_{33}^{(0,y-1),I}, \quad (226)$$

$$f_{37}^{(2,y),O} = f_{34}^{(0,y+1),I}. \quad (227)$$

As equações são as mesmas para uma parede localizada na fronteira direita de um domínio, porém com as funções de distribuição refletidas em relação ao eixo x , com a substituição de $f_2 \rightarrow f_4$, $f_6 \rightarrow f_7$, $f_9 \rightarrow f_8$, $f_{10} \rightarrow f_{12}$, $f_{14} \rightarrow f_{17}$, $f_{15} \rightarrow f_{16}$, $f_{20} \rightarrow f_{19}$, $f_{21} \rightarrow f_{18}$, $f_{22} \rightarrow f_{23}$, $f_{25} \rightarrow f_{24}$, $f_{26} \rightarrow f_{28}$, $f_{30} \rightarrow f_{33}$, $f_{31} \rightarrow f_{32}$, $f_{36} \rightarrow f_{35}$ e $f_{37} \rightarrow f_{34}$.

A ideia aqui proposta pode ser vista como uma variação da implementação sugerida por Meng e Zhang (MENG; ZHANG, 2014) onde os pontos fictícios são os próprios pontos de colisão. Dispensar o uso de pontos fictícios aumenta a versatilidade na construção de

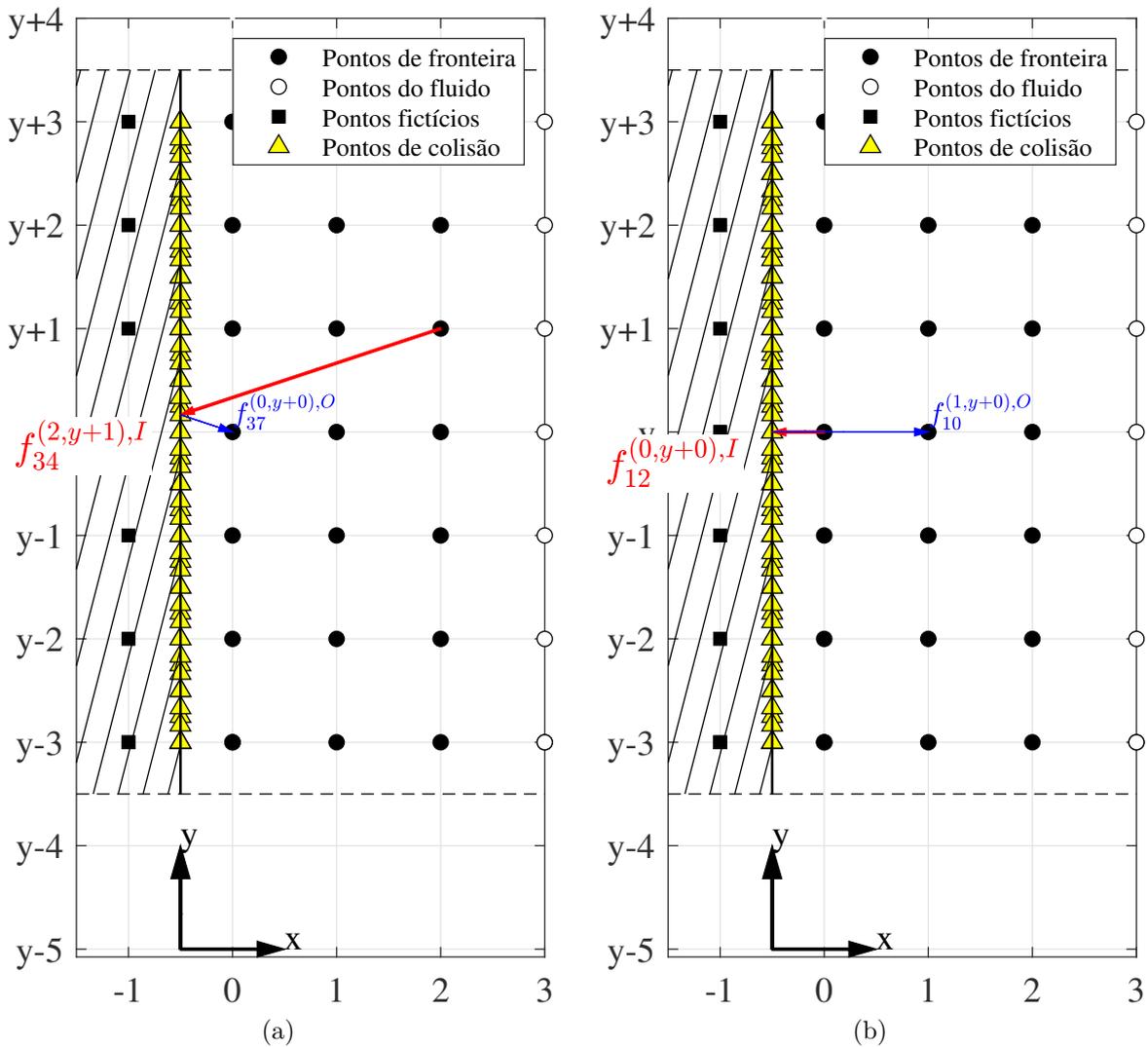


Figura 32 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{37}^{(0,0),O}$ e $f_{10}^{(1,0),O}$.

geometrias complexas, que é um dos pontos em aberto no trabalho de Meng e Zhang. A hipótese de que a função de distribuição esquece totalmente a informação anterior ao impacto pode ser flexibilizada para dar origem à condições de contorno mais diversas. Se utilizar-se, por exemplo, ao invés de T_w a temperatura $T_{x_{b_0}}$ do ponto de origem \vec{x}_{b_0} , tem-se uma situação de não-troca de calor, configurando uma condição de contorno adiabática. Já, se ao invés da velocidade \vec{u}_w utilizar-se a velocidade $\vec{u}_t = \vec{u}_{x_{b_0}} - (\vec{u}_{x_{b_0}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}}$, ou seja, somente a componente tangencial da velocidade do ponto de origem \vec{x}_{b_0} , tem-se uma condição de total escorregamento. Validações numéricas da condição de contorno proposta por comparação com soluções de problemas clássicos da mecânica dos fluidos computacional serão apresentadas no próximo capítulo.

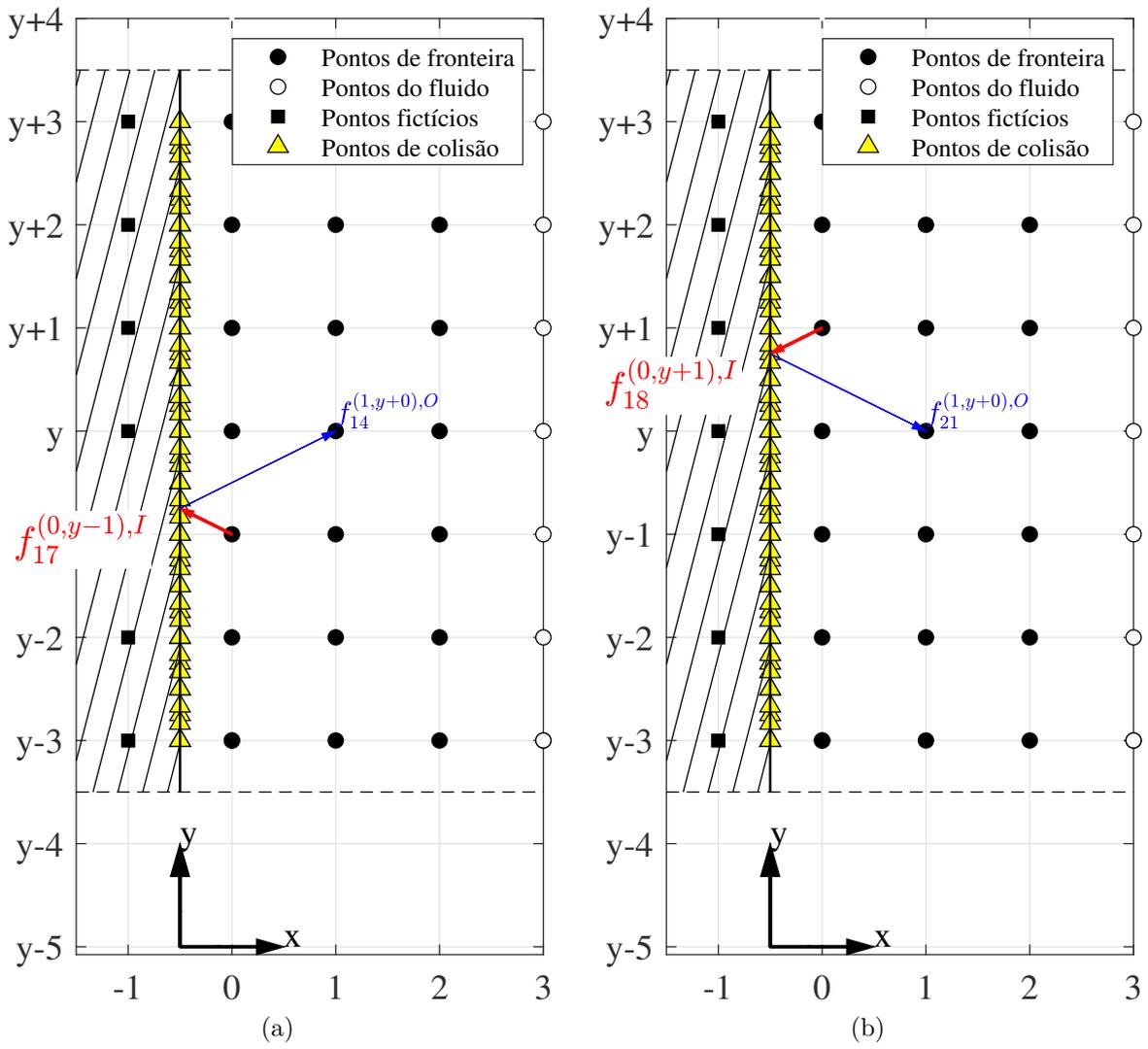


Figura 33 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{14}^{(1,0),O}$ e $f_{21}^{(1,0),O}$.

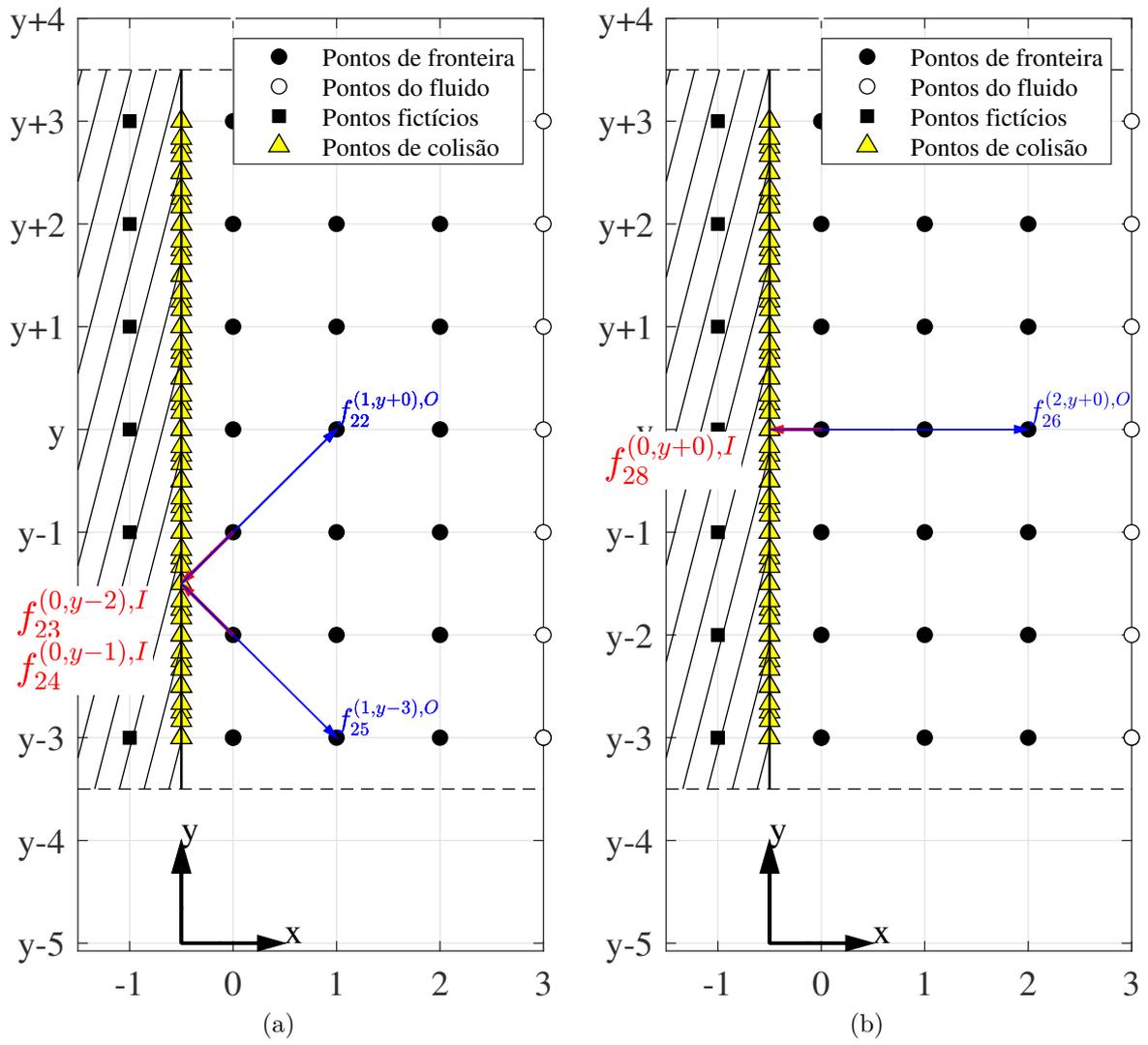


Figura 34 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{22}^{(1,0),O}$, $f_{25}^{(1,0),O}$ e $f_{26}^{(2,0),O}$.

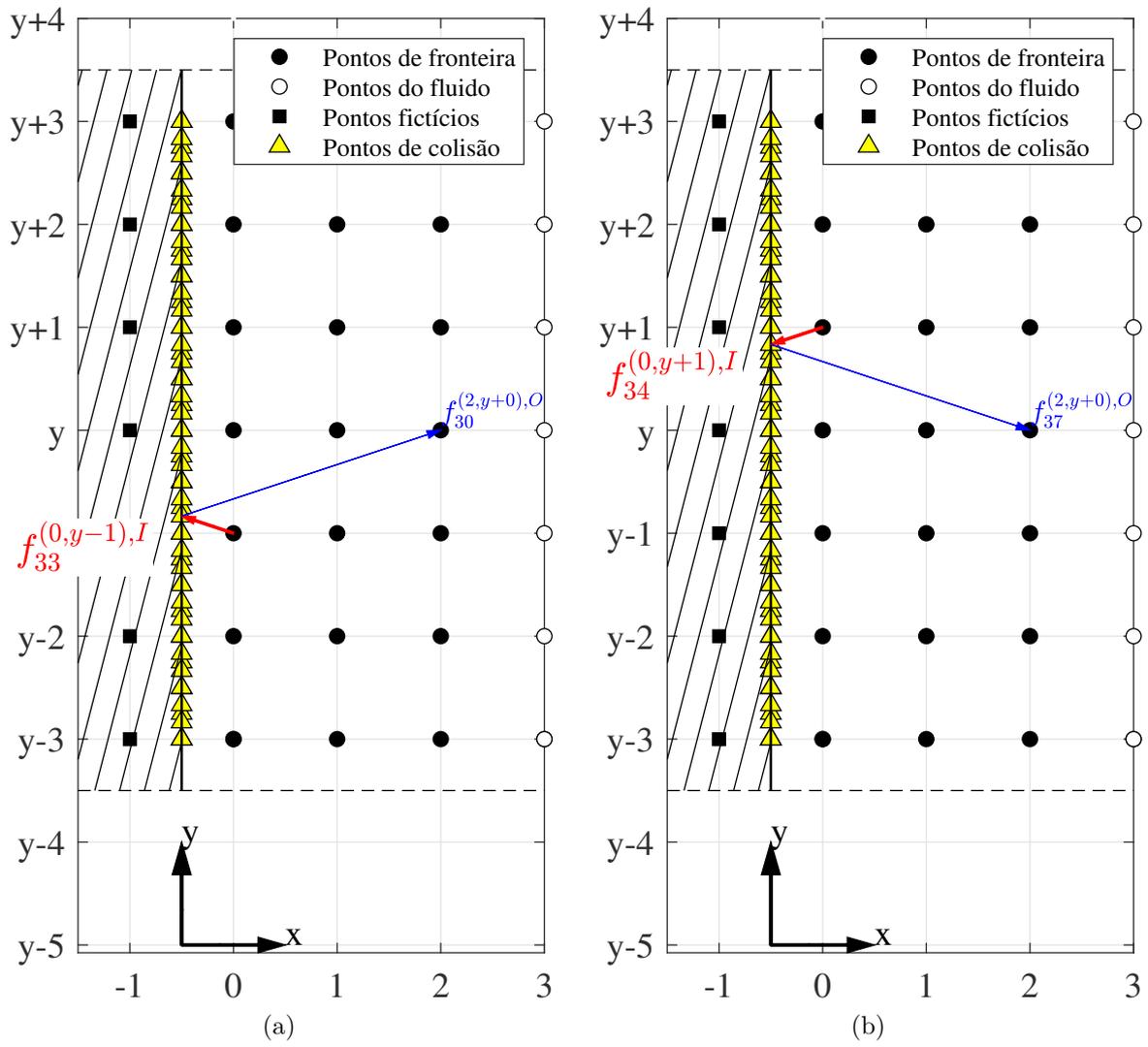


Figura 35 – Determinação das funções de distribuição incógnitas $f_{30}^{(2,0),O}$ e $f_{37}^{(2,0),O}$.

4 VALIDAÇÕES NUMÉRICAS

4.1 INTRODUÇÃO

Simulações numéricas têm por objetivo a resolução de modelos matemáticos que consistem, muitas vezes, de um conjunto de equações diferenciais obtidas a partir de algum modelo físico. As hipóteses e simplificações do modelo físico resultam em diferentes modelos matemáticos que, por sua vez, podem ser discretizados e solucionados de diversas maneiras, o que faz com que um mesmo fenômeno físico possa ser descrito por uma infinidade de modelos numéricos diferentes. A confrontação direta entre a predição de um modelo numérico e um experimento representativo do fenômeno que esse busca descrever é, nesse sentido, a melhor maneira de se validar uma simulação. Há, contudo, situações onde dados experimentais sobre o fenômeno não existem, são de difícil obtenção ou até mesmo referem-se a uma aplicação ou protótipo que sequer existem. Sob esse ponto de vista, uma abordagem alternativa geralmente é aplicada na validação de softwares, que é a confrontação com outros modelos numéricos e com resultados analíticos (RICE, 1993). Ao longo das décadas, diferentes casos foram de forma natural sendo elencados como referências para testes de validação de modelos numéricos. A ideia se fia justamente na proposta de que, se um método anterior se mostrou capaz de simular um determinado fenômeno físico, e o novo método se propõe simular o mesmo fenômeno, a confrontação direta entre esses diferentes métodos, simulando o mesmo caso, deve reproduzir o mesmo resultado. Modelos analíticos cuja solução, mesmo para casos muito simplificados, é conhecida, são também utilizados nesse sentido. Neste capítulo tanto a comparação com modelos analíticos como a confrontação com casos numéricos de referência serão apresentados. O objetivo é, principalmente, testar as condições de contorno propostas, bem como, avaliar as particularidades e limitações do método.

4.2 CAVIDADE COM TAMPA DESLIZANTE

A cavidade com tampa deslizante (GHIA; GHIA; SHIN, 1982; SCHREIBER; KELLER, 1983) é o problema de referência mais utilizado nas validações de modelos numéricos na mecânica dos fluidos computacional. O caso consiste de um fluido confinado em um domínio quadrado (altura H igual à largura L) com as paredes que definem o domínio sendo mantidas estacionárias e à mesma temperatura, com exceção da parede superior, cuja velocidade é $\vec{u}_w = u_w \hat{i} + 0\hat{j}$, como indicado na figura 36. Pode-se definir os seguintes números adimensionais para o problema $Re = u_w L / \nu$, $Ma = u_w / c_s$ e $Kn = Ma / Re = \nu / c_s L$, com diversos resultados para diferentes Re sendo encontrados na literatura (ABDELMIGID *et al.*, 2017). A grande maioria dos dados apresentados na literatura, contudo, baseia-se na simulação contínua ($Kn \rightarrow 0$) e incompressível ($Ma \rightarrow 0$) do problema, de onde já se pode divisar uma dificuldade de comparação entre a equação discreta de Boltzmann e

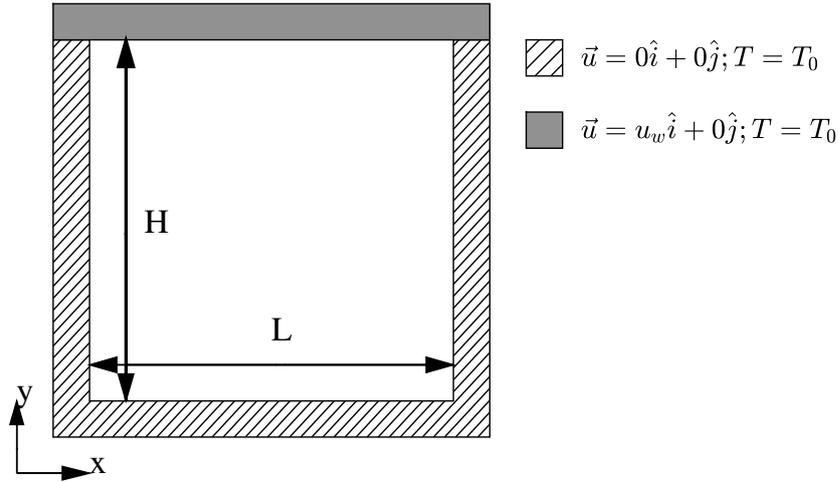


Figura 36 – Dimensões e condições de contorno para o problema da cavidade com tampa deslizante.

essas simulações.

Para altos números de Reynolds, a manutenção de um baixo número de Knudsen só é possível pelo aumento da dimensão L ou pela diminuição da viscosidade ν , já que o aumento da velocidade para se aumentar o número de Reynolds implicaria num aumento no número de Mach, de sorte que a hipótese de um problema incompressível não é mais válida. Entretanto, atingir o regime contínuo ($\text{Kn} \rightarrow 0$) com a equação discreta de Boltzmann é virtualmente impossível, já que fazer com que $L \rightarrow \infty$ é inviável em termos de capacidade computacional e fazer com que $\nu \rightarrow 0$ introduz instabilidades e erros no modelo, de sorte que, principalmente para números de Reynolds altos, efeitos de compressibilidade e viscosos estarão sempre presentes, mas nem sempre esses efeitos são contemplados nas simulações de referência. Sobretudo efeitos de compressibilidade são muito pouco explorados no problema da cavidade com tampa deslizante (BERGAMO *et al.*, 2015), de forma que pequenas discrepâncias são esperadas nas comparações.

Simulações foram conduzidas com $\text{Re} = 100, 400, 1000$ e 5000 e, para cada um desses valores, adotou-se $\text{Kn} = 0,01, 0,001$ e $0,0001$. Diferentes discretizações (número de divisões em H) foram utilizadas com a finalidade de se avaliar a convergência das simulações em cada uma das condições. Como critério de parada estabeleceu-se que

$$\text{Res} = \frac{\sqrt{\sum |\vec{u}_i(t + \delta) - \vec{u}_i(t)|^2}}{\sqrt{\sum |\vec{u}_i(t)|^2}} \leq 1 \text{ e-}10, \quad (228)$$

sendo i os pontos do domínio. Os resultados para o perfil de velocidade u_x em $x = L/2$ foram comparados com os obtidos por Ghia *et al.* (GHIA; GHIA; SHIN, 1982), de onde definiu-se o erro quadrático médio em relação aos valores de referência como $\text{Err} = \sqrt{\sum_p (u_{x_p} - u_{x_p}^{\text{ref}})^2} / n_p$, sendo p os pontos onde u_x^{ref} estavam disponíveis. Em todas as simulações a rede D2V37 e condições do contorno difusas com $\theta = 1$ foram utilizadas.

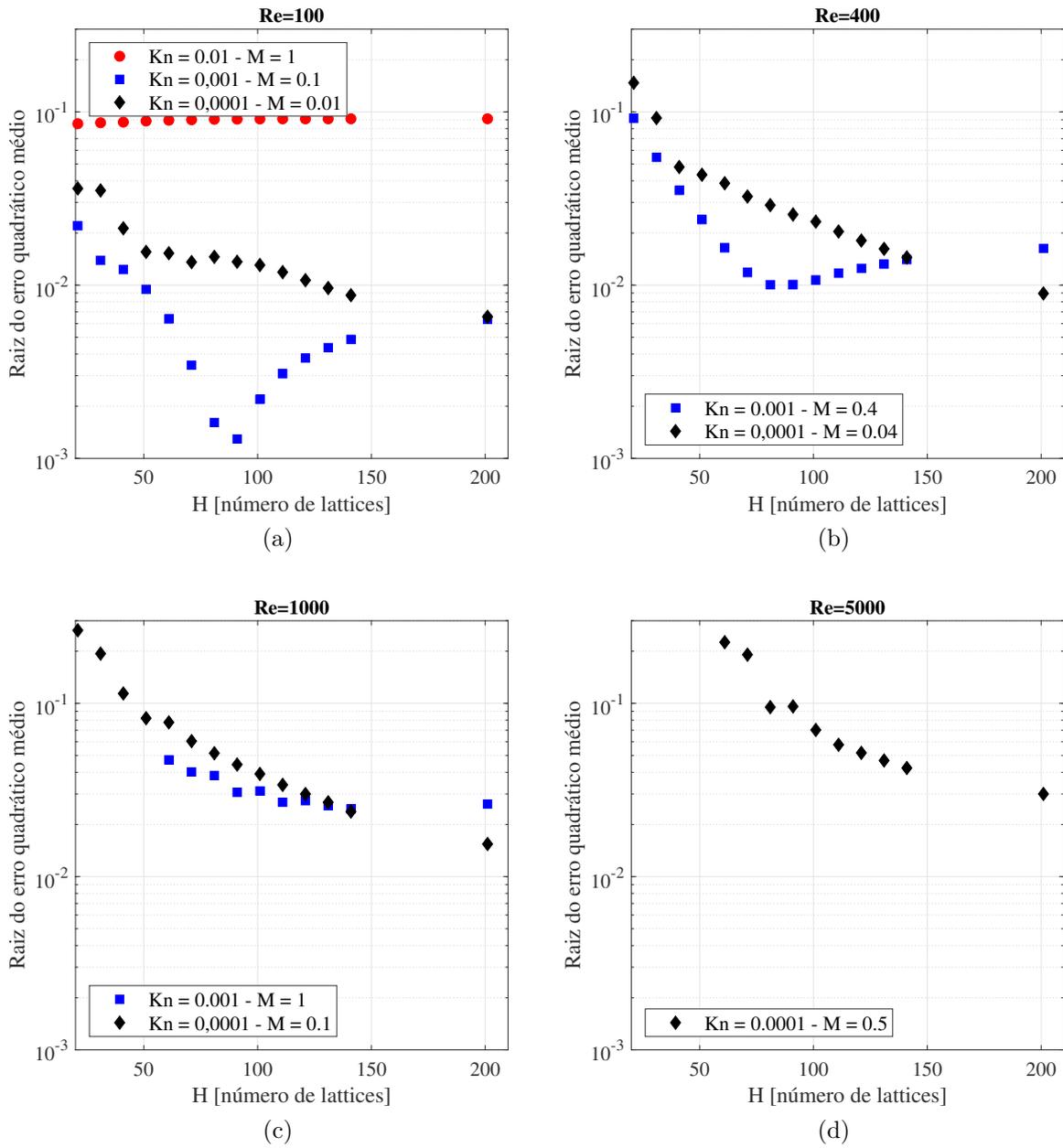


Figura 37 – Curva de convergência da raiz do erro quadrático médio, em relação aos valores de referência para a componente x da velocidade em $x = L/2$, em função do número de pontos na discretização para os números de Reynolds de (a) 100, (b) 400, (c) 1000 e (d) 5000.

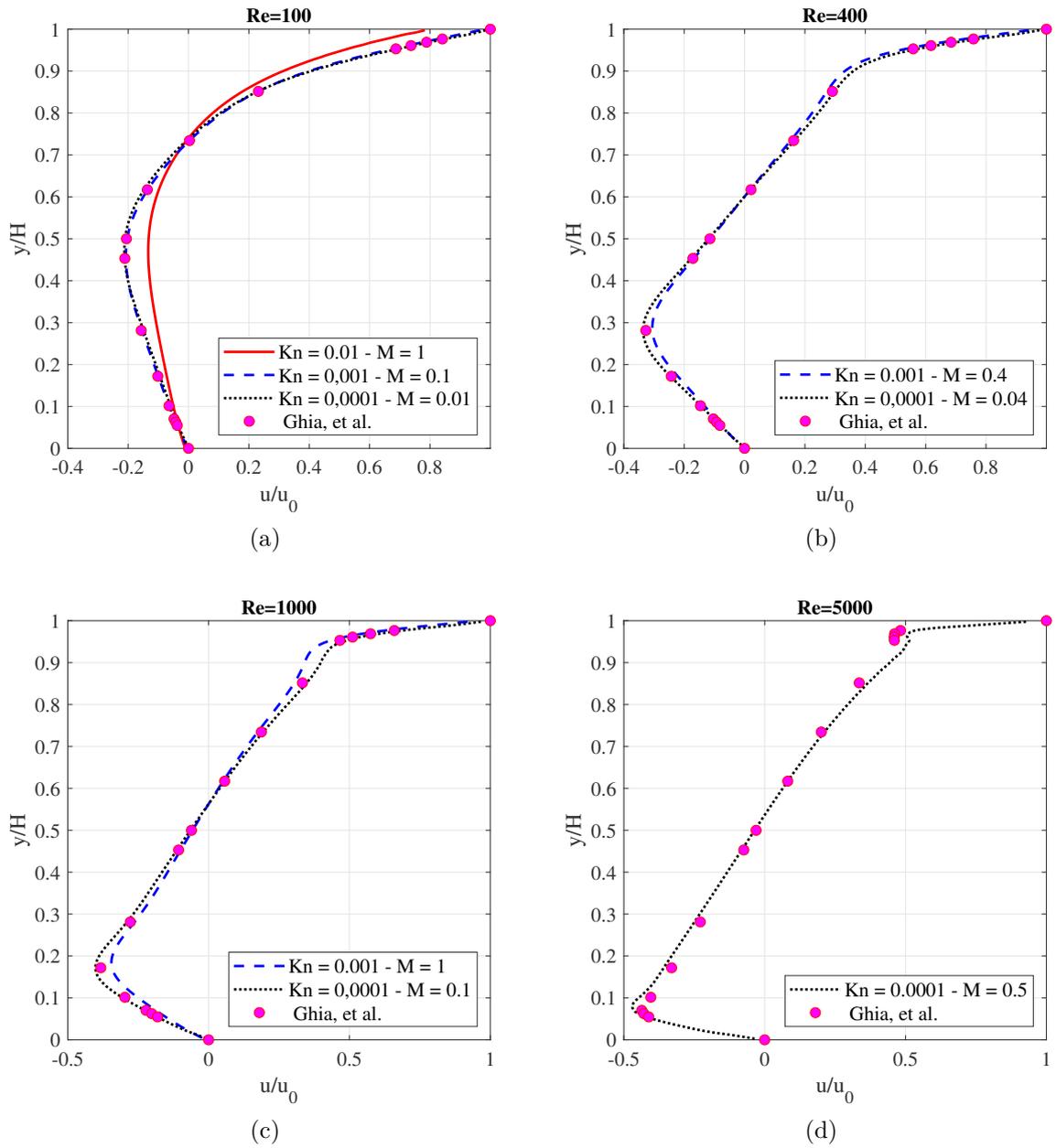


Figura 38 – Comparação entre os perfis da componente x da velocidade em $x = L/2$ obtidos com 200 pontos de discretização e os valores de referência para os números de Reynolds de (a) 100, (b) 400, (c) 1000 e (d) 5000.

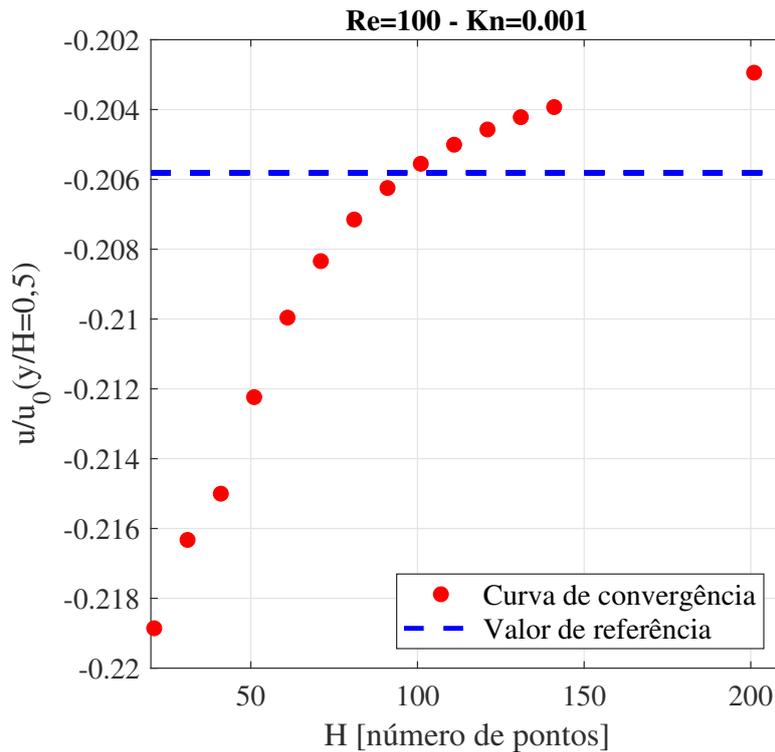


Figura 39 – Comparação entre o valor de convergência e o valor de referência da componente x da velocidade no centro da cavidade.

A convergência dos resultados da simulação conforme se aumenta o número de pontos na discretização da geometria está indicada na figura 37, e os resultados obtidos com a maior discretização considerada, expostos nas figuras 38. Como esperado, diferentes regimes hidrodinâmicos, caracterizados pelas diferentes combinações dos parâmetros adimensionais, levam à diferentes resultados. Números de Knudsen altos implicam em regimes rarefeitos não contemplados na abordagem contínua, e números de Mach elevados apresentam efeitos de compressibilidade significativos, de forma que a comparação tendo somente o número de Reynolds como parâmetro característico do problema não é adequado.

O erro, como foi definido, representa uma distância em relação a um valor de referência, no caso, os resultados de Ghia et al., onde $Ma \rightarrow 0$ e $Kn \rightarrow 0$, e é por essa razão que há nas curvas apresentadas nas figura 38 (a) e (b) um comportamento aparentemente contraditório, que é o aumento do erro com o aumento da discretização. De fato, o que ocorre é melhor entendido ao se analisar os dados apresentados na figura 39, onde a curva de convergência do valor da velocidade no centro da cavidade para $Re = 100$ e $Kn = 0,001$ é indicada.

Com uma discretização baixa, o valor calculado para a velocidade fica abaixo do valor de referência e, conforme se aumenta a discretização, o valor calculado se aproxima do valor de convergência que é, nesse caso, maior que o valor de referência. Ou seja, eventualmente a curva de convergência do valor calculado cruza a curva do valor de

referência, sendo esse ponto de intersecção o ponto onde o erro é mínimo. O erro só tende assintoticamente a zero, contudo, quando os parâmetros utilizados na simulação são compatíveis com os utilizados nas simulações de referência (baixo número de Mach e baixo número de Knudsen).

Outra observação a ser feita é a de que, ao se aumentar o número de pontos na discretização do espaço físico, para se manter constante todos os parâmetros, é preciso manter constante a razão L/ν , o que faz com que seja necessário aumentar a viscosidade ν . A viscosidade, por sua vez, mantém uma relação linear com o tempo de relaxação τ , uma vez que, nas unidades adimensionais da rede,

$$\nu^* = \frac{\theta}{a_s^2} \left(\tau - \frac{\delta}{2} \right). \quad (229)$$

Assim sendo, aumentar a discretização e a viscosidade na mesma proporção significa aumentar o tempo de relaxação, sendo que a convergência se dá pelo aumento do tempo de relaxação a um valor acima do qual os erros não mais interferem na aproximação da viscosidade.

A relação entre o tempo de relaxação τ e o comprimento L , contudo, depende também do número de Knudsen Kn , já que a razão ν/L é justamente $c_s \text{Kn}$, de forma que, em unidades adimensionais da rede, pode-se escrever o tempo de relaxação em função de Kn como

$$\tau = \left(\frac{a_s^2 c_s \text{Kn}}{\theta} \right) N + \frac{\delta}{2}, \quad (230)$$

onde N é o número de pontos utilizados na discretização da dimensão L . Portanto, o tempo de relaxação varia linearmente com o número de pontos de discretização, tendo o número de Knudsen como coeficiente angular dessa relação linear. É por isso que para se ter $\text{Kn} \rightarrow 0$ é necessário fazer $N \rightarrow \infty$ de forma a se conseguir um tempo de relaxação alto o suficiente para que haja convergência. Na figura 40 a curva de convergência é apresentada em função do tempo de relaxação, diferentemente da figura 37, onde a convergência é indicada em função do número de pontos de discretização.

Fica bastante evidente que, para esse caso específico, a convergência só é atingida com tempos de relaxação bastante altos que, para baixos números de Knudsen, requerem uma discretização do espaço bastante grande. Isso não significa, entretanto, que os resultados obtidos com tempos de relaxação baixos são inutilizáveis, eles apenas carregarão um erro que deve ser considerado nas análises. A partir de 100 pontos, o aumento da discretização só alterará algarismos além do segundo algarismo significativo, por exemplo.

Um ponto importante a ser considerado é o de que escoamentos a números de Knudsen elevados não são passíveis de representação pelas equações de Navier-Stokes. Uma das limitações do método contínuo é a incapacidade de representação do fenômeno de escorregamento de velocidade, que é o fenômeno que acontece em regimes rarefeitos de a velocidade do fluido não ser igual à velocidade da fronteira sólida que o contém, sendo

esse escorregamento frequentemente tratado nas simulações que se valem das equações de Navier-Stokes pela imposição de uma “viscosidade efetiva”. A teoria cinética, por sua vez, prevê esse fenômeno quando condições de contorno difusas são consideradas (MAXWELL, 1879), sendo esse fenômeno, de fato, observável na figura 38 (a) para $Kn = 0,01$. Outra observação importante é o contraponto à ideia de que a equação discreta de Boltzmann só é capaz de simular escoamentos a baixos números de Mach, uma vez que regimes com $Ma = 1$ foram atingidos nas simulações quando os tempos de relaxação empregados foram suficientemente grandes (acima de aproximadamente 0,6), sendo a mesma observação válida para o número de Reynolds. Em resumo, com uma discretização suficientemente grande, regimes hidrodinâmicos com altos números de Reynolds e Mach podem ser simulados.

Como teste da adequação das condições de contorno, a cavidade com tampa deslizante é um bom problema. Outras características dos escoamentos em geral, como diferentes números de Prandtl e a presença de forças externas, como a força da gravidade, por exemplo, não são contempladas nesse caso, e serão analisadas com outros problemas de referência.

4.3 ESCOAMENTO DE COUETTE COM TROCA TÉRMICA

4.3.1 Número de Prandtl variável

No modelo BGK, o termo de colisão é tratado como um processo de relaxação da função de distribuição f a um valor de equilíbrio f^{eq} por um único tempo de relaxação τ . Como demonstrado no capítulo anterior, essa simplificação implica em um número de Prandtl fixo e igual a 1, uma vez que todos os momentos da função de distribuição são relaxados ao mesmo tempo τ . A variação do número de Prandtl requer que se possa arbitrar independentemente a viscosidade cinemática ν^* e a difusividade térmica α^* do fluido, o que requer o uso de ao menos dois tempos de relaxação no processo de colisão. Modelos de colisão com múltiplos tempos de relaxação incluem a utilização de funções de distribuição de quasi-equilíbrio (ANSUMALI *et al.*, 2007; FRAPOLLI; CHIKATAMARLA; KARLIN, 2014), o emprego de diferentes tempos de relaxação para os diferentes momentos hidrodinâmicos (SHAN; CHEN, 2007), e modelos derivados diretamente da teoria cinética (PHILIPPI; HEGELE *et al.*, 2005; PHILIPPI; HEGELE JR. *et al.*, 2007), que serão resumidos a seguir.

O termo de colisão BGK é uma simplificação do termo de colisão

$$\Omega(f, f) = \int \int \int \left[f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) f(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) - f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) f(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) \right] r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_1. \quad (231)$$

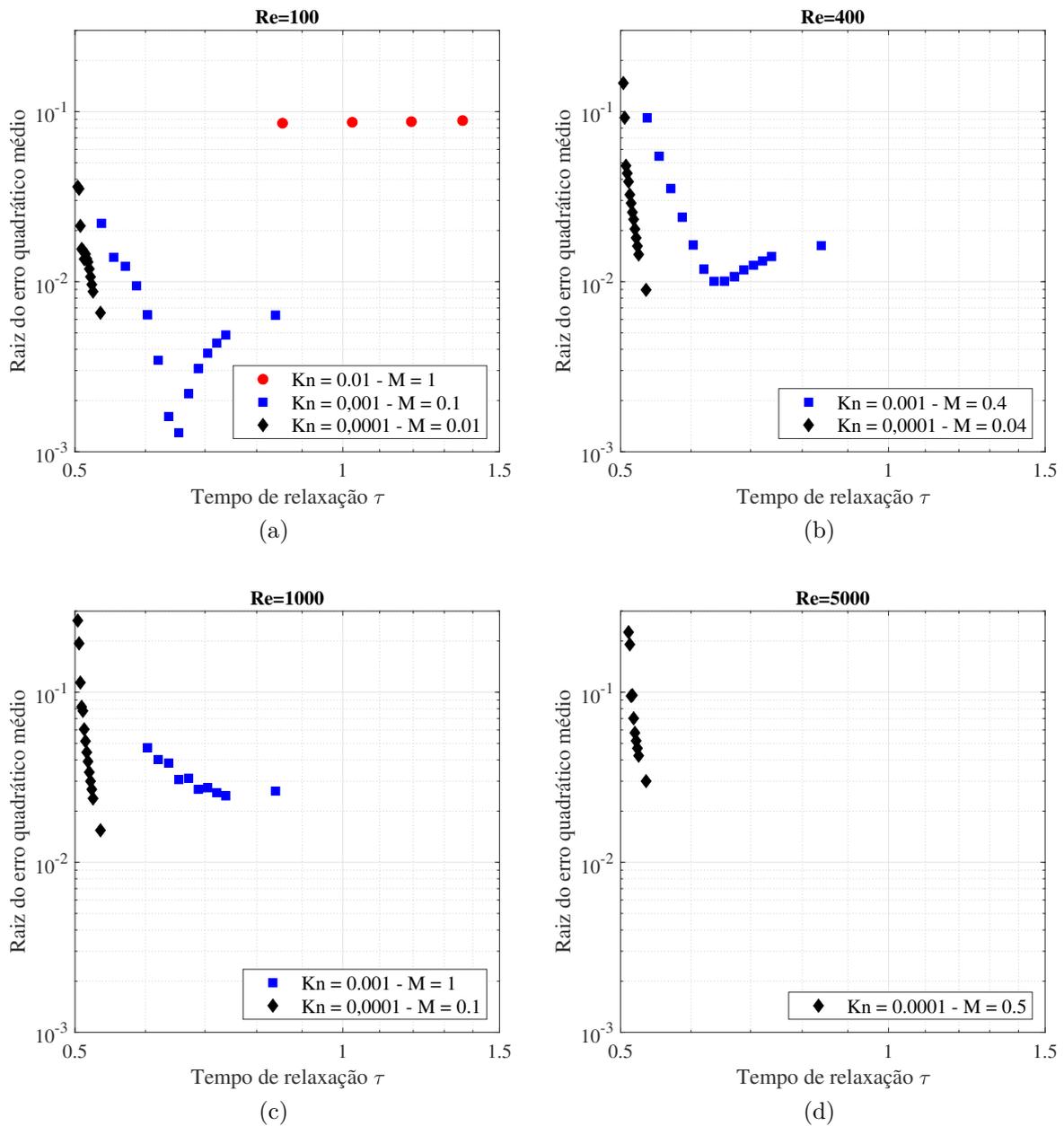


Figura 40 – Curva de convergência da raiz do erro quadrático médio, em relação aos valores de referência para a componente x da velocidade em $x = L/2$, em função do tempo de relaxação para os números de Reynolds de (a) 100, (b) 400, (c) 1000 e (d) 5000.

Se considerarmos um método de perturbação genérico (como a análise de escala de Chapman-Enskog) aplicado à função f ,

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots, \quad (232)$$

se notará que essa expansão se reflete no termo de colisão como

$$\begin{aligned} \Omega(f, f) &= \Omega(f^{(0)}, f^{(0)}) + 2\epsilon\Omega(f^{(0)}, f^{(1)}) + \epsilon^2 \dots = \\ &\Omega^{(0)} + \epsilon\Omega^{(1)} + \epsilon^2\Omega^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (233)$$

Uma característica desse método de perturbação é sua recursividade, que permite sempre escrever $\Omega^{(n)}$ em função dos termos de ordens menores que n . De forma explícita, essa recursividade rende para o termo de colisão (CERCIGNANI, C., 1969)

$$\Omega^{(n)} = 2\Omega(f^{(0)}, f^{(n)}) + \sum_{k=1}^{n-1} \Omega(f^{(k)}, f^{(n-k)}), \quad (234)$$

onde $f^{(0)}$ é a distribuição de equilíbrio, e $f^{(k)}$ para $k < n$ é conhecida da solução em $n - 1$. Ou seja, a determinação de $\Omega^{(n)}$ depende da determinação de $\Omega(f^{(0)}, f^{(n)})$, que pode ser interpretado como um operador linear agindo em $f^{(n)}$. Se $f^{(n)}$ é escrita tal que $f^{(n)} = f^{(0)}\phi$, pode-se escrever

$$\Omega^{(n)} = f^{(0)} \mathcal{L}(\phi) + S^{(n)}, \quad (235)$$

com

$$\mathcal{L}(\phi) = \frac{2\Omega(f^{(0)}, f^{(0)}\phi)}{f^{(0)}}. \quad (236)$$

Se considerarmos pequenas perturbações, retendo somente a expansão até $n = 1$, tem-se, para o termo de colisão, a forma

$$\Omega = f^{eq} L(\phi). \quad (237)$$

Seguindo os trabalhos (PHILIPPI; HEGELE *et al.*, 2005; PHILIPPI; HEGELE JR. *et al.*, 2007), a função ϕ pode ser expandida em tensores de Hermite $\mathcal{H}(\vec{C})$, com $\vec{C} = \vec{\xi}_0 - \vec{u}_0$, como

$$\phi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{C}), \quad (238)$$

com os coeficientes $a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}$ se relacionando aos momentos da função de distribuição tal que, $a_{\phi}^{(0)} = 0$, $a_{\phi_{\alpha}}^{(1)} = 0$ e $a_{\phi_{\alpha\beta}}^{(2)} = \nu_{\alpha\beta}/\rho RT$, sendo que

$$\nu_{\alpha\beta} = \int f^{neq} (\xi_{0\alpha} - u_{0\alpha})(\xi_{0\beta} - u_{0\beta}) d\vec{\xi}_0, \quad (239)$$

é o tensor de tensões viscosas.

Aplicando o operador \mathcal{L} à equação (238), tem-se

$$\mathcal{L}(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \mathcal{L}(\mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{C})), \quad (240)$$

sendo que $\mathcal{L}(\mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{C}))$ pode também ser expandido em tensores de Hermite como

$$\mathcal{L}(\phi) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m, n)}}{m!} \mathcal{H}_{\beta_1, \dots, \beta_m}^{(m)}(\vec{C}), \quad (241)$$

de onde pode-se escrever a equação (240) como

$$\mathcal{L}(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \frac{\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m, n)}}{m!} \mathcal{H}_{\beta_1, \dots, \beta_m}^{(m)}(\vec{C}), \quad (242)$$

onde $\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m, n)}$ é o tensor de relaxação.

O operador $\mathcal{L}(\phi)$ pode ser aproximado de forma sucessiva pela diagonalização do tensor $\gamma^{(m, n)}$, sendo o modelo de colisão BGK uma aproximação de primeira ordem para o operador, obtida ao se impor que $\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m, n)}$ seja nulo caso $m \neq n$ ou $\alpha_1, \dots, \alpha_n \neq \beta_1, \dots, \beta_m$, e igual a um parâmetro livre γ_1 caso contrário. Nesse caso, a equação (242) assume a forma

$$\mathcal{L}(\phi) = \gamma_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{C}) = \gamma_1 \phi, \quad (243)$$

de onde, portanto,

$$\Omega = \gamma_1 f^{eq} \phi = \gamma_1 f^{neq} = \gamma_1 (f - f^{eq}), \quad (244)$$

que é justamente o termo de colisão BGK com $\gamma_1 = -1/\tau$.

Para a construção de aproximações de ordens mais elevadas, nota-se que, escrevendo a equação (242) na forma

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \frac{\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m, n)}}{m!} \mathcal{H}_{\beta_1, \dots, \beta_m}^{(m)}(\vec{C}) = \\ & \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \frac{\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m, n)}}{m!} \mathcal{H}_{\beta_1, \dots, \beta_m}^{(m)}(\vec{C}) + \\ & \sum_{n=N+1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \frac{\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m, n)}}{m!} \mathcal{H}_{\beta_1, \dots, \beta_m}^{(m)}(\vec{C}), \end{aligned} \quad (245)$$

e aplicando o processo de diagonalização anterior com $\gamma^{(m,n)} = \gamma_1$ para $n > N$ e mantendo $\gamma^{(m,n)}$ livre para os demais termos, obtém-se

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\phi) = & \sum_{n=0}^N \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \frac{\gamma_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_m}^{(m,n)}}{n!} \mathcal{H}_{\beta_1, \dots, \beta_m}^{(n)}(\vec{C}) + \\ & \gamma_1 \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{C}). \end{aligned} \quad (246)$$

O que tem-se agora, diferente do modelo BGK, onde todos os momentos são relaxados com mesmo parâmetro γ_1 , são diferentes modelos onde em cada ordem $n < N$ pode ser aplicado um fator de relaxação diferente. Especificamente, para $N = 2$, lembrando que $a_{\phi}^{(0)} = 0$ e $a_{\phi_{\alpha_1}}^{(1)} = 0$,

$$\mathcal{L}(\phi) = \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)}}{2!} \frac{\gamma_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2}^{(m,n)}}{2!} \mathcal{H}_{\beta_2, \beta_2}^{(2)}(\vec{C}) + \gamma_1 \sum_{n=3}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{C}), \quad (247)$$

sendo que

$$\begin{aligned} & \gamma_1 \sum_{n=3}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{C}) = \\ & \gamma_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}}^{(n)}}{n!} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{C}) - \gamma_1 \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)}}{2} \mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)}(\vec{C}) = \\ & \gamma_1 \phi - \gamma_1 \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)}}{2} \mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)}(\vec{C}), \end{aligned} \quad (248)$$

de onde

$$\mathcal{L}(\phi) = \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)}}{2} \left(\frac{\gamma_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2}^{(m,n)}}{2} \mathcal{H}_{\beta_2, \beta_2}^{(2)}(\vec{C}) - \gamma_1 \mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)}(\vec{C}) \right) + \gamma_1 \phi. \quad (249)$$

Com $\gamma_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2}^{(m,n)} = 0$ para $\alpha_1, \alpha_2 \neq \beta_1, \beta_2$ e igual a $2\gamma_2$ caso contrário, tem-se

$$\mathcal{L}(\phi) = \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)}}{2} (\gamma_2 - \gamma_1) \mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)}(\vec{C}) + \gamma_1 \phi, \quad (250)$$

e, portanto,

$$\Omega = f^{eq} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)}}{2} (\gamma_2 - \gamma_1) \mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)}(\vec{C}) + \gamma_1 (f - f^{eq}). \quad (251)$$

Fazendo $\gamma_1 = -1/\tau_1$ e $\gamma_2 = -1/\tau_2$,

$$\Omega = \frac{(f^{eq} - f)}{\tau_1} + \left(\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2} \right) f^{eq} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)}}{2} \mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)}(\vec{C}), \quad (252)$$

obtém-se o modelo de colisão de segunda ordem com dois tempos de relaxação.

Na sua forma discreta, esse modelo de colisão é dado por

$$\Omega_i = \frac{(f_i^{eq} - f_i)}{\tau_1} + \left(\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2} \right) f_i^{eq} \frac{a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)}}{2} \mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)}(\vec{C}_i), \quad (253)$$

com

$$a_{\phi_{\alpha_1, \alpha_2}}^{(2)} = \frac{\sum_i f_i^{neq} (e_{i_{\alpha_1}} - u_{\alpha_1})(e_{i_{\alpha_2}} - u_{\alpha_2})}{\rho^* \theta / a_s^2}, \quad (254)$$

e

$$\mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)}(\vec{C}_i) = a_s^2 (e_{i_{\alpha_1}} - u_{\alpha_1})(e_{i_{\alpha_2}} - u_{\alpha_2}) - \delta_{\alpha_1 \alpha_2}. \quad (255)$$

A análise de Chapman-Enskog aplicada a esse modelo de colisão leva aos coeficientes de transporte (PHILIPPI; HEGELE *et al.*, 2005; PHILIPPI; HEGELE JR. *et al.*, 2007)

$$\nu^* = \frac{\theta}{a_s^2} \left(\tau_2 - \frac{\delta}{2} \right), \quad (256)$$

e

$$\alpha^* = \frac{\theta}{a_s^2} \left(\tau_1 - \frac{\delta}{2} \right), \quad (257)$$

de onde define-se

$$\text{Pr} = \frac{\nu^*}{\alpha^*} = \frac{\tau_2 - \delta/2}{\tau_1 - \delta/2}. \quad (258)$$

A possibilidade de se impor diferentes números de Prandtl é importante quando se deseja simular fenômenos reais.

4.3.2 validação numérica

Um fenômeno onde o número de Prandtl desempenha um papel importante é o escoamento de Couette com troca térmica, que é o escoamento que se estabelece entre duas placas planas separadas por uma distância H , onde a placa inferior é mantida estacionária e à temperatura T_L , e a placa superior se move à velocidade u_H com temperatura $T_H > T_L$. Esse escoamento é caracterizado pelo fenômeno do aquecimento viscoso (PANTOKRATORAS, 2007), que resulta em um perfil de velocidade linear, e num perfil de

temperatura, para o caso de um escoamento incompressível e com viscosidade constante, dado por

$$\frac{T(y) - T_L}{T_H - T_L} = \frac{y}{H} + \frac{\text{Pr Ec}}{2} \frac{y}{H} \left(1 - \frac{y}{H}\right), \quad (259)$$

onde

$$\text{Ec} = (\gamma - 1) \frac{T_H}{T_H - T_L} \text{M}_H^2, \quad (260)$$

é o número de Eckert, γ é a razão de calores específicos, c_p/c_v , e M_H^2 é o número de Mach com base na velocidade e temperatura da parede superior. Esse problema foi adotado para se testar a capacidade de se variar o número de Prandtl na equação discreta de Boltzmann.

As mesmas considerações acerca do problema da cavidade com tampa deslizante se aplicam aqui. A comparação será feita com simplificações que não se aplicam diretamente à equação discreta de Boltzmann: a incompressibilidade e a viscosidade constante, já que, como indicado na equação (256), a viscosidade é dependente da temperatura, e uma equação de estado de gás ideal estará sendo empregada. Apesar de não se poder generalizar os resultados de um caso específico para toda sorte de problemas, pode-se esperar que a convergência aqui não seja muito diferente do caso da cavidade com tampa deslizante, haja vista que o perfil de velocidade linear esperado é bem mais simples que os encontrados no problema anterior. Assim sendo, uma discretização de 100 pontos para a dimensão H na geometria indicada na figura 41 é suficiente para uma solução com erros da ordem $\mathcal{O}(-2)$ para a velocidade. Todo o problema pode ser parametrizado por grupos adimensionais, já que, uma vez definida a temperatura da parede superior T_H , tem-se a velocidade do som $c_s = \sqrt{\gamma R T_H}$ e a viscosidade $\nu(T_H)$. A distância de separação entre as paredes H deriva da imposição do número de Knudsen $\text{Kn} = \nu/c_s H$ e, para um dado número de Reynolds $\text{Re} = u_H H/\nu$, fica definida a velocidade da parede superior u_H , de onde tem-se o número de Mach e, estabelecido o número de Ec, tem-se a temperatura da parede inferior T_L . Para a simulação, foram impostas condições de contorno periódicas na direção x , e condições de contorno de velocidade e temperatura de acordo com a definição dos grupos adimensionais nas paredes superior e inferior. O mesmo critério de parada do problema da cavidade com tampa deslizante foi utilizado, e os resultados para o perfil de temperatura comparados com os previstos pela equação (259) para uma ampla combinação de grupos adimensionais e números de Prandtl. Os resultados estão indicados nas figuras 42 e 43.

Os perfis de temperatura obtidos mostram boa concordância com os resultados teóricos. Fica bastante claro que o erro tende a aumentar com o aumento do número de Prandtl, o que também pode ser explicado pelo tempo de relaxação já que, uma vez que se mantenha a viscosidade cinemática ν^* fixa, o aumento de Pr implica numa diminuição da difusividade térmica α^* e, conseqüentemente, na diminuição do tempo de relaxação τ_1 . Números de Prandtl variável são importantes não só porque fluidos reais

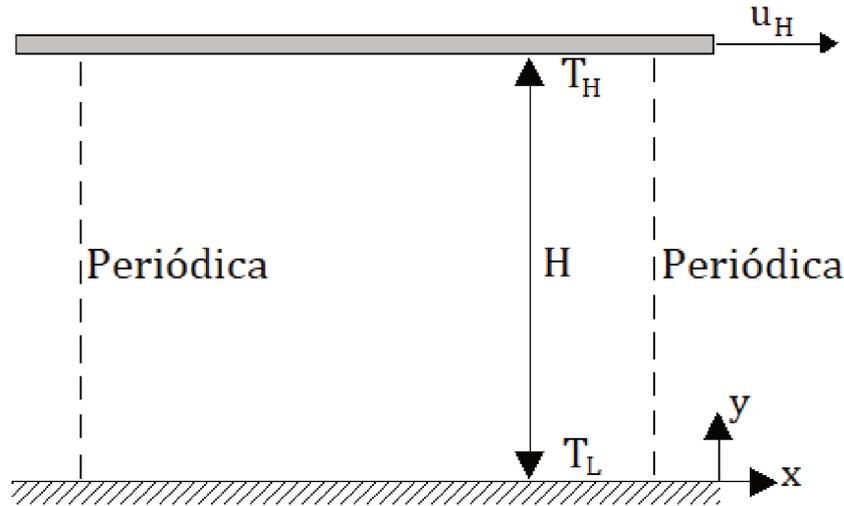


Figura 41 – Dimensões e condições de contorno para o escoamento de Couette com troca térmica.

possuem diferentes números de Prandtl, mas também porque pode-se, ao impor-se de forma independente a viscosidade e a difusividade, avaliar de que forma agem os mecanismos de dissipação viscosa e térmica. Para ν^* fixo, se $\text{Pr} \rightarrow \infty$, $\alpha^* \rightarrow 0$ e espera-se que somente os mecanismos de dissipação viscosas estejam presentes. Inversamente, se α^* é fixo e $\text{Pr} \rightarrow 0$, $\nu^* \rightarrow 0$, e os mecanismos de dissipação térmica se tornam predominantes. Esses efeitos são especialmente importantes no caso da absorção sonora em meios porosos, por exemplo.

4.4 ABSORÇÃO SONORA EM MEIOS POROSOS RÍGIDOS

Quando da propagação de ondas sonoras, a viscosidade e a condução de calor levam à processos dissipativos que resultam na atenuação da amplitude das ondas. Esses processos são bastante pronunciados quando a propagação se dá em dutos de pequeno diâmetro, de sorte que o emprego de materiais porosos para o controle sonoro configura uma importante área na acústica.

A solução analítica da propagação de ondas sonoras em fluidos confinados em tubos cilíndricos rígidos, incluindo os efeitos visco-térmicos, aparece no trabalho de Kirchoff (KIRCHHOFF, 1868), na forma de uma equação transcendental bastante complicada de ser resolvida. Simplificações nas equações básicas que regem o fenômeno foram introduzidas por Zwikker e Kosten (ZWIKKER; KOSTEN, 1949), resultando em soluções analíticas mais fáceis de serem tratadas que, como mostrado por Tijdeman (TIJDEMAN, 1975), são essencialmente idênticas às de Kirchoff. O modelo de Zwikker e Kosten, quando aplicado a um meio poroso bidimensional composto por aletas, como indicado na figura 44, resulta num coeficiente de absorção dado por (ALLARD; ATALLA, 2009)

$$\alpha = 1 - \left| \frac{Z_s - \rho_0 c_s}{Z_s + \rho_0 c_s} \right|^2, \quad (261)$$

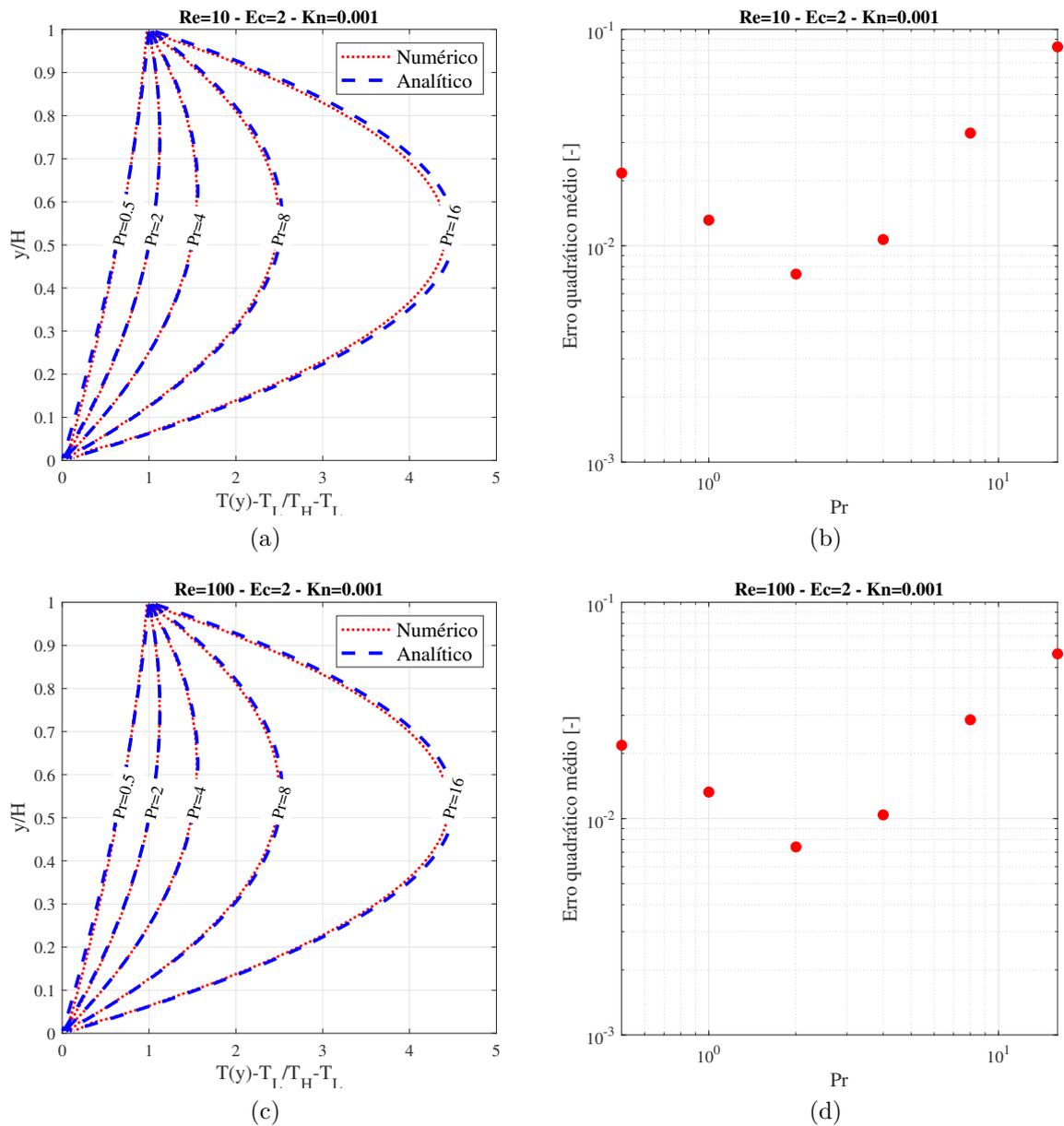


Figura 42 – Resultados para o escoamento de Couette com troca térmica com diferentes números de Prandtl para $Kn = 1e-3$, $Ec = 2$ e números de Reynolds de (a),(b) 10 e (c),(d) 100.

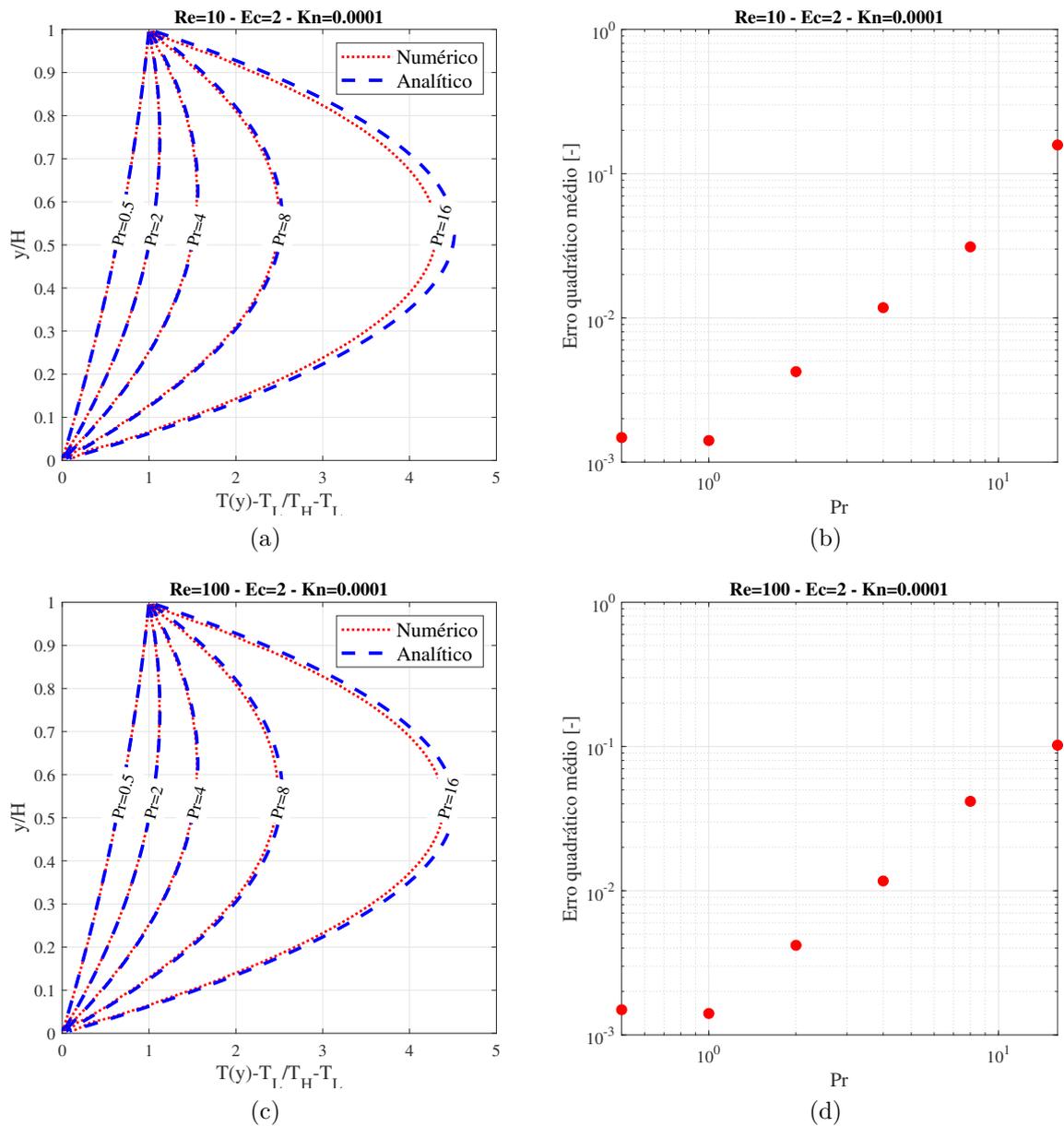


Figura 43 – Resultados para o escoamento de Couette com troca térmica com diferentes números de Prandtl para $Kn = 1e-4$, $Ec = 2$ e números de Reynolds de (a),(b) 10 e (c),(d) 100.

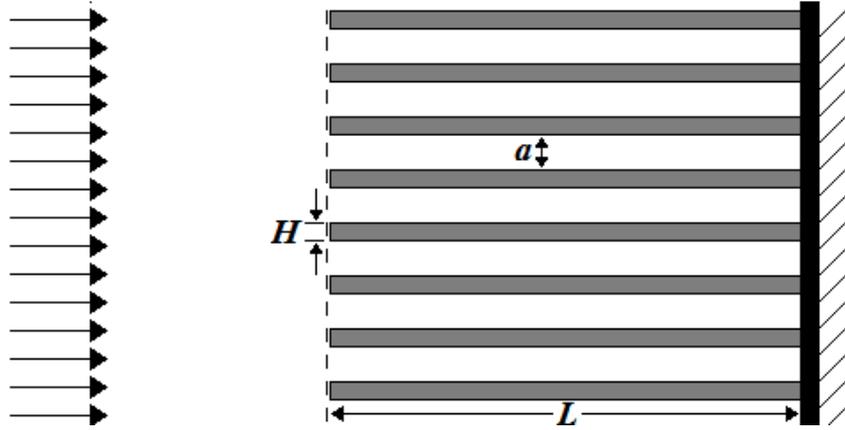


Figura 44 – Meio poroso bidimensional composto por um conjunto de aletas rígidas

sendo ρ_0 e c_s a densidade e velocidade do som no fluido, respectivamente, e

$$Z_s = -jZ_c \cot(k_c L), \quad (262)$$

a impedância de superfície, que se relaciona com a impedância do fluido equivalente ao conjunto de aletas por

$$Z_c(\omega) = \frac{\sqrt{\rho_{eff} K_{eff}}}{\phi}, \quad (263)$$

onde ϕ é a porosidade do meio poroso, ω a frequência angular e $k_c = \omega \sqrt{\rho_{eff}/K_{eff}}$ é o número de onda complexo. O fluido equivalente é, por sua vez, caracterizado pela densidade equivalente

$$\rho_{eff} = \frac{\rho_0}{1 - \frac{\tanh(\sqrt{j\omega a^2/\nu})}{\sqrt{j\omega a^2/\nu}}}, \quad (264)$$

e pelo módulo de compressibilidade equivalente

$$K_{eff} = \frac{P_0 \gamma}{1 + (\gamma - 1) \frac{\tanh(\sqrt{j \text{Pr} \omega a^2/\nu})}{\sqrt{j \text{Pr} \omega a^2/\nu}}}, \quad (265)$$

com P_0 sendo a pressão termodinâmica à densidade ρ_0 e temperatura T_0 , e γ a razão de calores específicos. Nesse modelo, se $\alpha = 0$, não há dissipação térmica, e $K_{eff} = P_0 \gamma$ e, se $\nu = 0$, não há dissipação viscosa e $\rho_{eff} = \rho_0$.

Numericamente, é possível determinar o coeficiente de absorção a partir do cálculo do coeficiente de reflexão

$$R(\omega) = \frac{P^-(\omega)}{P^+(\omega)}, \quad (266)$$

dado pela razão entre os espectros da pressão refletida $P^-(t)$ e incidente $P^+(t)$ na interface entre o fluido e o material poroso, através da relação

$$\alpha = 1 - |R(\omega)|^2. \quad (267)$$

Para o cálculo numérico do coeficiente de reflexão, uma onda incidente devido a uma variação de densidade

$$\rho^*(t) = \rho_0^* + \rho^{*'}(t), \quad t < n, \quad (268)$$

com $\rho^{*'}(t)$ dado por

$$\rho^{*'}(t) = A\mathcal{W}(n), \quad (269)$$

onde $\mathcal{W}(n)$ é uma janela do tipo *flat top* com n pontos (D'ANTONA; FERRERO, 2006), foi gerada junto à parede esquerda da geometria especificada na figura 45. Esse formato de onda incidente foi escolhido apenas por apresentar um espectro em frequência plano em baixas frequências, apesar de nenhuma diferença ter sido notada quando empregados outros formatos, como um pulso gaussiano, por exemplo. A perturbação se propaga até o conjunto de aletas, onde são registrados os históricos de densidade e temperatura, obtendo-se assim, os valores de $P^+(t)$ e $P^-(t)$. As simulações foram conduzidas com $L = 20H$, $N = 6L$, e $a = H$ ($\phi = 1/2$). As propriedades do ar a 300 K, que são de (aproximadamente) $\text{Pr} = 0,71$, $\rho_0 = 1,2 \text{ kg/m}^3$, e $\nu = 1,538 \text{ e-}5 \text{ m}^2/\text{s}$ foram adotadas, juntamente com condições de contorno de velocidades nulas e temperatura constante nas paredes. Note que, enquanto a viscosidade e a difusividade térmica podem ser impostas com a alteração dos tempos de relaxação, a velocidade do som, $c_s = \sqrt{\gamma RT_0}$, requer a especificação da razão entre calores específicos que, para o ar, é de $\gamma = 1,4$ e, na equação discreta de Boltzmann em duas dimensões, é de $\gamma = 2$ ¹. Essa diferença poderia ser contornada pela variação de R de forma a compensar esse desvio, mas isso implicaria no cálculo errôneo da pressão $P_0 = \rho_0 RT_0$. Em geral, isso não é um problema, uma vez que a velocidade do som é utilizada apenas como referência para a discretização temporal e, para pequenas variações de temperatura, espera-se que seu valor seja constante. Deve-se, contudo, ter em mente essa divergência quando a variação de temperatura é apreciável. Para tornar a simulação mais consistente com essa observação, adotou-se como referência para a temperatura o valor de $T_0 = 200 \text{ K}$, de sorte que, com $\gamma = 2$, $c_s = 338.85 \text{ m/s}$, que é um valor bastante próximo do valor de c_s em 300 K com $\gamma = 1,4$.

Na figura 46 estão indicados os sinais típicos de pressão incidente e refletido, medidos na face imediatamente anterior ao conjunto de aletas (valor médio de todos os pontos da face). O coeficiente de absorção foi calculado até 25000 Hz, de onde pode-se definir o erro em relação ao valor analítico como $E = \sqrt{\frac{\sum_i^N (\alpha(f_i)_{num} - \alpha(f_i)_{ana})^2}{N}}$, sendo N o número de

¹ Para um gás ideal monoatômico $c_p = R \frac{(D+2)}{2}$ e $c_v = R \frac{D}{2}$, resultando em $\gamma = \frac{D+2}{D}$.

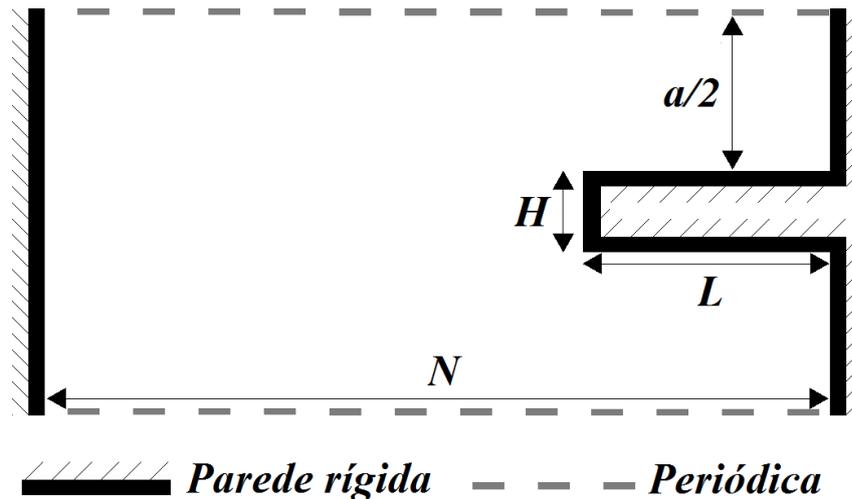


Figura 45 – Dimensões e condições de contorno do modelo numérico.

pontos no espectro de frequência. O valor desse erro para diferentes números de pontos na discretização do poro é indicado na figura 47, e o comparativo entre os resultados numérico e analítico para $a = 50$ pontos, ilustrado na figura 48.

Além da boa concordância com os valores esperados numericamente, deve-se notar os baixos valores de absorção encontrados. Um dos grandes desafios de métodos numéricos que buscam prever o ruído produzido e radiado por escoamentos é a concepção de modelos com baixa dissipação e dispersão numérica. Como destacam Colonius e Lele (COLONIUS; LELE, 2004), “ondas acústicas devem se propagar no escoamento de forma coerente, com muito pouca atenuação devido a efeitos viscosos, por longas distâncias. Níveis de dissipação e dispersão artificiais que podem ser toleráveis para flutuações hidrodinâmicas podem levar a uma atenuação inaceitável das ondas acústicas”. Conseguir capturar esses baixos valores de dissipação é um indicativo de que o método possui a baixa dissipação numérica pretendida. Como mencionado anteriormente, a teoria supõe uma separação entre as dissipações viscosa e térmica, que pode ser alcançada pela manipulação dos coeficientes de transporte, como indicado na figura 49.

A capacidade do método variar os coeficientes de transporte já foi atestada na seção anterior, e o que se propõe agora é uma abordagem diferente, a fim de testar outras funcionalidades das condições de contorno, que são a capacidade de se impor paredes adiabáticas e condições de contorno com escorregamento total. Espera-se assim, que as formações das camadas limites térmica e viscosa, que são as principais responsáveis pelo fenômeno da atenuação das ondas sonoras em dutos, seja suprimida. Para tal, nota-se que as condições de contorno cinéticas supõem que as partículas esquecem qualquer informação anterior ao impacto, sendo refletidas de volta ao domínio de acordo com a

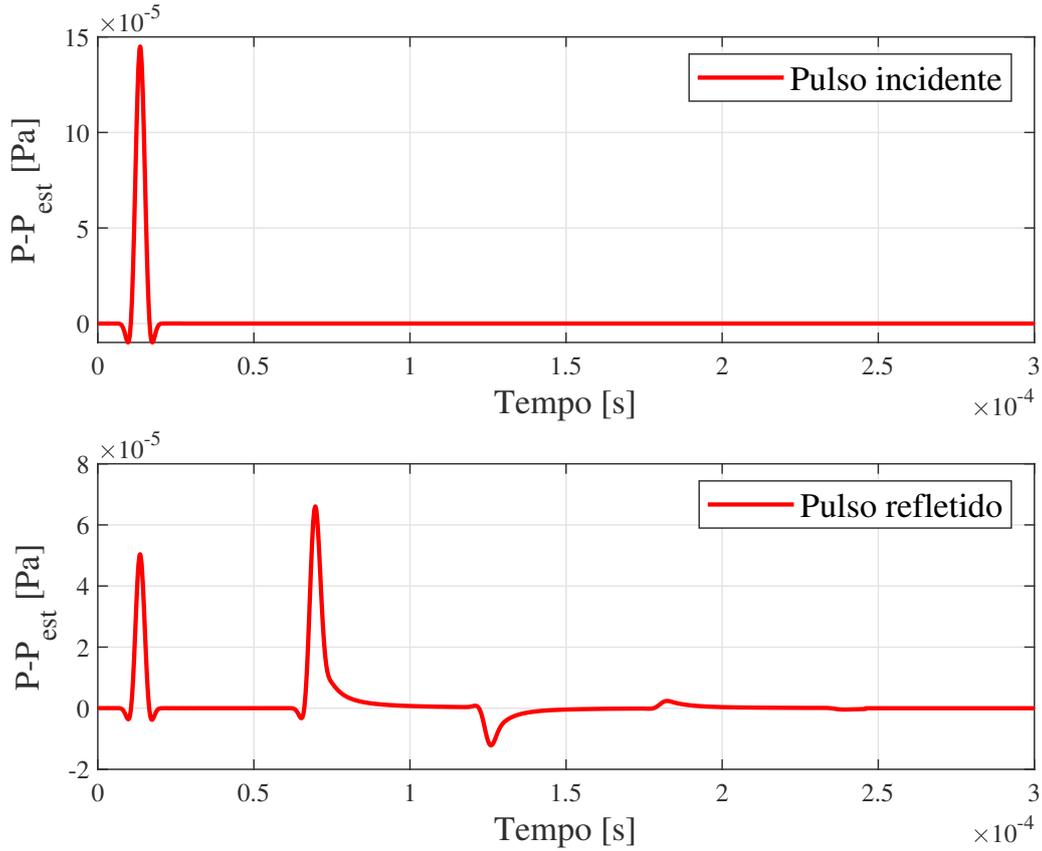


Figura 46 – Pulsos incidente e refletido junto ao conjunto de aletas. P_{est} é o valor da pressão no meio sem perturbação $P_{est} = \rho_0 RT_0$.

função de distribuição de equilíbrio à temperatura e velocidade da parede

$$f(\vec{e}_i, \vec{x}_w, t) = \frac{g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w)}{\sum_{\vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0; \vec{x}_f \in lat} g_i^{eq}(\vec{u}_w, T_w)} \sum_{\vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} f(\vec{e}_i, \vec{x}_w, t); \quad (270)$$

$$\left(\vec{x}_w \in \partial \mathbf{R}, \vec{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0, \vec{e}_i' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0, \vec{x}_f \in lattice \right).$$

Uma condição de contorno adiabática pode ser obtida, contudo, se, ao invés de se utilizar a temperatura da parede T_w na equação (270), utilizarmos a própria temperatura do ponto que deu origem à colisão T_{x_0} , resultando em uma condição tal que a derivada da temperatura em relação à direção normal à parede, junto à parede, é nula. O resultado da aplicação dessa condição de contorno é indicada na figura 50.

Já se ao invés da velocidade da parede $\vec{u}_w = \vec{u}_{w_t} + \vec{u}_{w_n}$, onde os subíndices dizem respeito às componentes tangencial (t) e normal (n) da velocidade, utilizar-se a velocidade $\vec{u}_t = (\vec{u}_{x_0} - (\vec{u}_{x_0} \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}}) + \vec{u}_{w_n}$, ou seja, mantendo a componente tangencial da velocidade do ponto de origem \vec{x}_0 , tem-se uma condição de total escorregamento e não há formação da camada limite viscosa (a derivada da componente tangencial da velocidade em relação à direção normal junto à parede é nula). O efeito dessa condição de contorno pode ser visto

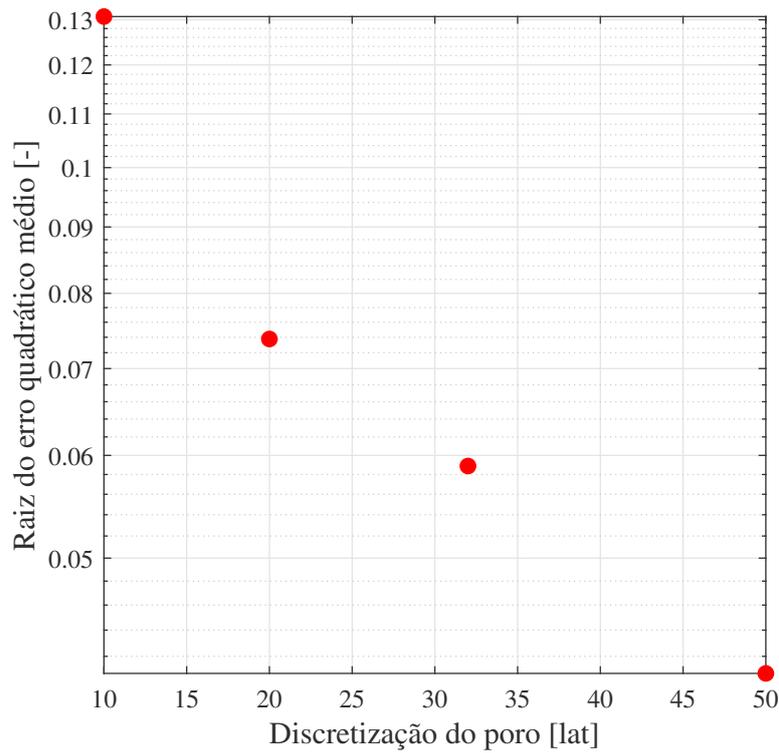


Figura 47 – Erro quadrático médio no cálculo do valor do coeficiente de absorção em relação ao número de pontos utilizados na discretização do poro.

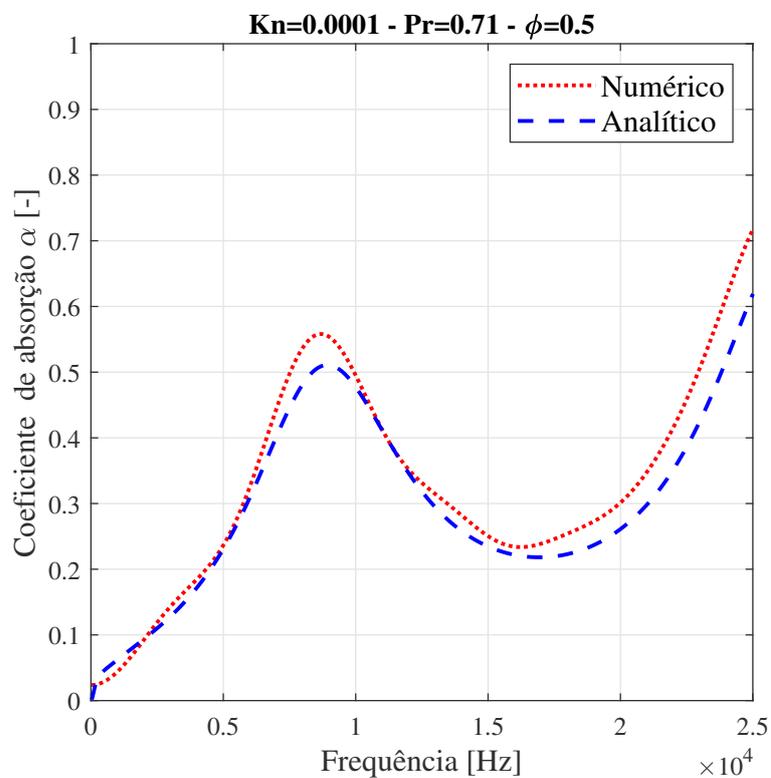


Figura 48 – Comparação analítico-numérica para o coeficiente de absorção obtido com 50 pontos na discretização do poro.

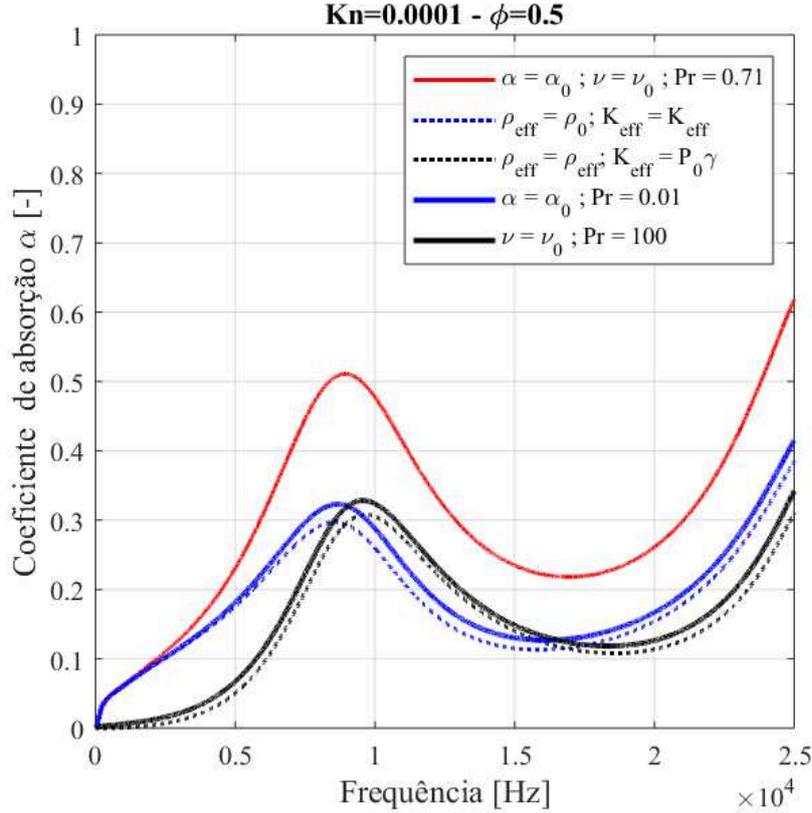


Figura 49 – Separação entre os mecanismos de dissipação viscoso e térmico pela imposição de diferentes números de Prandtl e valores limites quando $\nu = 0$ ($Pr \rightarrow 0, \rho_{eff} = \rho_0$) ou $\alpha = 0$ ($Pr \rightarrow \infty, K_{eff} = P_0 \gamma$).

na figura 51. Uma comparação entre a diferença de se aplicar as condições de contorno propostas e a manipulação dos coeficientes de transporte é mostrada na figura 52.

A concordância entre os resultados é evidente, mas o verdadeiro achado aqui é o fato de as condições de contorno se mostrarem capazes de reproduzir esses resultados. Abre-se caminho para que se possa ajustar diferentes fatores de escorregamento e de transferência de calor pelo ajuste, na função de distribuição de equilíbrio que é refletida de volta ao domínio, da velocidade $\vec{u}_{ref} = \alpha(\vec{u}_t - \vec{u}_w) + \vec{u}_w$ e da temperatura $T_{ref} = \beta(T_{x_0} - T_w) + T_w$, respectivamente. Ou seja, para $\alpha = 0$ tem-se uma condição de não-escorregamento e para $\alpha = 1$ tem-se escorregamento total, e qualquer valor entre esses dois extremos levará a uma condição de escorregamento intermediário. Analogamente, o fator β rende uma condição de parede isotérmica para $\beta = 0$ e adiabática para $\beta = 1$. Essa metodologia é similar à teoria de um núcleo de espalhamento parcialmente difuso (CERCIGNANI; LAMPIS, 1971; LORD, 1991, 1995; STRUCHTRUP, 2013), mas não possui o mesmo rigor teórico, devendo ser encarada, como foi apresentada, como um indicativo da sua funcionalidade. Condições de contorno para modelos de alta ordem da equação discreta de Boltzmann ainda são uma área bastante incerta, e as condições de contorno difusas parecem ser o melhor caminho na elucidação dessa questão.

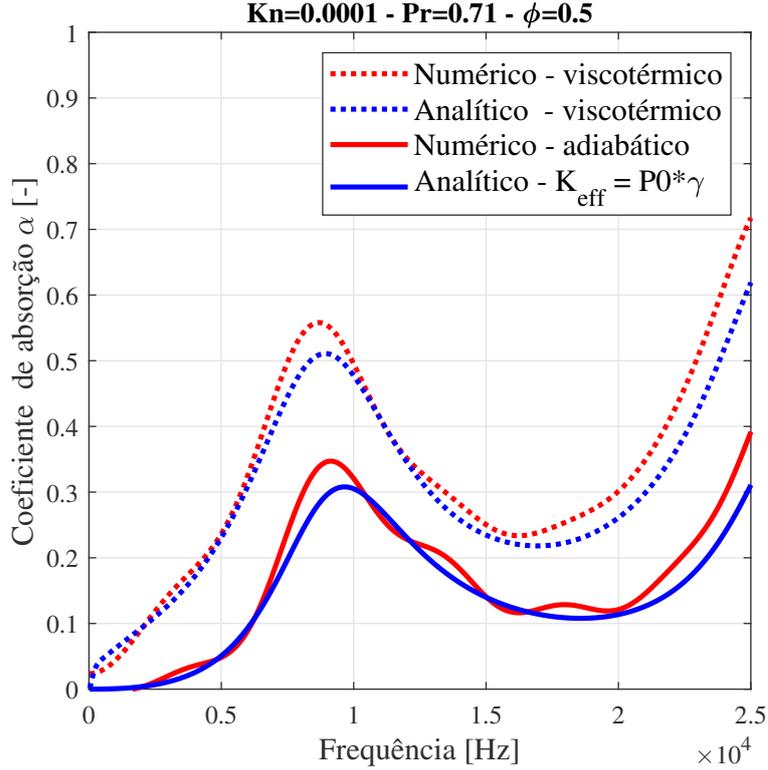


Figura 50 – Aplicação de condições de contorno adiabáticas evitando a formação da camada limite térmica, resultando exclusivamente em mecanismos de absorção viscosos.

4.5 FORÇAS EXTERNAS

Quando forças externas são consideradas, a Equação de Boltzmann toma a forma

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + (\vec{g}^e + \vec{g}^{ld}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \Omega, \quad (271)$$

onde o efeito das forças sobre a função de distribuição aparece no termo

$$(\vec{g}^e + \vec{g}^{ld}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t), \quad (272)$$

onde \vec{g}^e são forças externas e \vec{g}^{ld} são forças de interação intermoleculares de longa distância, importantes quando o fluido considerado se torna muito denso. A incorporação das forças requer a avaliação do gradiente em relação à velocidade $\frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$, que também pode ser obtido considerando a função de distribuição em séries de Hermite

$$f^N(\vec{\xi}_0) = \omega(\vec{\xi}_0) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\rho^*, \vec{u}_0, \theta) \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{\xi}_0), \quad (273)$$

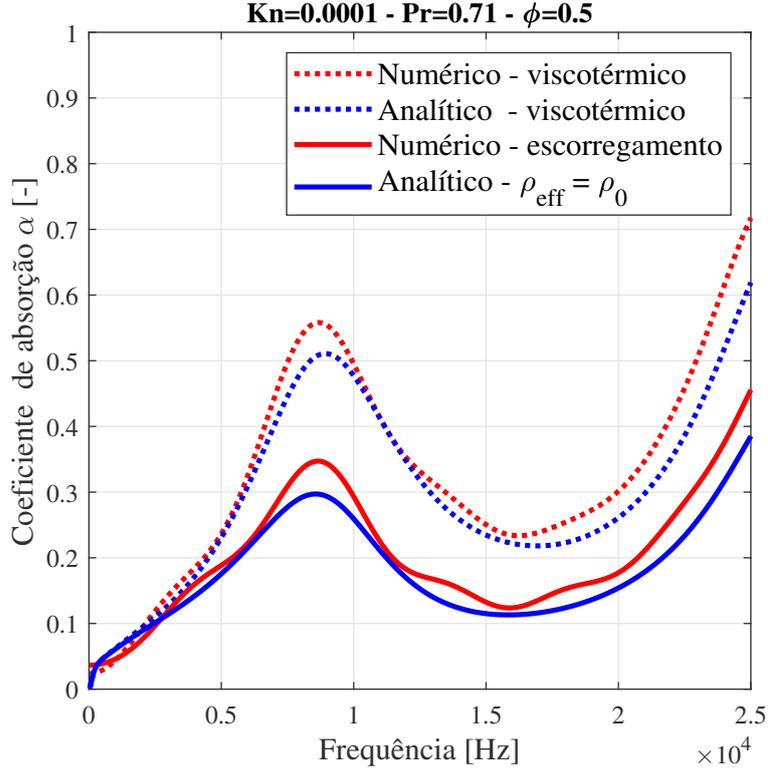


Figura 51 – Aplicação de condições de contorno de escorregamento evitando a formação da camada limite viscosa, resultando exclusivamente em mecanismos de absorção devido às trocas térmicas.

de onde

$$\nabla_{\vec{\xi}_0} f^N(\vec{\xi}_0) = \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\rho^*, \vec{u}_0, \theta) \nabla_{\vec{\xi}_0} \left(\omega(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{\xi}_0) \right) \quad (274)$$

e, uma vez que,

$$\mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{\xi}_0) = \frac{(-1)^n}{\omega(\vec{\xi}_0)} \nabla_{\vec{\xi}_0}^n \omega(\vec{\xi}_0), \quad (275)$$

obtém-se

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{\xi}_0} \left(\omega(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{\xi}_0) \right) &= (-1)^n \nabla_{\vec{\xi}_0}^{n+1} \omega(\vec{\xi}_0) = \\ &= -\omega(\vec{\xi}_0) \frac{(-1)^{n+1}}{\omega(\vec{\xi}_0)} \nabla_{\vec{\xi}_0}^{n+1} \omega(\vec{\xi}_0) = -\omega(\vec{\xi}_0) \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_{n+1}}^{(n+1)}, \end{aligned} \quad (276)$$

e, portanto,

$$\nabla_{\vec{\xi}_0} f^N(\vec{\xi}_0) = -\omega(\vec{\xi}_0) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\rho^*, \vec{u}_0, \theta) \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_{n+1}}^{(n+1)}(\vec{\xi}_0). \quad (277)$$

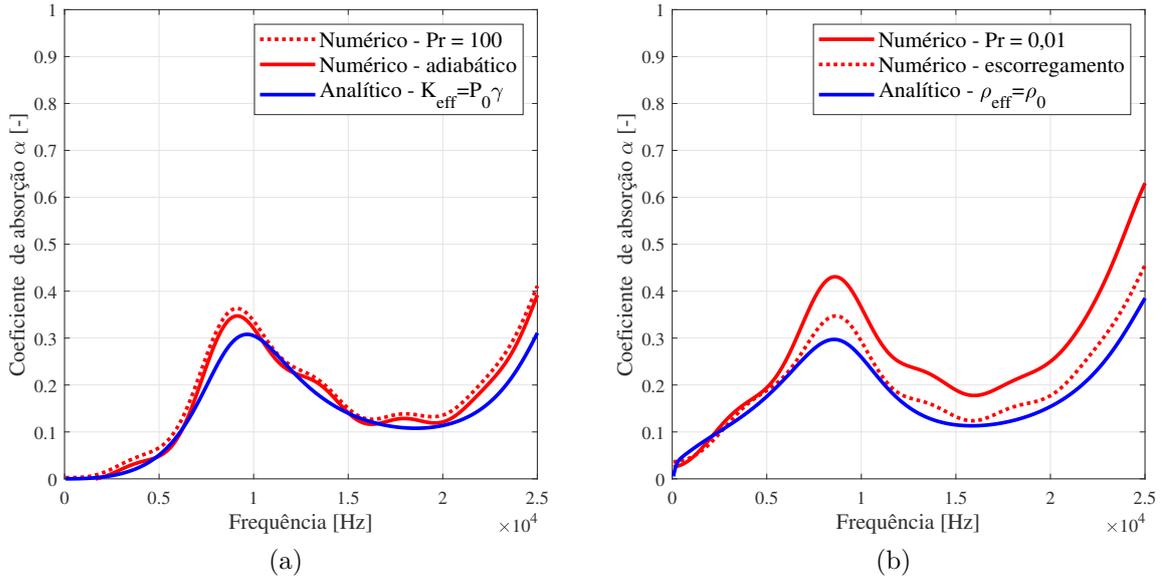


Figura 52 – Comparativo entre o coeficientes de absorção obtidos pela manipulação dos coeficientes de transporte e pela aplicação das condições de contorno (a) adiabática e (b) de escorregamento.

O termo referente às forças externas tem então a forma

$$\vec{g} \cdot \nabla_{\vec{\xi}_0} f^N(\vec{\xi}_0) = -\omega(\vec{\xi}_0) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\rho^*, \vec{u}_0, \theta) g_{\alpha_{n+1}} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_{n+1}}^{(n+1)}(\vec{\xi}_0). \quad (278)$$

Com $\vec{g} \cdot \nabla_{\vec{\xi}_0} f^N(\vec{\xi}_0) = F(\vec{\xi}_0)$, tem-se, para a forma discreta,

$$F_i = -w_i \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\rho^*, \vec{u}^*, \theta) g_{\alpha_{n+1}} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_{n+1}}^{(n+1)}(\vec{e}_i) \quad (279)$$

onde,

$$a_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\rho^*, \vec{u}^*, \theta) = \sum_{i=0}^{b-1} f_i \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{e}_i). \quad (280)$$

Assim como as condições de contorno, a forma de incorporação de forças externas na equação discreta de Boltzmann varia muito (MOHAMAD; KUZMIN, 2010), sendo a apresentada aqui apenas uma delas.

4.5.1 Escoamento de Poiseuille movido por uma força externa

O escoamento em regime permanente que se estabelece em um canal com seção transversal constante onde uma diferença de pressão é imposta às duas extremidade do canal é chamado de escoamento de Poiseuille. Este escoamento é movido pelo gradiente de pressão ∇P , que tem o mesmo efeito, na equação de balanço da quantidade de movimento,

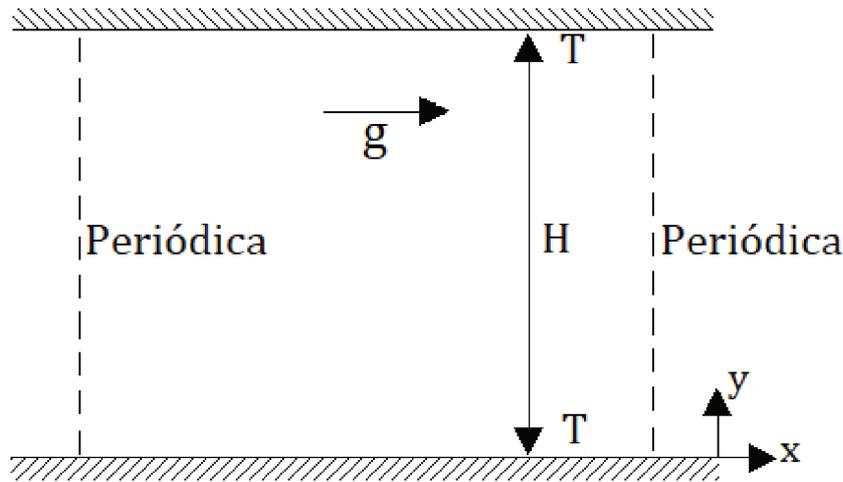


Figura 53 – Dimensões e condições de contorno para o escoamento de Poiseuille.

que a ação de uma força de corpo externa $\vec{g}^e = -\nabla P$. Em regime permanente, o perfil de velocidade do escoamento de Poiseuille (incompressível) entre duas placas planas estacionárias, mantidas à mesma temperatura, sob a ação de uma força externa constante g é dado por

$$u_x(y) = \frac{g}{2\nu}y(H - y), \quad (281)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido e H é a distância de separação das placas. A simulação numérica desse escoamento é análoga ao escoamento de Couette, com a diferença de que ambas as paredes possuem velocidade nula e a mesma temperatura, como indicado na figura 53. A velocidade no centro do canal esperada é de $u_x(H/2) = gH^2/8\nu$, que pode ser utilizada para o cálculo do número de Reynolds do problema, de sorte que, para uma dada viscosidade e distância entre placas (número de Knudsen), um aumento no número de Reynolds requer o aumento da força de corpo g .

Desta feita, os resultados para a velocidade serão apresentados em seus valores físicos, em m/s, para diferentes números de Reynolds e Knudsen. As propriedades físicas do fluido utilizadas nas simulações foram $\nu = 1.568 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$, $T = 200 \text{ K}$, $\text{Pr} = 1$ e $R = 287 \text{ J/KgK}$. Como, na equação discreta de Boltzmann, $\gamma = 2$, a velocidade do som isentrópica é dada por $c_s = \sqrt{\gamma RT} = 338,8 \text{ m/s}$. A distância H é obtida a partir do número de Knudsen, $\text{Kn} = \nu/Hc_s$, arbitrado, e a velocidade máxima, obtida pelo número de Reynolds, $\text{Re} = Hu_{max}/\nu$, imposto. O valor da força de corpo $g \text{ m/s}^2$ deriva da expressão para a velocidade máxima em $u_{max} = gH^2/8\nu$.

Na figura 54 estão expostas as comparações entre os resultados simulados e os esperados analiticamente para várias combinações de Re e Kn , juntamente com o erro quadrático médio no perfil de velocidade. Os erros são bastante grandes quando o número de Mach aumenta, resultado esperado, devido aos efeitos de compressibilidade. Outro fator

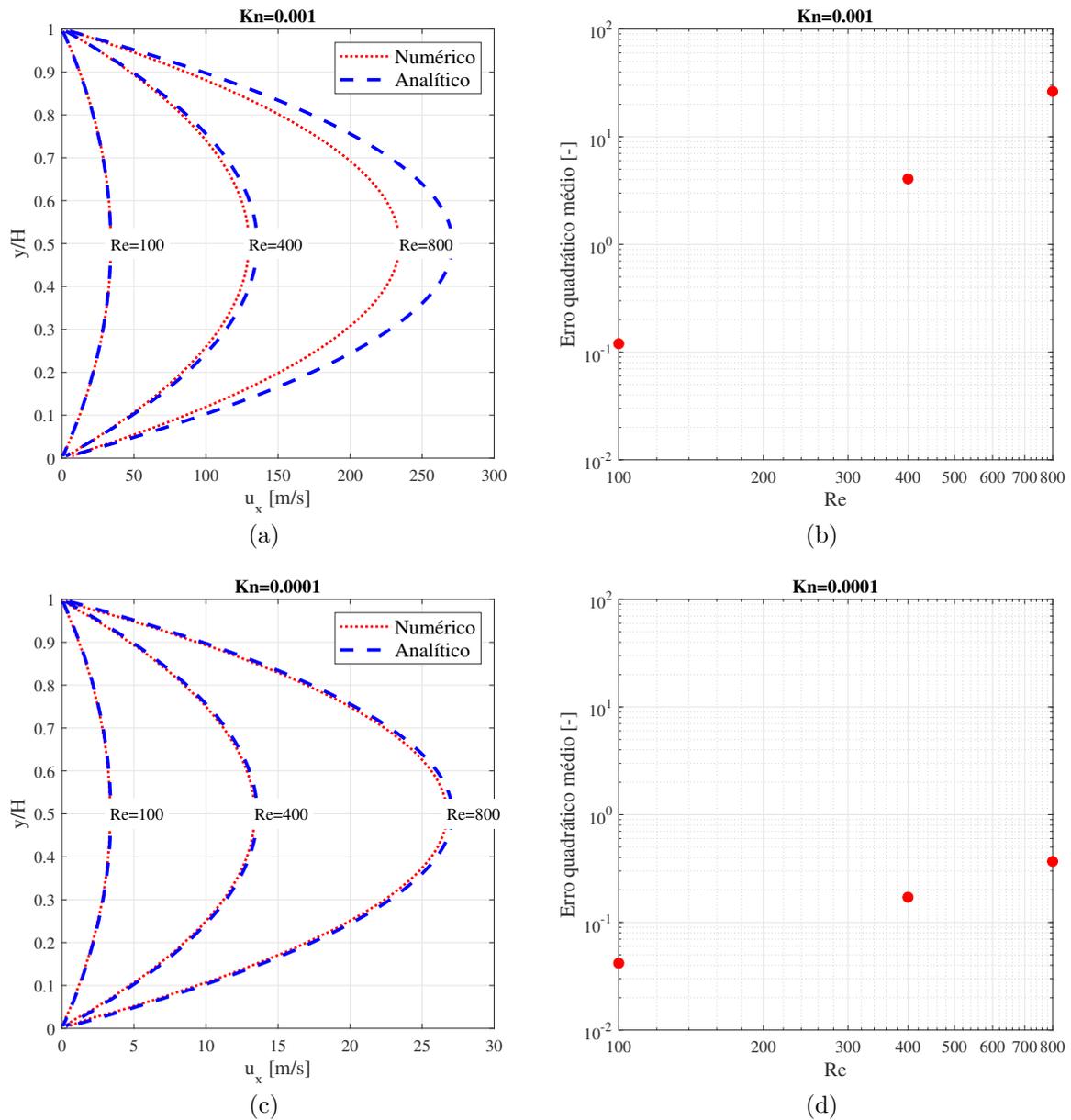


Figura 54 – Resultados para o escoamento de Poiseuille com diferentes números de Reynolds e Knudsen.

que contribui com a divergência dos resultados é o perfil de temperatura que, na formulação contínua, deve ser constante mas, de fato, apresenta um perfil tal qual indicado na figura 55, onde também é indicado o perfil de densidade, que claramente não é constante. Os desvios da representação hidrodinâmica em relação aos resultados obtidos com modelos cinéticos, mesmo para escoamentos simples, são conhecidos (MANSOUR; BARAS; GARCIA, 1997; TODD; EVANS, 1997). Os resultados, contudo, estão de acordo com simulações mais completas, como a simulação direta de Monte Carlo (SDMC, na sigla em inglês) (ZHENG; GARCIA; ALDER, 2002), por exemplo. Uma das principais características previstas para esse escoamento na teoria cinética é a existência de um mínimo local no perfil de temperatura no centro do canal, incapaz de ser obtido pelas NSE, mesmo quando correções

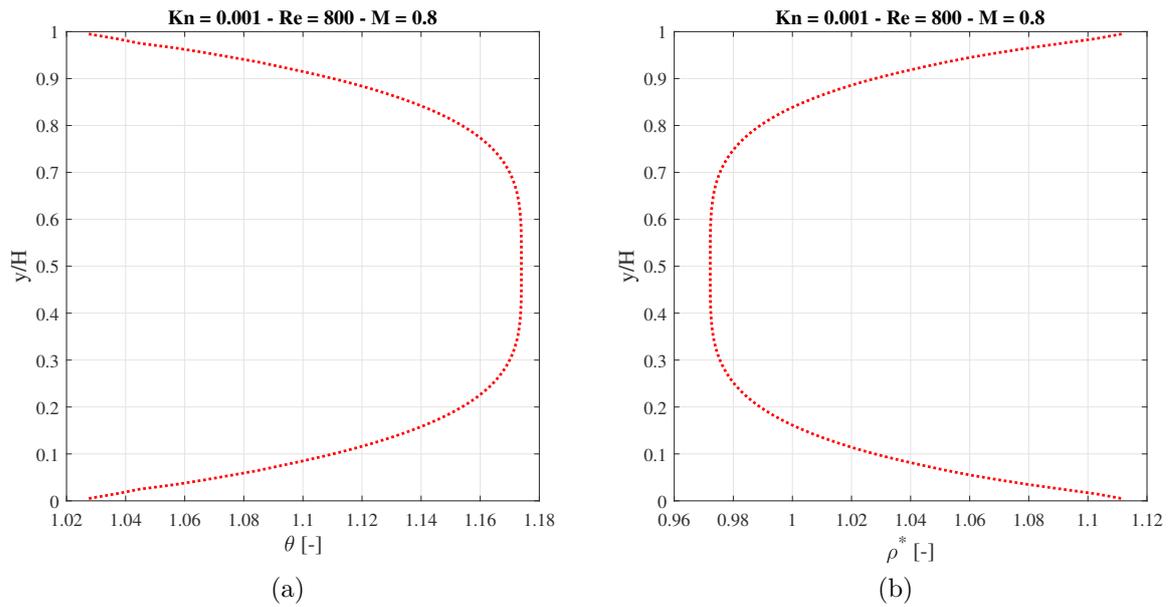


Figura 55 – Perfis de temperatura e densidade no escoamento de Poiseuille com baixo número de Knudsen e alto número de Reynolds.

para o escorregamento e o salto de temperatura são aplicados.

4.5.2 Convecção natural em uma cavidade quadrada

Os testes anteriores cobrem boa parte dos problemas enfrentados em simulações de fluidos ideais. Encerrando essa parte, é apresentado um problema que, de certa forma, combina todos os efeitos avaliados separadamente nas seções anteriores: a convecção natural em uma cavidade quadrada (DE VAHL DAVIS, 1983). O problema segue as dimensões e condições de contorno indicadas na figura 56, com $H = L$. O problema é caracterizado, principalmente, pelo número de Rayleigh $Ra = Pr \frac{g\beta(T_H - T_L)L^3}{\nu^2}$, sendo β o coeficiente de expansão térmica $\beta = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P$ que, para um gás ideal, é dado por $\beta = 1/T$. Na figura 57 são indicadas as linhas de corrente sobrepostas ao campo de temperatura para $Ra = 10000$, que apresentam boa concordância (qualitativa) com os resultados de (HORTMANN; PERIĆ; SCHEUERER, 1990). 100 pontos foram utilizados na discretização de H .

Os bons resultados obtidos neste capítulo conferem confiabilidade ao método, e apontam para a possibilidade de extrapolar as simulações para casos onde não há resultados para comparações, onde os resultados são tão confiáveis quanto o próprio método empregado. O método pode então ser utilizado como uma espécie de laboratório numérico para prever e estudar fenômenos complexos. Um exemplo dessa aplicação será apresentado no próximo capítulo.

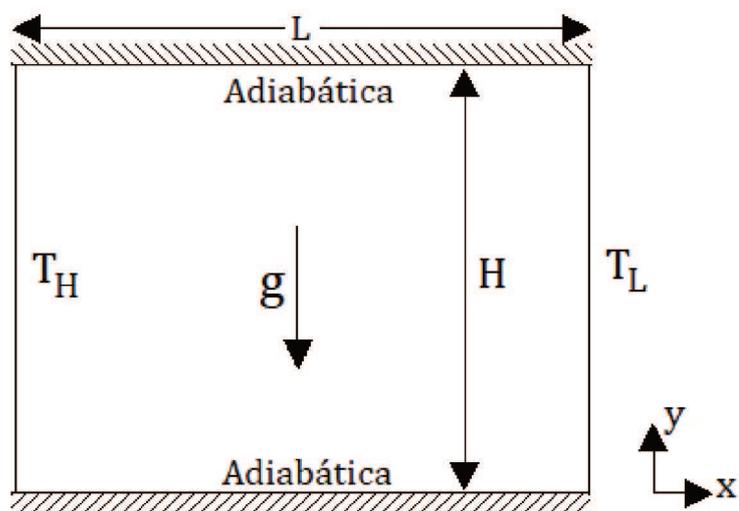


Figura 56 – Dimensões e condições de contorno do problema da convecção natural em uma cavidade quadrada.

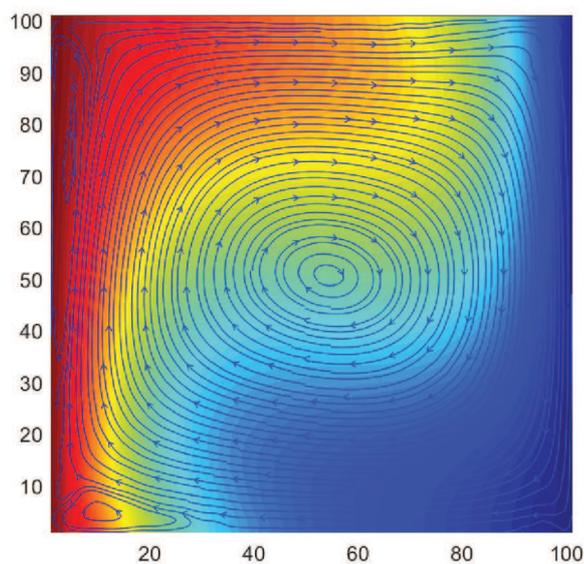


Figura 57 – Linhas de corrente para o problema da convecção natural em uma cavidade quadrada.

5 ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL TURBULENTO ATRAVÉS DE UM CANAL SUBITAMENTE EXPANDIDO

5.1 INTRODUÇÃO

As simulações apresentadas no capítulo anterior não só possuem um caráter validativo como também apontam para a possibilidade de se empregar os modelos de alta ordem em problemas que vão além das limitações que hoje cerceiam a equação discreta de Boltzmann, onde a aplicação do método ainda é restrita, que são problemas que envolvem escoamentos turbulentos, compressíveis e com troca térmica (QIU *et al.*, 2018; SAADAT; BÖSCH; KARLIN, 2019; FRAPOLLI; CHIKATAMARLA; KARLIN, 2016). Um caso simples onde esses limites podem ser testados é o caso de um escoamento confinado que passa por um súbito aumento de área na seção transversal do canal. Fenômenos complexos como a separação da camada limite, recirculação e transição à turbulência estão presentes nesse problema, somado à presença de fronteiras sólidas que limitam o escoamento e aumentam as dificuldades computacionais (XIAO *et al.*, 2019). Por ser geometricamente simples e fenomenologicamente complexo, esse tipo de escoamento é objeto de estudo de vários trabalhos numéricos e experimentais (FEARN; MULLIN; CLIFFE, 1990; DRIKAKIS, 1997; DITARANTO; HALS, 2006; ALLEBORN *et al.*, 1997; DING; WU, 2012; LE; MOIN; KIM, 1997). A maioria dos trabalhos numéricos, entretanto, limitam-se aos escoamentos com baixos números de Reynolds e incompressíveis, situações nas quais o fluxo é majoritariamente laminar e estacionário e, em escoamentos com altos números de Reynolds, onde espera-se um regime turbulento, diferentes modelos de turbulência, cuja precisão não pode ser atestada, se fazem necessários (PONT-VÍLCHEZ *et al.*, 2019). O objetivo da simulação apresentada a seguir é expor como a equação discreta de Boltzmann tem potencial para suplantiar essas dificuldades e figurar como uma alternativa viável à Simulação Numérica Direta das Equações de Navier-Stokes.

5.2 GEOMETRIA E CONDIÇÕES DE CONTORNO

Uma geometria com as dimensões indicadas na figura 58 foi utilizada nas simulações, onde outro tipo de condição de contorno, que até então não havia sido tratada, aparece indicada esquematicamente pelas linhas tracejadas, que são fronteiras permeáveis abertas. As condições de contorno abertas devem permitir o fluxo de massa, ao mesmo tempo em que imponham uma determinada densidade e/ou temperatura e interfiram de forma mínima no desenvolvimento do escoamento no interior do domínio. Nesse caso, as condições de contorno periódicas, utilizadas no capítulo anterior, não são apropriadas, uma vez que se espera uma variação de densidade, velocidade e temperatura entre a entrada e a saída (o simples fato de se ter geometrias diferentes na entrada e na saída já inviabilizaria o uso de fronteiras periódicas), de sorte que outro tipo de fronteira aberta deve ser implementada.

Em geral, a forma como essa dificuldade é contornada é pela imposição de algum perfil de velocidade, densidade e temperatura na entrada do domínio, e condições de derivadas nulas na direção (esperada) do escoamento na saída do domínio. De imediato pode-se apontar uma limitação dessa abordagem, que é a imposição de um fluxo de massa fixo (velocidade e densidade prescritas na entrada) ao sistema, independente da variação de pressão existente entre a entrada e a saída. Essa formulação (prescrever simultaneamente diferença de pressão e vazão) pode, como mencionado em (FLEKKØY; DELGADO-BUSCALIONI; COVENEY, 2005), ser tão fisicamente inconsistente quanto se impor simultaneamente a uma partícula uma força e uma velocidade. O problema deve então tratar o fluxo de massa como uma variável da simulação, e a diferença de pressão como uma constante (NICHOLLS *et al.*, 2012; DOCHERTY *et al.*, 2014).

A solução adotada para as condições de contorno abertas no presente trabalho é uma modificação das condições de contorno utilizadas em (ZHENG; GARCIA; ALDER, 2002). No início de cada iteração, as funções de distribuição na entrada, $f_{i_e}(\vec{x}, t)$, são substituídas por seus valores de equilíbrio como

$$f_{i_e}(\vec{x}, t) = f_i^{eq}(\rho_e^*, \theta_e, \vec{u}_e(\vec{x} + 1\hat{i}, t - 1)), \quad (282)$$

onde ρ_e^* é a densidade desejada na entrada e θ_e a temperatura desejada, definindo, assim, a pressão. Para a velocidade, adota-se a componente normal à condição de contorno no ponto adjacente na iteração anterior, ou, já que a normal para essa geometria é paralela ao eixo x ,

$$\vec{u}_e = u_e \hat{i} + 0\hat{j}. \quad (283)$$

Dessa forma, a velocidade evolui de forma independente e possui derivada nula na direção normal à condição de contorno. Analogamente, na saída,

$$f_{i_s}(\vec{x}, t) = f_i^{eq}(\rho_s^*, \theta_s, \vec{u}_s(\vec{x} - 1\hat{i}, t - 1)). \quad (284)$$

A simples imposição de uma função de distribuição de equilíbrio na entrada e na saída, contudo, não é suficiente, já que haverá uma descontinuidade na interface sempre que uma função de distribuição de não equilíbrio atingir o final do domínio. Para evitar essa descontinuidade, camadas de absorção, também indicadas na figura, foram implementadas. Camadas de absorção são regiões onde a dissipação é gradativamente aumentada até um valor onde somente a função de distribuição de equilíbrio será a resultante do processo de colisão. Tomando como exemplo o modelo BGK,

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t + \delta) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau}, \quad (285)$$

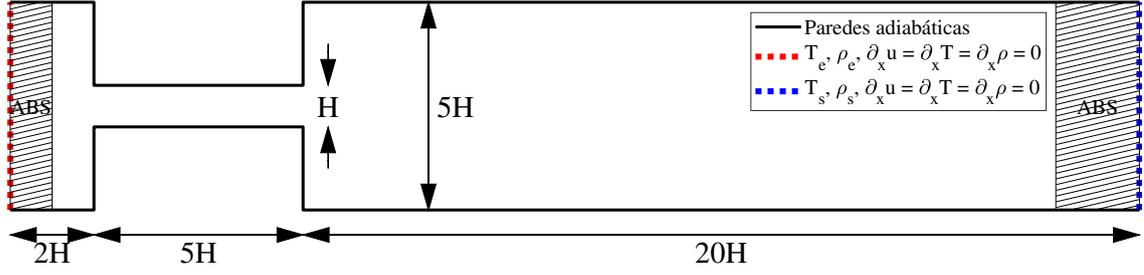


Figura 58 – Dimensões e condições de contorno para o problema da expansão súbita.

se a função f_i for reescrita como a soma das suas partes de equilíbrio e não-equilíbrio, $f_i = f_i^{eq} + f_i^{neq}$, tem-se que

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t + \delta) = f_i^{eq}(\vec{x}, t) + f_i^{neq}(\vec{x}, t) \left(1 - \frac{1}{\tau}\right). \quad (286)$$

Nota-se que quando $\tau = 1$, a função de distribuição resultante do processo de colisão é a própria função de distribuição de equilíbrio. Na camada de absorção, o tempo de relaxação τ varia espacialmente, $\tau = \tau(\vec{x})$. A forma da função $\tau(\vec{x})$ pode variar, mas em geral tem-se que em $\vec{x} = 0$, τ possui o valor estabelecido para a simulação, τ_0 , e no final da camada de absorção, τ possui um valor unitário (XU; SAGAUT, 2013). A separação da função de distribuição em suas componentes de equilíbrio e não-equilíbrio é também o cerne do método da regularização (MATTILA; PHILIPPI; HEGELE, 2017; LATT; CHOPARD, 2006), que aumenta significativamente a estabilidade da simulação, sendo, por essa razão, também utilizada aqui. O aumento gradual da dissipação em uma camada de absorção é também a base para a construção de algumas condições de contorno que visam minimizar o efeito de reflexões de ondas acústicas nas fronteiras computacionais (XU; SAGAUT, 2013). Nos resultados apresentados aqui o efeito dessas reflexões é minimizado mas não suprimido, de forma que reflexões podem influenciar de alguma forma o campo hidrodinâmico resultante.

Os valores, em unidades físicas, adotados na simulação foram: $T_e = 207,7$ K, $\rho_e = 4,8$ Kg/m³, $T_s = 207,7$ K, $\rho_s = 4.728$ kg/m³, $Pr = 0,71$, $\nu = 1,568e-5$ m²/s, $H = 0,5e-3$ m e $R = 287,0549$ J/kgK. Com esses valores, a razão de pressão entre a saída e a entrada é de 0,985, resultando em um número de Reynolds com base na velocidade média e na altura H da saída do canal de $Re = 1200$ e em um número de Mach de $Ma = 0,11$. Como condição inicial, a todos os pontos foram impostas funções de distribuição de equilíbrio com velocidade nula e temperatura e densidade iguais aos valores na entrada. A diferença de pressão foi imposta gradativamente através do abaixamento da densidade atribuída à saída por uma rampa linear de 10000 iterações. 50 pontos foram utilizados na discretização da dimensão H , resultando em $\delta t = 3,4215e-8$ s/ite. A cada 1000 iterações, todas as funções de distribuição do domínio foram armazenadas, permitindo a reconstrução de qualquer campo hidrodinâmico a cada 3,4215e-5 s.

5.3 RESULTADOS

5.3.1 Vazão mássica

Conforme mencionado, a vazão mássica não deve ser imposta simultaneamente à diferença de pressão, devendo a simulação ser capaz de determinar seu valor para uma dada razão de pressões. O problema de se estimar a vazão dada uma diferença de pressão é bastante comum no projeto de tubos capilares, por exemplo (RASTI; JEONG, 2017). A figura 59 contém a evolução da vazão mássica medida instantaneamente ao longo do tempo

$$\dot{m} = \sum_{j=1}^n \rho_j u_j \Delta y, \quad (287)$$

tanto na entrada quanto na saída do domínio, juntamente com a vazão mássica média até o tempo considerado.

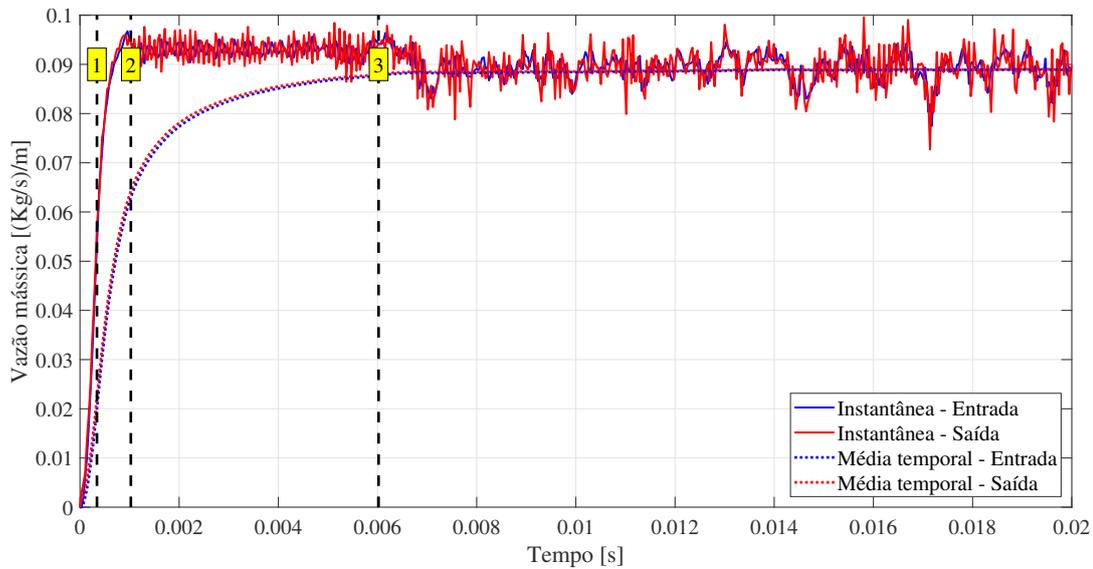


Figura 59 – Vazão mássica na seção de entrada e na seção de saída do sistema ao longo do tempo.

Não há o estabelecimento (até o tempo simulado) de um regime estacionário, o que indica que as condições de contorno operam de forma dinâmica, tentando se adequar às oscilações que o escoamento impõem. Após algum tempo, contudo, a vazão mássica média não varia e as oscilações instantâneas ocorrem de maneira (aparentemente) não periódica. Nota-se claramente três regimes distintos no padrão temporal da vazão mássica, destacados e indicados na figura.

1. O final da rampa de abaixamento de pressão.
2. O final de um regime suave de aumento do fluxo de massa dando origem a grandes oscilações de alta frequência.

3. A supressão das oscilações de alta frequência dando origem a uma oscilação ao redor de um valor de equilíbrio.

As diferenças no padrão encontrado na vazão mássica se devem aos diferentes regimes de desprendimento de vórtices que ocorrem no escoamento ao longo do tempo.

5.3.2 dinâmica de desprendimento de vórtices

Desde o início da simulação até o ponto 2 indicado na figura 59, a dinâmica do escoamento pode ser entendida como indicada nas figuras 60-63.

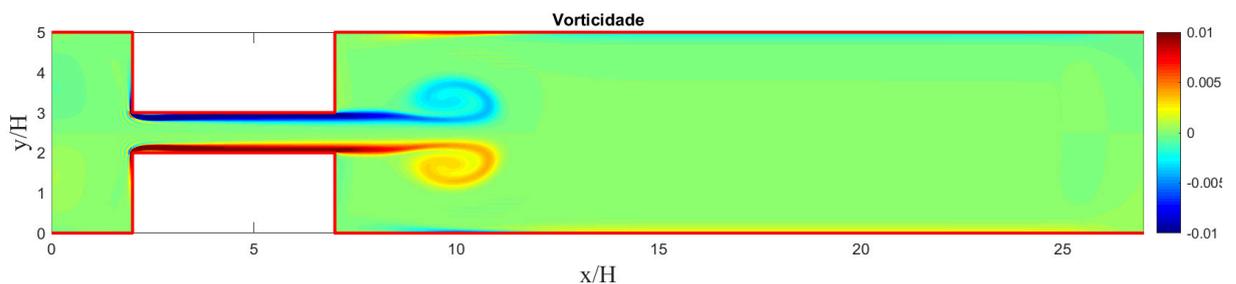


Figura 60 – Vorticidade em $t = 5,1322e-04$ s. Ao deixar o canal, dois vórtices se formam e são deslocados por convecção em direção à saída do domínio.

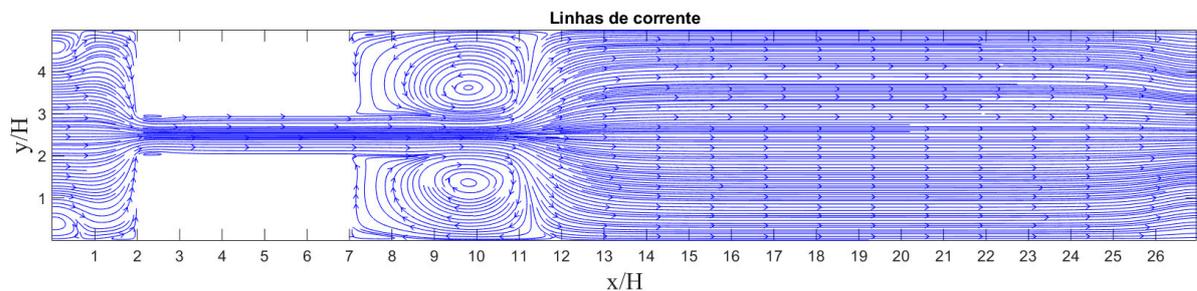


Figura 61 – Linhas de corrente em $t = 5,1322e-04$ s. Na entrada do domínio formam-se duas regiões de recirculação. Regiões de recirculação também se formam após a passagem dos vórtices. Na saída do domínio, tem-se um escoamento laminar.

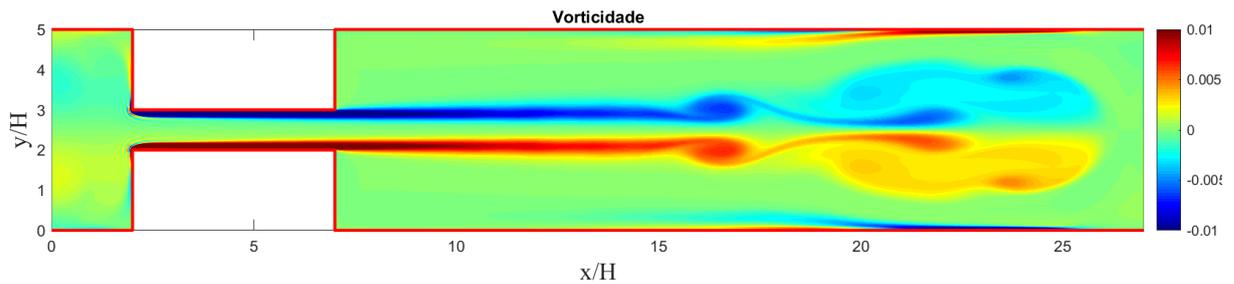


Figura 62 – Vorticidade em $t = 0,0011$ s. As estruturas de vórtices coalescem e geram vórtices maiores. Novos vórtices se formam na camada limite separando o escoamento no centro do canal das zonas de recirculação.

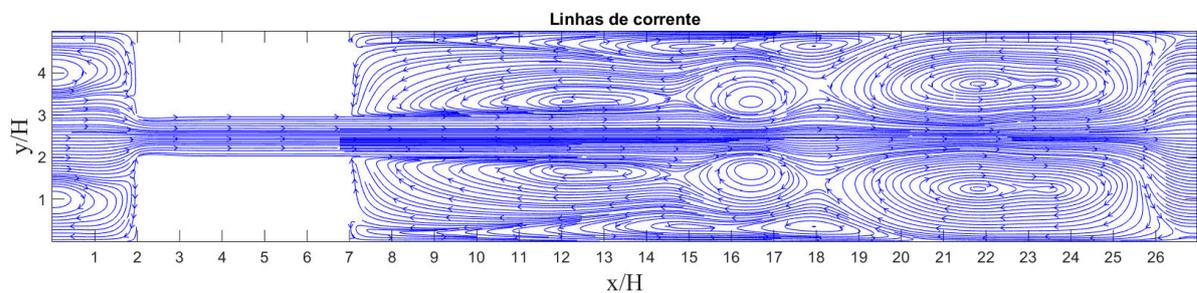


Figura 63 – Linhas de corrente em $t = 0,0011$ s. As regiões de recirculação na entrada do domínio se intensificam. As regiões de recirculação resultantes das passagens dos vórtices geram um confinamento para o escoamento no centro do domínio. Essa condição é imediatamente anterior ao ponto 2.

Observa-se das figuras 60-63 que os vórtices formados no interior da tubulação ainda não atingiram o final do domínio, onde o escoamento continua laminar, o que explica a suavidade na curva da vazão mássica. As zonas de recirculação claramente confinam o escoamento, sendo este uma espécie de confinamento dinâmico, que muda de forma ao longo do tempo, de acordo com a posição das zonas de recirculação que, por sua vez, são induzidas pelos vórtices. Uma vez que esse confinamento atinge a saída do domínio de simulação, a vazão mássica passa a ser ditada justamente pela dinâmica dessa zona de confinamento, que passa ora a restringir, ora a liberar a passagem de massa, causando as oscilações observadas na figura 59.

As figuras 64 e 65 resumem que se passa entre os pontos 2 e 3 indicados na figura (59), que é uma sequência de desprendimentos e coalescência de vórtices. As estruturas se assemelham às instabilidades de Kelvin-Helmholtz, que são tidas como um importante fenômeno de transição à turbulência (THORPE, 2012).

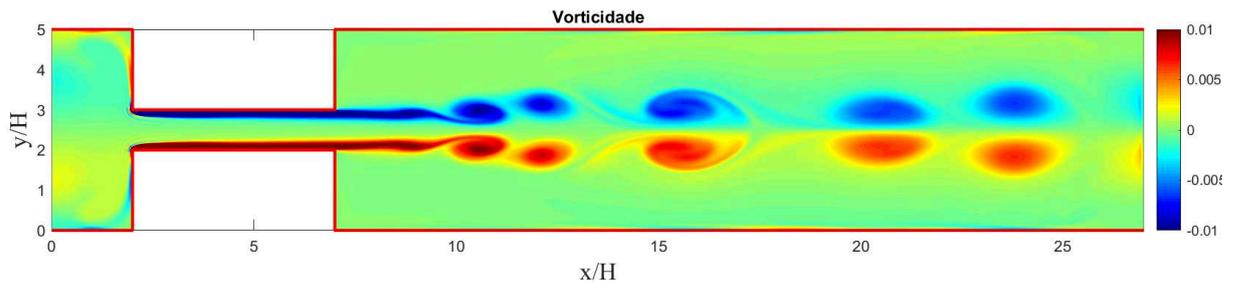


Figura 64 – Vorticidade em $t = 0,0048$ s. O escoamento se encontra confinado por uma esteira de vórtices, de diferentes tamanhos e formas.

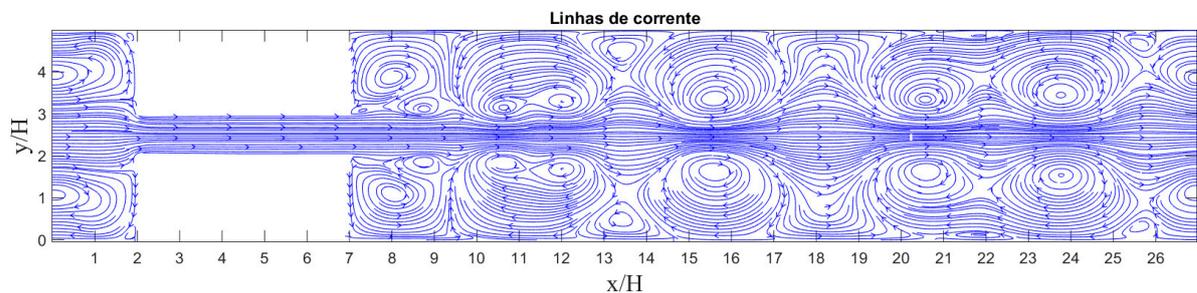


Figura 65 – Linhas de corrente em $t = 0,0048$ s. O escoamento é totalmente simétrico, com inúmeras zonas de recirculação fora do núcleo do escoamento.

O acompanhamento quadro a quadro de uma sequência de vórtices permite elucidar de maneira mais coesa a dinâmica do fenômeno que se repete entre os pontos 2 e 3 (figura 59). As figuras 66-70 possuem intervalo de tempo de $3,4215 \times 10^{-5}$ s entre si e, mesmo num intervalo de tempo tão curto, é difícil captar todos os detalhes do escoamento. Para tornar a análise a mais clara possível, são plotadas, em cada figura, o campo de vorticidade de toda a geometria, onde é indicada a área utilizada para uma aproximação detalhada onde são sobrepostas as linhas de corrente naquele instante de tempo.

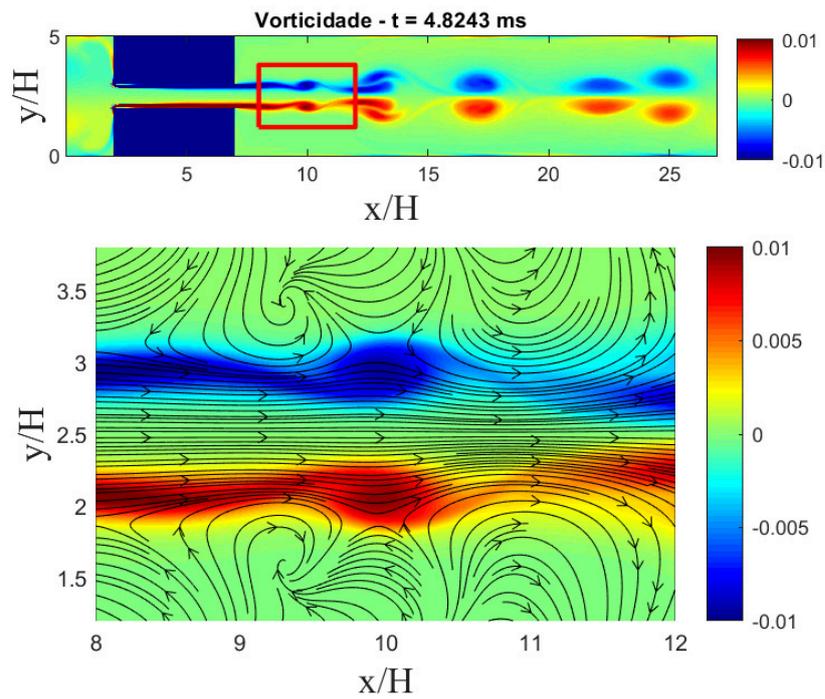


Figura 66 – Detalhe do surgimento de um vórtice na camada limite com as linhas de corrente sobrepostas.

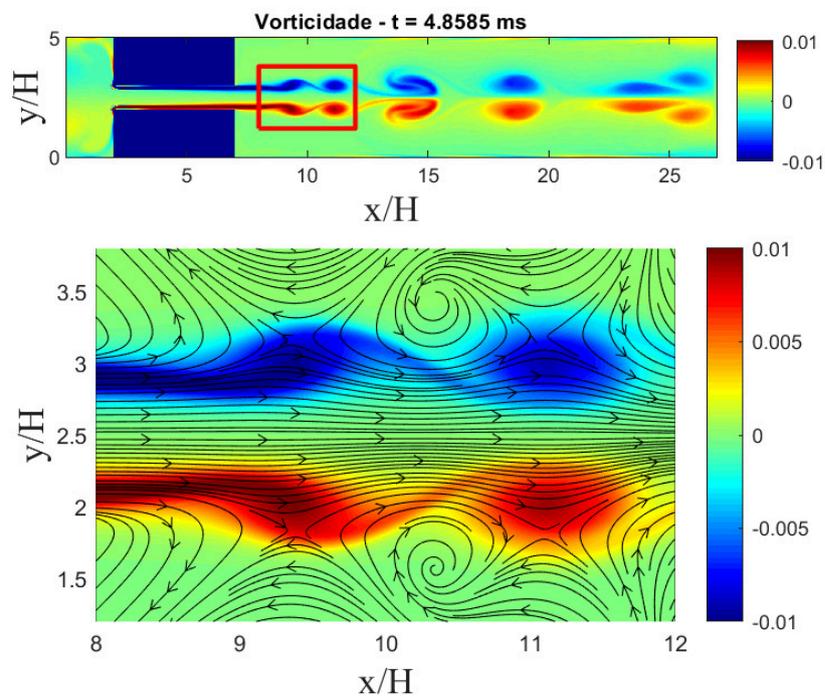


Figura 67 – Detalhe do surgimento de um segundo vórtice na camada limite imediatamente após o surgimento do vórtice anterior. A estrutura que conecta os dois vórtices é chamada de trança.

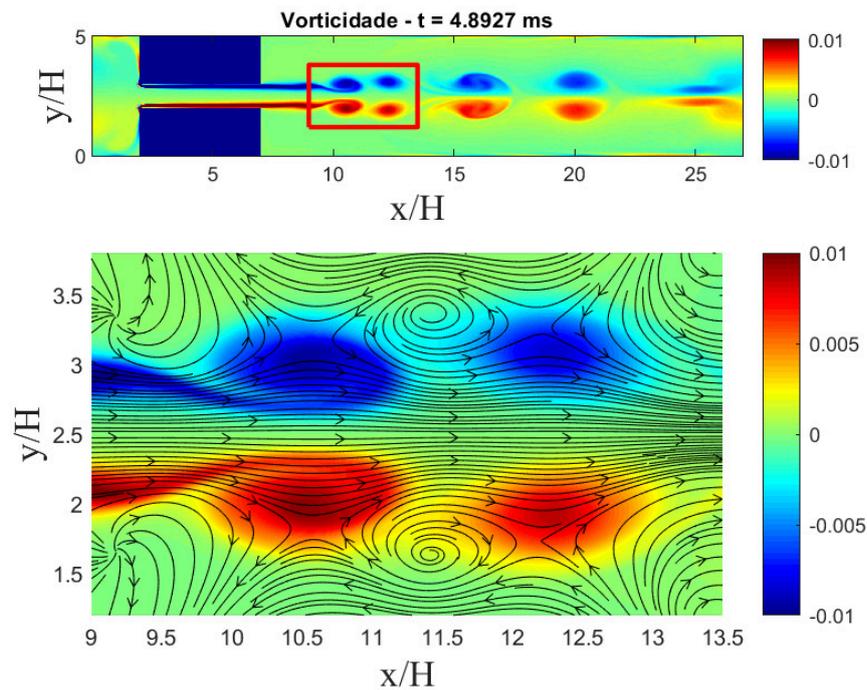


Figura 68 – Os vórtices se aproximam a ponto de a trança não mais existir. Uma região de recirculação se estabelece entre os dois vórtices.

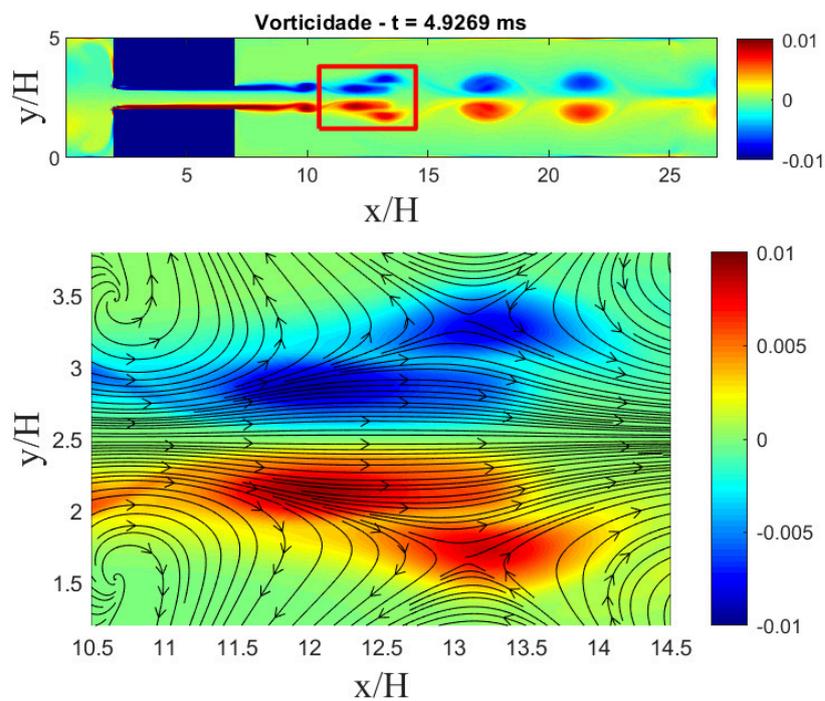


Figura 69 – A região de recirculação direciona o segundo vórtice para dentro do escoamento no centro do canal. Na linha de corrente no centro do canal, a velocidade de convecção do segundo vórtice é aumentada.

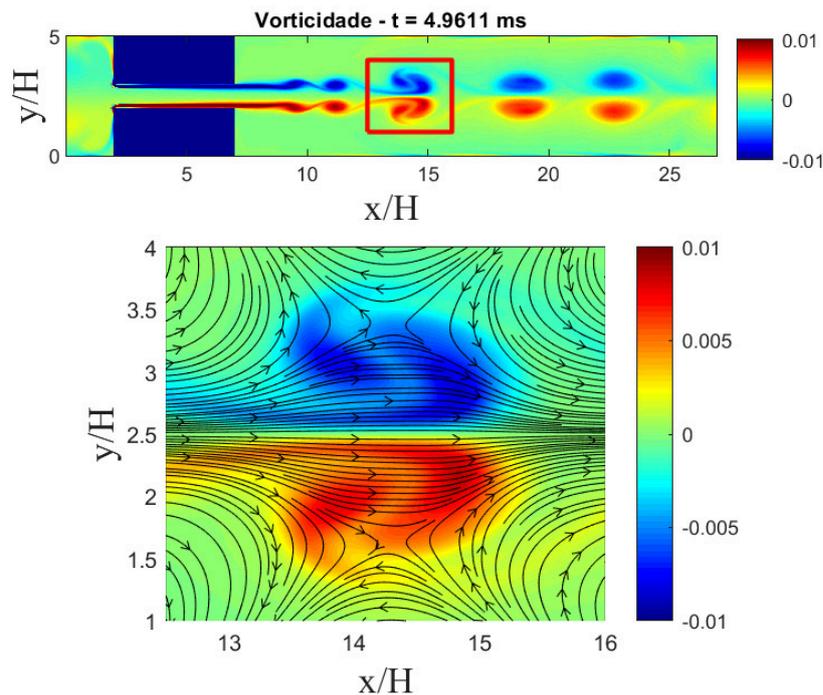


Figura 70 – O segundo vórtice “ultrapassa” o primeiro vórtice, sendo desacelerado logo na sequência. Os dois vórtices se fundem em um vórtice maior.

Toda sequência mostrada acontece em menos de $0,2\text{ ms}$, e esse comportamento se reflete nas oscilações de alta frequência observadas no fluxo de massa medido. Essa dinâmica é acompanhada de variações de densidade, pressão e temperatura, cujos históricos temporais revelam características importantes, sobretudo quando se é feita uma análise em frequência, como a indicada na figura 71. A densidade espectral de potência do sinal no tempo medido ao longo da linha central está indicada juntamente com um esquema da geometria que permite relacionar ao mesmo tempo frequência, amplitude e posição. A mesma metodologia é utilizada para se conhecer o espectro de frequência da pressão ao longo das paredes da tubulação, indicado na figura 72.

O que se conclui é que a frequência de coalescência de vórtices é a responsável pela oscilação de pressão ao longo do domínio. Essa frequência tem predominância em torno de 9700 Hz e acontece em posições bastante específicas na linha central. Essa análise, contudo, leva em conta somente o pequeno intervalo entre os marcos 2 e 3 indicados no gráfico da vazão mássica. Após o ponto 3, o escoamento adquire uma característica bastante diversa desse breve intervalo de desprendimento simétrico de vórtices. O início do marco 3 é justamente caracterizado pela quebra dessa simetria, indicada nas figuras 73 e 74.

Deste ponto em diante (até o tempo simulado), nenhum padrão periódico pode ser observado, e qualquer tentativa de descrição pormenorizada do escoamento seria errática. Isso não significa, contudo, que possa se atribuir ao escoamento termos como aleatório ou caótico, pelo contrário, pode-se divisar estruturas extremamente organizadas em qualquer instante de tempo. Nas figuras 75 e 76 tem-se um extrato do escoamento que passa a ser

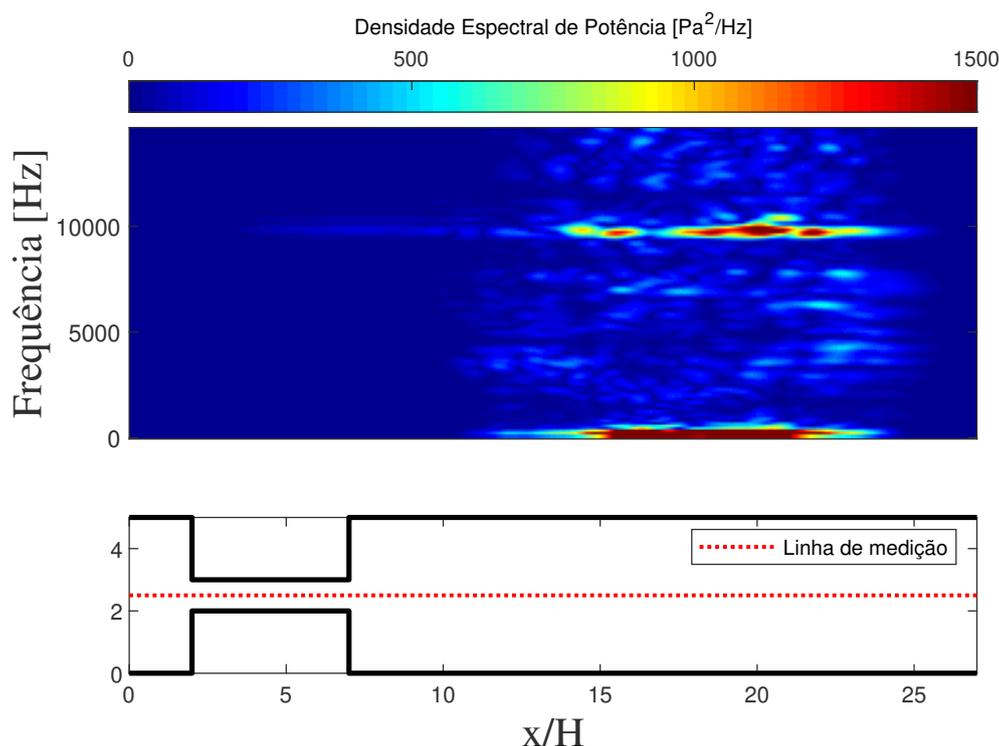


Figura 71 – Densidade espectral de frequência da pressão ao longo da linha central durante a etapa de desprendimento simétrico de vórtices.

encontrado dentro do canal do ponto 3 em diante.

Há uma clara mudança no espectro de frequência medido, como indicado nas figuras 77 e 78, evidenciando a mudança no padrão de escoamento. Componentes de frequência entre 1970 Hz em 2430 Hz aparecem a partir desse ponto, mas é difícil associá-la com uma estrutura específica. Há várias formações de pequenos vórtices que orbitam grandes vórtices e uma instabilidade no jato que poderiam ser associados a essas componentes. Para se ter uma ideia da complexidade do escoamento que se forma, o leitor deve direcionar-se a <https://youtu.be/kjx90TgPp4A> e a <https://youtu.be/dphh7zIrLZc> para uma visualização dos resultados. Nesses vídeos os resultados foram animados de forma a reproduzir o gradiente de densidade ao longo do tempo. Esse material suplementar é bastante útil na tentativa de entendimento do fenômeno.

5.3.3 valores médios e valores de flutuação

A análise da vazão mássica indica uma característica importante do escoamento, que é a convergência do valor médio. Uma vez que a densidade é constante tanto na entrada quanto na saída do domínio, as oscilações nos valores instantâneos da vazão mássica se devem à flutuações na velocidade medida. Com o avanço do tempo, o valor médio dessas oscilações atinge um valor estacionário, sendo então possível dizer que a velocidade medida

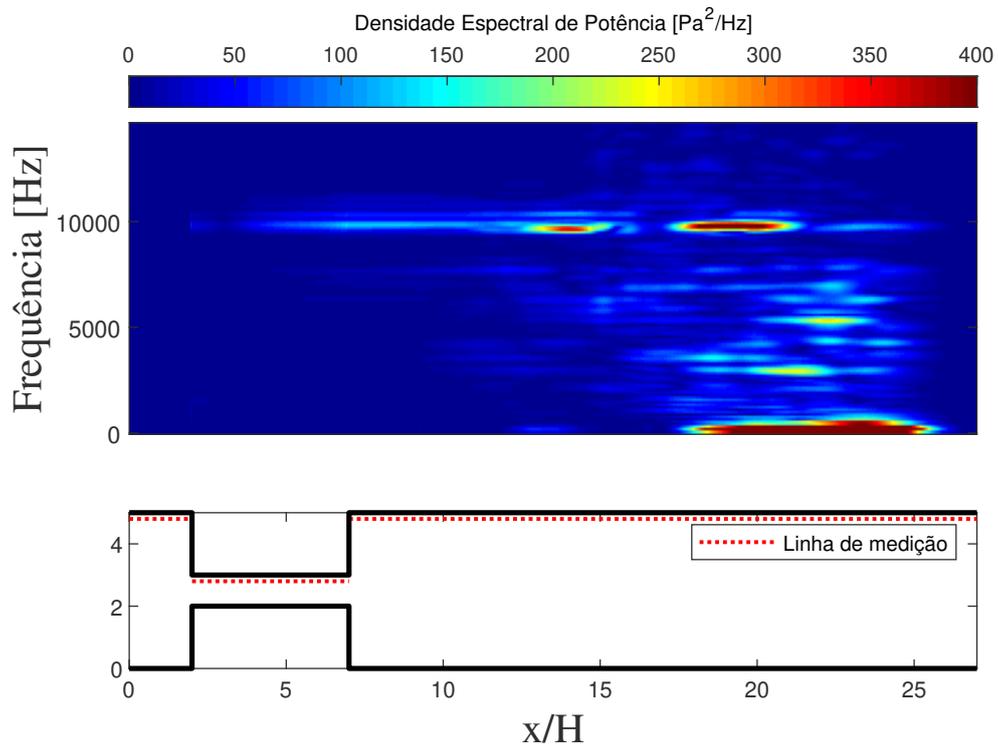


Figura 72 – Densidade espectral de frequência da pressão ao longo das paredes durante a etapa de desprendimento simétrico de vórtices.

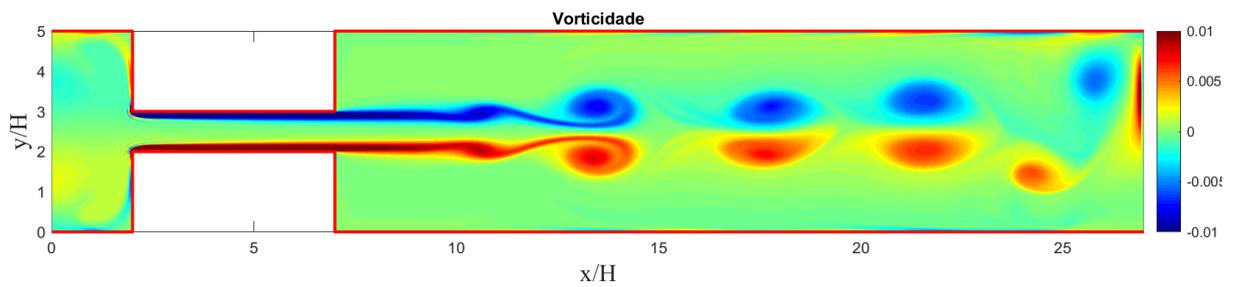


Figura 73 – Vorticidade no início do marco 3. Há uma quebra de simetria dos vórtices que leva a uma deflexão das linhas de corrente.

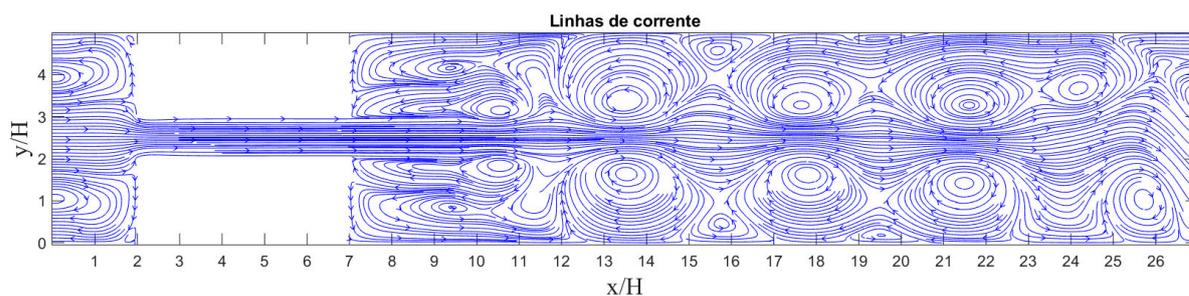


Figura 74 – Linhas de corrente no início do marco 3. O fluxo que até então se desenvolvia confinado entre zonas de recirculação simétricas, começa a ser defletido.

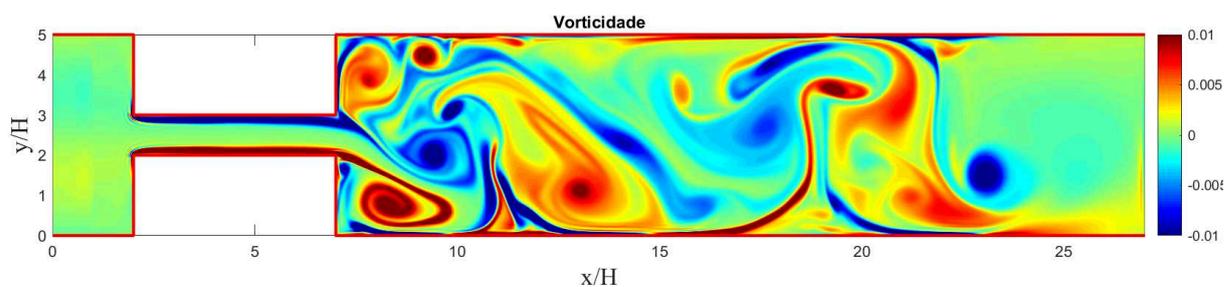


Figura 75 – Vorticidade em $t = 0.0171$ s. Não se pode mais divisar nenhum padrão no escoamento.

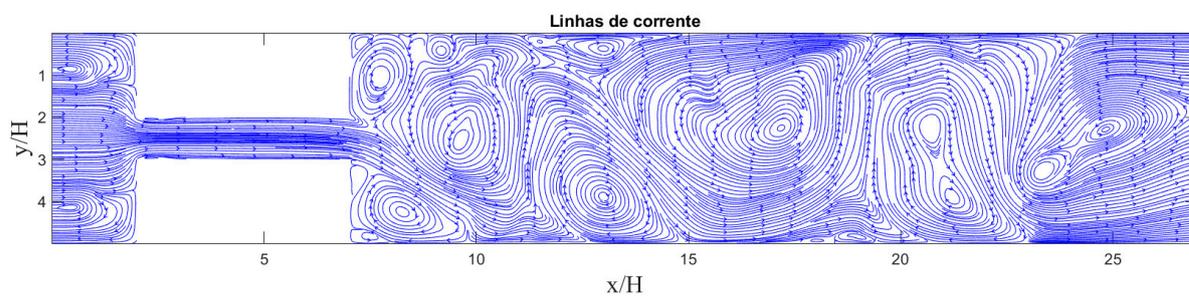


Figura 76 – Linhas de corrente em $t = 0.0171$ s. O escoamento abre caminho em meio a várias zonas de recirculação, que se movem mudando de forma e tamanho.

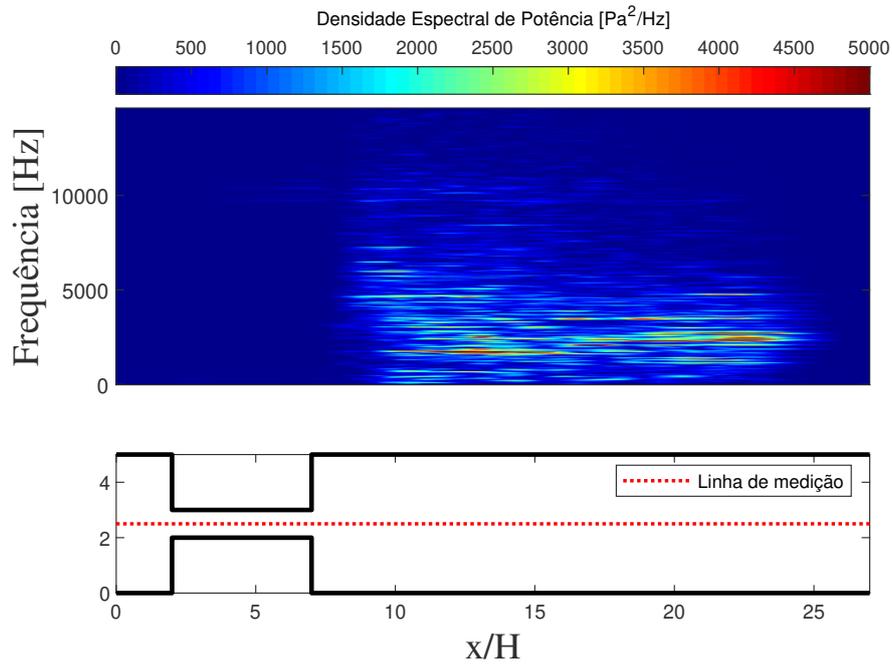


Figura 77 – Densidade espectral de potência da pressão ao longo da linha central após o marco 3.

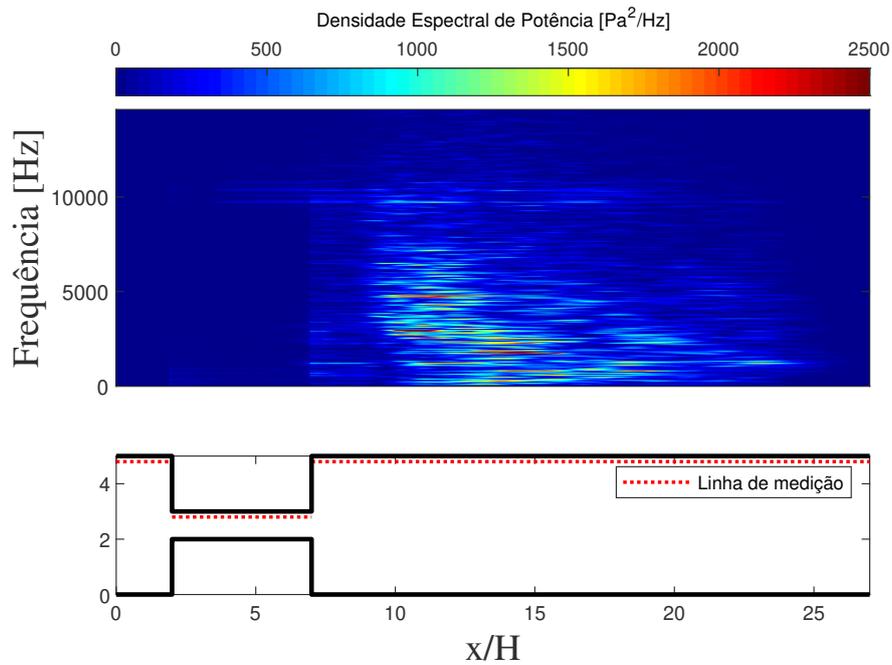


Figura 78 – Densidade espectral de potência da pressão ao longo das paredes após o marco 3.

é resultado da soma de um valor médio mais um valor de flutuação. A ideia de separar o campo dessa forma é chamada de decomposição de Reynolds (REYNOLDS, 1895), onde qualquer variável no campo hidrodinâmico pode ser justamente escrita como a soma de duas contribuições, um valor médio $\bar{\phi}$ e um valor de flutuação $\phi'(t)$

$$\phi(t) = \bar{\phi} + \phi'(t), \quad (288)$$

sendo o valor médio dado pelo operador

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt. \quad (289)$$

Assim, as variáveis hidrodinâmicas velocidade, temperatura e densidade podem ser escritas como

$$\vec{u}(t) = \bar{\vec{u}} + \vec{u}'(t), \quad (290a)$$

$$T(t) = \bar{T} + T'(t), \quad (290b)$$

$$\rho(t) = \bar{\rho} + \rho'(t). \quad (290c)$$

A substituição desses valores nas Equações de Navier-Stokes levam às chamadas Equações Médias de Reynolds, *Reynolds Averaged Navier Stokes* (RANS), na sigla em inglês.

O método RANS descreve a evolução temporal dos valores médios¹, mas possui um problema de fechamento. A decomposição dá origem a um termo envolvendo os valores de flutuação da velocidade \vec{u}' , especificamente, surge o tensor $\nu_{ij} = \overline{u'_i u'_j}$, chamado de tensor de Reynolds. Novas incógnitas surgem, mas não surgem novas equações, de forma que o sistema se torna indeterminado. Esse é o problema de fechamento das equações médias e a determinação dos valores de flutuação requer algum modelo, sendo esses modelos geralmente chamados de modelos de turbulência, já que à turbulência são associados os valores de flutuação. Os modelos se apoiam no fato de que, para altos números de Reynolds, as características estatísticas dos valores de flutuação do campo de velocidades assumem um caráter universal (SREENIVASAN, 1995), hipótese primeiramente proposta por Kolmogorov (KOLMOGOROV *et al.*, 1991). Uma das vantagens das Simulações Numéricas Diretas e da equação discreta de Boltzmann é a não necessidade de se utilizar tais modelos e nesta seção os valores de flutuação são comparados com a teoria de Kolmogorov.

Primeiramente, os valores médios são calculados. Na figura 79 tem-se o resultado do campo de velocidades médio dos últimos 0,1 s de simulação plotado como o Número de Mach, na figura 80 o valor médio do Número de Reynolds (com base na altura do canal H) e na figura 81 as linhas de corrente resultantes das velocidades médias. Valores

¹ O valor médio varia de acordo com o intervalo $t + \Delta t$ considerado.

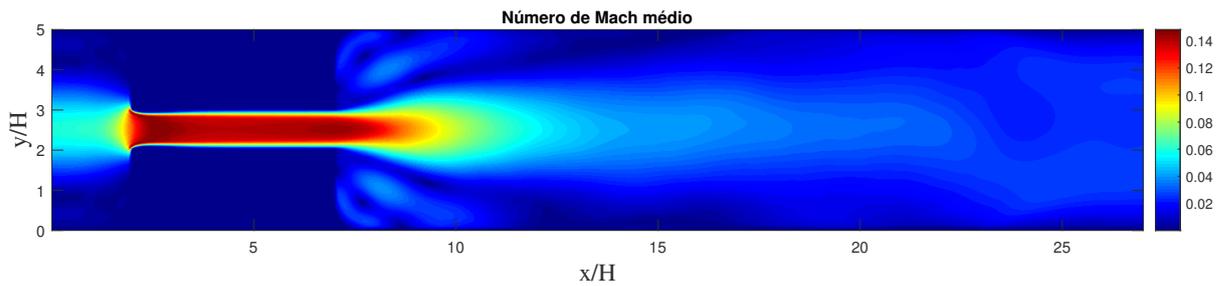


Figura 79 – Número de Mach médio.

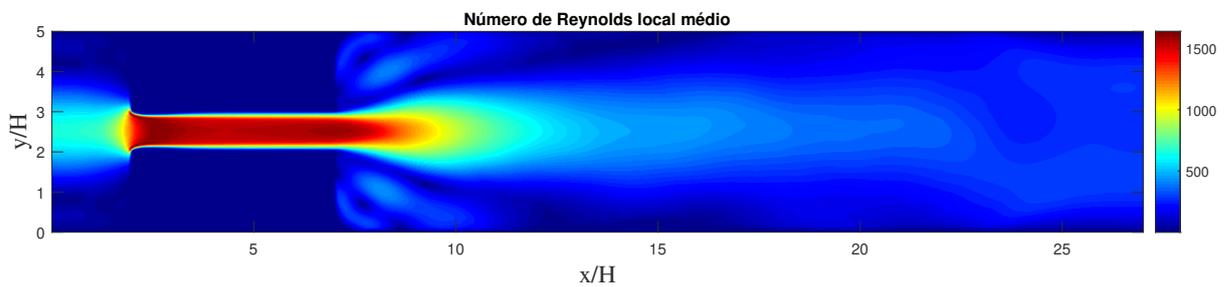


Figura 80 – Número de Reynolds médio.

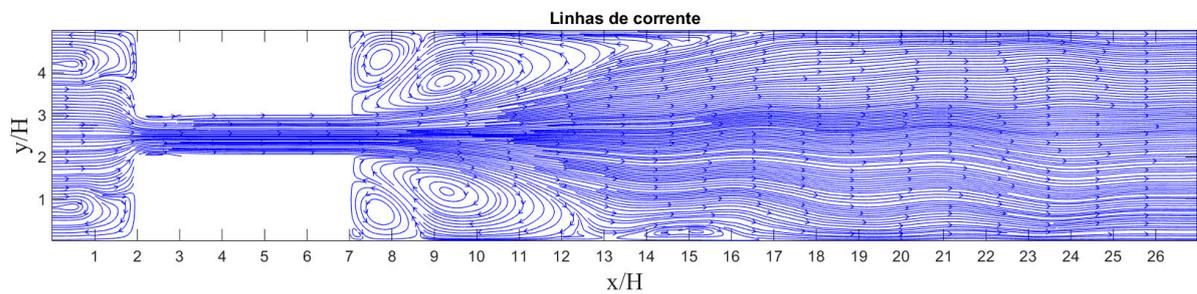


Figura 81 – Linhas de corrente resultantes das velocidades médias.

dessa ordem de grandeza são geralmente caracterizados como escoamentos de transição à turbulência, onde ainda se verifica alguma periodicidade. Diversos trabalhos apresentam resultados semelhantes para o campo médio e o diferencial aqui é a obtenção direta dos valores de flutuação.

Uma ideia da magnitude dessas flutuações pode ser obtida quando os dados são apresentados em uma serie de diagramas de caixas, indicado na figura 82. No gráfico, a linha contínua preta representa o valor médio e a linha vermelha dentro de cada caixa a mediana. Os limites de cada caixa são dados de forma que 25% das observações se encontrem entre a mediana e o limite inferior e 25% entre a mediana e o limite superior. As linhas tracejadas são os limites onde 95% das observações se encontram e as cruces

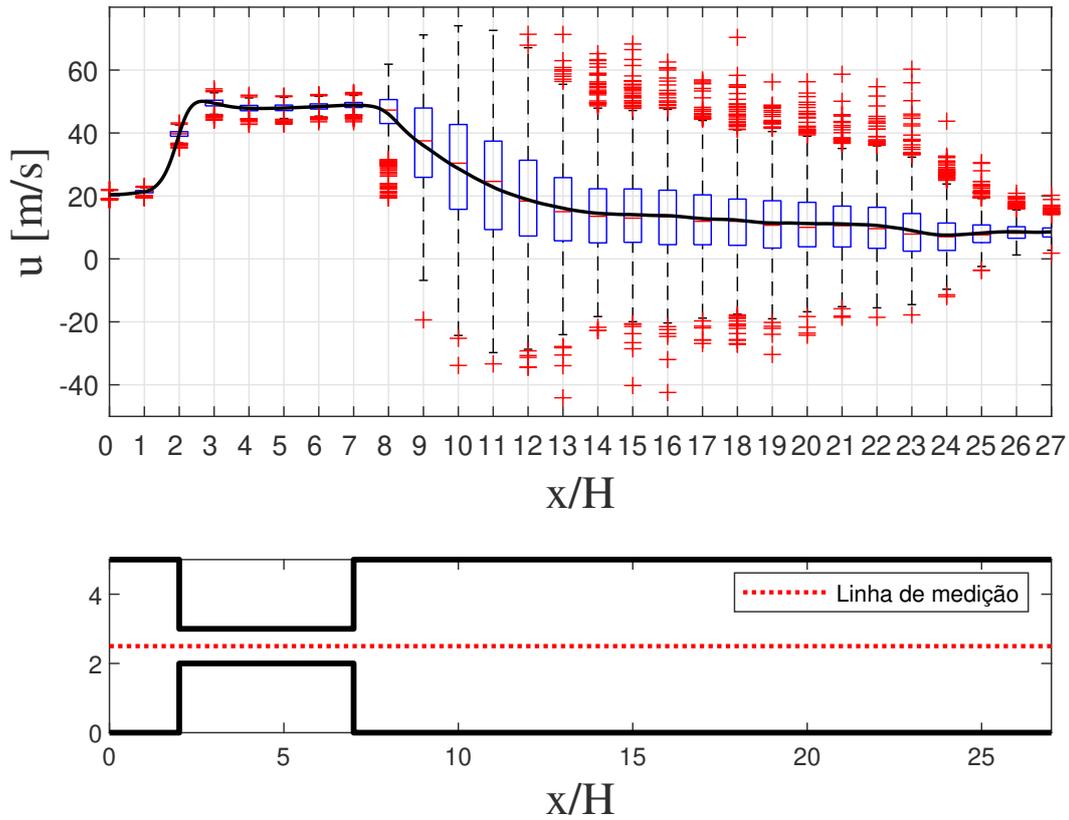


Figura 82 – Diagrama de caixas da componente x da velocidade no centro do canal.

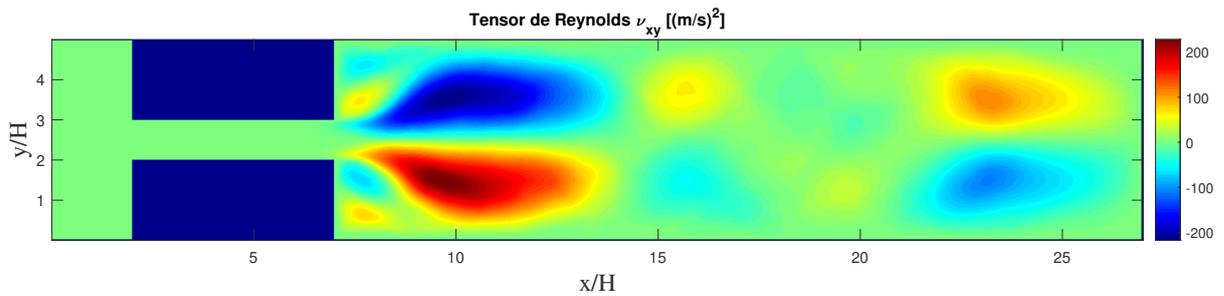


Figura 83 – Tensor de Reynolds.

vermelhas são valores considerados discrepantes. As dispersões são grandes mas apresentam sempre uma distribuição que se aproxima de uma distribuição gaussiana. Conhecendo-se o valor médio $\overline{u}(\vec{x})$ e os valores de flutuação $u'(\vec{x}, t)$ da velocidade, o tensor de Reynolds $\nu_{ij}(\vec{x}) = \overline{u'_i u'_j}$ pode ser facilmente calculado, resultando nos valores mostrados na figura 83. Os mesmos valores de flutuação são utilizados para se obter os valores da energia cinética turbulenta $k(\vec{x}) = \frac{1}{2} \left(\overline{u'_x{}^2} + \overline{u'_y{}^2} \right)$ ao longo do domínio, indicados na figura 84.

O tensor de Reynolds pode ser entendido como tensões que surgem no escoamento

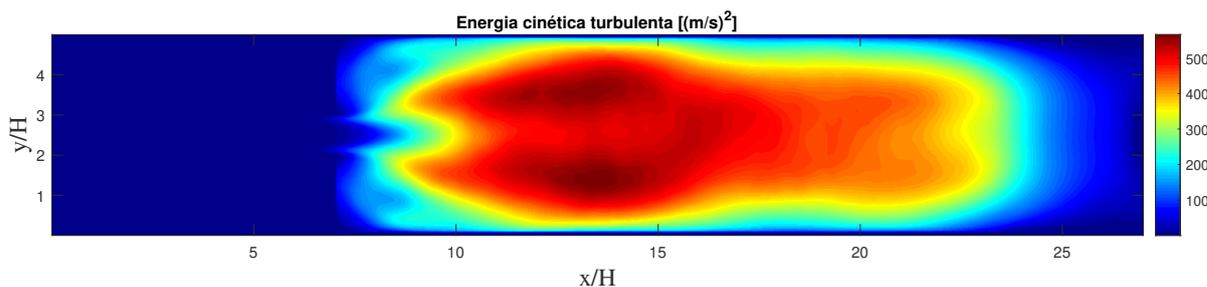


Figura 84 – Energia cinética turbulenta.

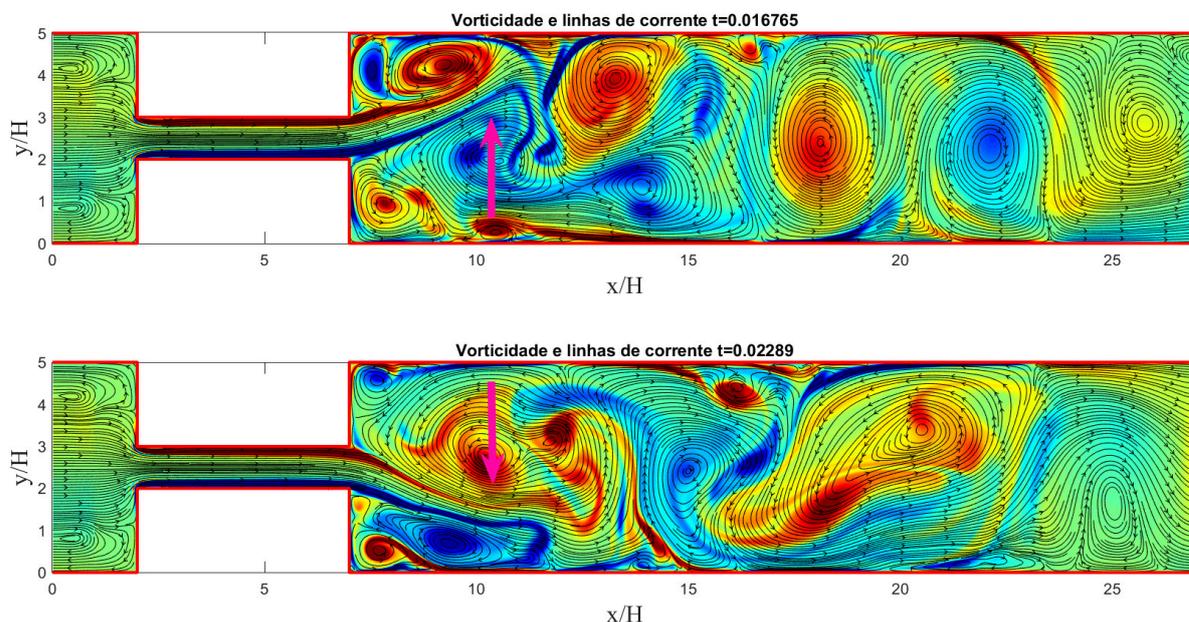


Figura 85 – Pontos de deflexão do escoamento em diferentes instantes de tempo.

devido às flutuações no campo de velocidades. Assim como uma componente do tensor de tensões viscosas representa um fluxo de quantidade de movimento em níveis moleculares, as componentes do tensor de Reynolds representam um fluxo de quantidade de movimento pela parte de flutuação do campo de velocidades (POPE, 2000). ν_{xy} representa o transporte da componente x da quantidade de movimento através de um plano perpendicular ao eixo y , ou ainda, a força na direção x por unidade de área aplicada a um plano perpendicular à direção y devido às flutuações turbulentas. Os locais de maior valor de tensão de Reynolds são os pontos onde há mais tensões agindo sobre o escoamento devido à turbulência, sendo o desequilíbrio instantâneo dessas tensões a causa das deflexões no escoamento, com as posições de maior tensão sendo justamente os pontos onde há mais instabilidade no fluxo que deixa o canal, como indicado na figura 85, onde as linhas de corrente são sobrepostas ao mapa de cores do campo de vorticidade.

A energia cinética turbulenta indicada na figura 84 é uma medida da magnitude

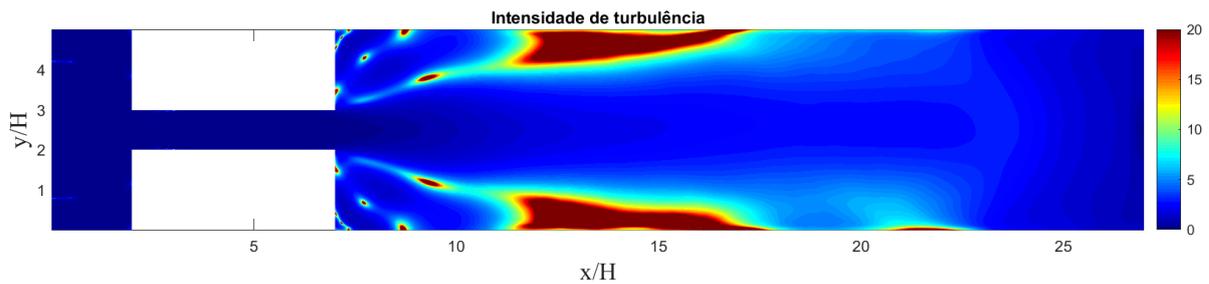


Figura 86 – Intensidade da turbulência.

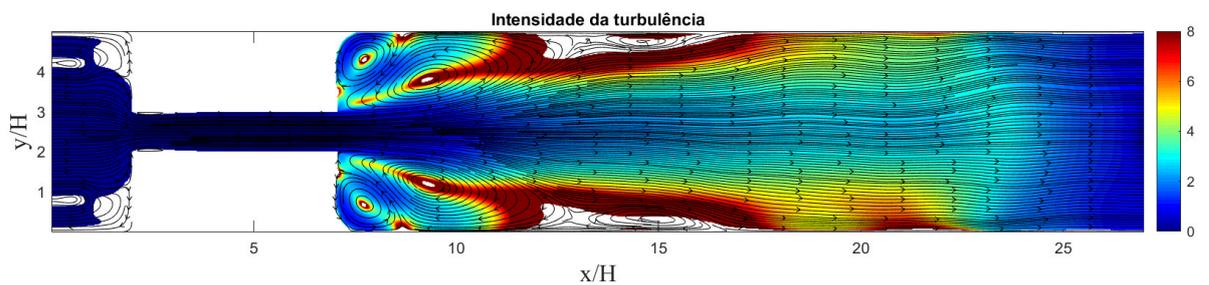


Figura 87 – Intensidade da turbulência desconsiderando pontos com velocidade média próxima de zero.

das oscilações no campo de velocidades. Uma outra maneira de se quantificar as flutuações no campo de velocidades é medir a oscilação relativa

$$I(\vec{x}) = \frac{\sqrt{\overline{(u'_x)^2} + \overline{(u'_y)^2}}}{\sqrt{\overline{u_x^2} + \overline{u_y^2}}}, \quad (291)$$

do valor quadrático médio da flutuação em relação ao valor médio. Essa medida é chamada de intensidade da turbulência, e é indicada na figura 86.

Notam-se valores de flutuação muitas vezes maiores que os valores médios, sendo que esses valores altos se concentram em pontos onde a velocidade média tende a zero, levando os valores na equação (291) para o infinito. Descartando-se os pontos onde a velocidade média é baixa (menor que 1 m/s), tem-se os valores de intensidade da turbulência indicados na figura 87.

As linhas de corrente sobrepostas aos valores da intensidade da turbulência indicam que, primeiro, os vórtices possuem um formato aproximadamente elíptico e, segundo, existe uma concentração de intensidade da turbulência ao longo do eixo maior dessa elipse que se estendem junto às paredes. A área junto à parede com maior concentração de intensidade da turbulência são justamente as áreas para onde o jato que deixa o canal é redirecionado devido às oscilações, como indicado previamente na figura 85.

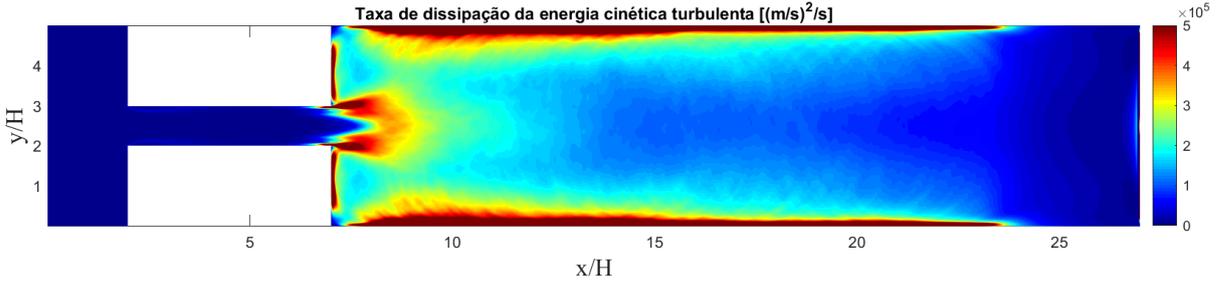


Figura 88 – Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.

É possível então ter uma estimativa bastante precisa dos valores e da localização das quantidades turbulentas, mas mais informações podem ser obtidas, entre elas, uma extremamente difícil de ser obtida, que é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

$$\epsilon = 2\nu \overline{s_{ij}s_{ij}}, \quad (292)$$

onde ν é a viscosidade cinemática e s_{ij} é parte de flutuação do tensor taxa de deformação

$$s_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right). \quad (293)$$

Essa medida é difícil obtenção experimental porque envolve o cálculo de todas as derivadas espaciais do campo de velocidades (XU; CHEN, 2013), mas não representa um esforço computacional muito grande uma vez que se tenha os históricos da velocidade ao longo do domínio. Os valores da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta são indicados na figura 88.

Observa-se que os valores são bastante altos e são também ordens de grandeza maiores junto às paredes. Dois fatores contribuem para esses resultados, o primeiro, o fato de que escoamentos em microcanais são bem diferentes de escoamentos macroscópicos podendo, por exemplo, atingirem regimes turbulentos com números de Reynolds muito baixos (WANG; YANG; ZHAO, 2014) e, segundo, porque as paredes agem como fontes extras de tensões cisalhantes e normais que não estariam presentes em escoamentos livres. Devido às reduzidas dimensões do problema simulado, essas tensões têm efeito sobre todo o domínio e o aumento na taxa de dissipação quando se confina o escoamento é conhecido (CLERCX; HEIJST, 2017).

Outro indicativo de que o escoamento se aproxima de um escoamento turbulento é o formato da densidade espectral $E(k)$ da correlação espacial da velocidade

$$R_{ij}(\vec{x}, \vec{r}) = \overline{u'_i(\vec{x}, t) u'_j(\vec{x} + \vec{r}, t)}, \quad (294)$$

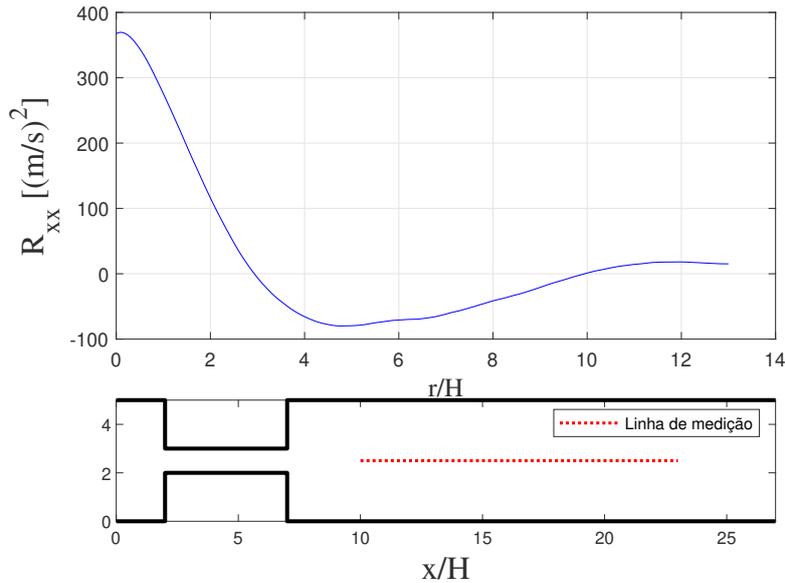


Figura 89 – Correlação espacial da componente x da velocidade no centro do canal.

que para altos números de Reynolds deve tender à chamada lei de $-5/3$ de Kolmogorov (KOLMOGOROV *et al.*, 1991), expressa por

$$E(k) = C_k \epsilon^{2/3} k^{-5/3}, \quad (295)$$

onde C_k é uma constante, ϵ é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e k é o número de onda. A correlação espacial da componente x da velocidade medida na linha central a partir da posição $x = 10H$ até a posição $x = 23H$ é indicada na figura 89, e a densidade espectral dessa correlação indicada na figura 90, onde também é plotado o resultado esperado pela lei de Kolmogorov com $C_k = 2,1$.

A faixa do espectro que segue a inclinação prevista pela lei de Kolmogorov é chamada de faixa inercial, abaixo dessa faixa se concentram as grandes estruturas, responsáveis pela produção de energia e acima dessa faixa estão as pequenas estruturas, onde ocorre a dissipação da energia. A faixa inercial é a faixa onde ocorre a chamada cascata energética, na qual há a transferência de energia das grande para as pequenas estruturas. Em métodos tradicionais as pequenas estruturas não são simuladas diretamente, elas entram como modelos de turbulência. Já na presente simulação, uma ampla faixa de dissipação consegue ser capturada.

Somente as grandes escalas são obtidas por simulações que se utilizam de outras metodologias, como as Equações Médias de Reynolds (RANS) ou a Simulação de Grandes Escalas (LES). O grande diferencial aqui é que nenhuma aproximação foi feita, salvo pela imposição de uma temperatura e uma densidade fixa na saída. O regime turbulento surge naturalmente com o passar da simulação, e o conteúdo espectral das variações em relação aos valores médios é um resultado direto da formação de estruturas ordenadas.

A turbulência é um dos assuntos mais complexos enfrentados na mecânica dos

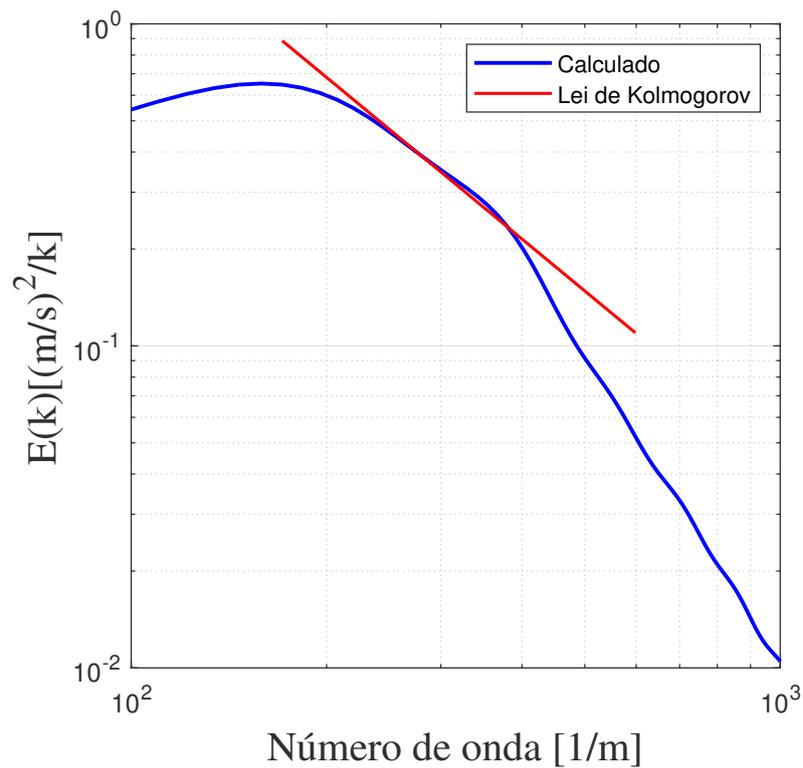


Figura 90 – Densidade espectral da componente x da velocidade no centro do canal.

fluidos e há uma grande necessidade de formas relativamente baratas e confiáveis de se computar escoamentos turbulentos (LUMLEY, 1992). Nesse sentido, a equação discreta de Boltzmann se mostra uma ferramenta importante a ser explorada. O método é genérico e pode ser estendido a qualquer geometria, com valores extremos podendo ser alcançados com uma maior discretização e fenômenos ainda mais complexos, como formações de ondas de choque, por exemplo, podem vir a ser obtidos.

6 CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho foi apresentar condições de contorno para modelos de alta ordem da equação discreta de Boltzmann e mostrar como, a partir da implementação dessas condições de contorno, o método pode figurar como uma alternativa viável para a simulação de fenômenos compressíveis e com troca térmica. Para tal, o trabalho foi dividido em 4 partes:

1. Discussão sobre os aspectos teóricos da teoria cinética. Os trabalhos clássicos foram revisitados e os aspectos analíticos da teoria cinética, da equação contínua de Boltzmann e do processo de discretização que resulta na equação discreta de Boltzmann foram apresentados de forma detalhada. A análise de Chapman-Enskog, que constitui uma das mais poderosas ferramentas matemáticas para conectar a equação de Boltzmann com as equações macroscópicas da mecânica dos fluidos foi apresentada de maneira pormenorizada, identificando as limitações e aproximações do método. Mostrou-se o porquê de a simulação de escoamentos compressíveis e com troca térmica com a equação discreta de Boltzmann requer um maior número de velocidades discretas e a relação entre o tempo de relaxação adotado no termo de colisão e os coeficientes de transporte do fluido.
2. Desenvolvimento de condições de contorno para a equação discreta de Boltzmann. Uma forma de se discretizar e implementar a condição de contorno difusa de Maxwell (MAXWELL, 1879) foi apresentada. A metodologia proposta pode ser vista como uma variação da implementação sugerida por Meng e Zhang (MENG; ZHANG, 2014) onde os pontos fictícios são os próprios pontos de colisão. As condições de contorno desenvolvidas, por dispensarem o uso de pontos fictícios fora do domínio de simulação, aumentam a versatilidade de aplicação, permitindo incorporar trocas de calor e fatores de escorregamento nas paredes. A condição de contorno cinética tem fundamentação direta na teoria cinética e garante a conservação local da massa. As condições de contorno propostas são diretamente aplicáveis a modelos de alta ordem da equação discreta de Boltzmann, pavimentando o caminho para a utilização desses modelos em simulações compressíveis e com troca térmica.
3. Validações numéricas das condições de contorno propostas. Uma série de problemas clássicos da mecânica dos fluidos foi elencada a fim de testar a eficiência das condições de contorno propostas. Buscou-se variar de forma ampla os principais parâmetros que regem cada problema, assegurando a funcionalidade do método nos mais diversos regimes hidrodinâmicos. O método se mostrou capaz de cobrir desde fenômenos rarefeitos a situações onde o regime contínuo prevalece. Na simulação de uma onda plana incidindo sobre um conjunto de aletas a capacidade de se impor uma derivada nula de temperatura ou velocidade nas paredes por meio das condições de contorno

desenvolvidas foi aferida, comprovando a eficiência da metodologia. Esses resultados mostraram que o método, combinando modelos de alta ordem com as condições de contorno difusas, pode ser estendido a problemas hidrodinâmicos mais complexos.

4. Simulação de um escoamento compressível turbulento através de um canal subitamente expandido. A simulação mostrou como o escoamento se desenvolve desde um regime de desprendimento simétrico de vórtices até o surgimento de um regime turbulento sem a necessidade de se utilizar algum modelo de turbulência. Os resultados mostram que a densidade espectral da componente de flutuação da velocidade segue a lei de Kolmogorov (KOLMOGOROV *et al.*, 1991), apontando para um escoamento de fato turbulento. Esse resultado sugere que a equação discreta de Boltzmann pode ser utilizada, inclusive, auxiliando na construção de modelos de turbulência para outros métodos numéricos em situações onde evidências experimentais sejam escassas.

Desse modo, a metodologia combinando modelos de alta ordem da equação discreta de Boltzmann com a condição de contorno difusa de Maxwell mostrou-se uma ferramenta capaz de simular uma ampla gama de fenômenos hidrodinâmicos e figurar como uma alternativa viável a simulação numérica direta das equações de Navier-Stokes. O método pode tanto ser utilizado como uma ferramenta de auxílio no desenvolvimento de modelos de turbulência para outras metodologias como também servir de laboratório virtual para investigar de forma minuciosa fenômenos complexos de difícil reprodução experimental.

6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Inúmeros avanços ainda são necessários e estão em aberto, dentre os quais, pode-se destacar:

1. Estender a metodologia para problemas tridimensionais. Apesar de os modelos e validações apresentados aqui serem bidimensionais, a extensão das condições de contorno para espaços tridimensionais segue as mesmas premissas expostas no capítulo 3. Além disso, propositalmente, sempre que possível, fez-se questão de se destacar que a constante relacionada à dimensionalidade do problema, D , apareça explicitamente nas equações do capítulo 2. Esse desafio representa um trabalho de implementação computacional bastante desafiador.
2. Fluidos não ideais. Muito se encontra na literatura sobre a facilidade com que não idealidades podem ser incorporadas à equação discreta de Boltzmann. Alegadamente, ao se partir da teoria cinética, as fontes de não idealidade, que são as forças de interação intermoleculares, surgiriam naturalmente. Modelos que sejam termodinamicamente consistentes e contemplem variação de temperatura, contudo, ainda não

são um consenso. Do ponto de vista teórico, esse seja talvez o maior desafio para os próximos trabalhos.

3. Novos modelos de colisão. Este ponto é pouco explorado e merece atenção. O modelo de colisão BGK é uma aproximação válida para pequenos desvios do equilíbrio, onde uma linearização do termo de colisão pode ser feita. Grandes desequilíbrios requerem termos não lineares no operador de colisão, que possivelmente contribuiriam também para a estabilidade do método. Modelos além do BGK, contudo, são ainda escassos.
4. Vantagens da arquitetura computacional. A equação discreta de Boltzmann possui, em tese, uma capacidade de paralelização irrestrita e linear, onde o dobro do número de núcleos de processamento significa metade do tempo de computação. Futuros trabalhos devem tirar proveito dos novos processadores com múltiplos núcleos e da crescente incorporação da possibilidade de se utilizar placas de vídeo com milhares de núcleos de processamento em problemas de engenharia para acelerar e tornar a equação discreta de Boltzmann mais competitiva do ponto de vista computacional.

REFERÊNCIAS

- ABDELMIGID, Tamer A. *et al.* Revisiting the lid-driven cavity flow problem: Review and new steady state benchmarking results using GPU accelerated code. **Alexandria Engineering Journal**, v. 56, n. 1, p. 123–135, 2017. ISSN 1110-0168. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aej.2016.09.013>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1110016816302800>.
- AGARWAL, Ramesh K.; YUN, Keon-Young; BALAKRISHNAN, Ramesh. Beyond Navier–Stokes: Burnett equations for flows in the continuum–transition regime. **Physics of Fluids**, v. 13, n. 10, p. 3061–3085, 2001. DOI: 10.1063/1.1397256. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.1397256>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1397256>.
- ALLARD, J.; ATALLA, N. **Propagation of Sound in Porous Media: Modelling Sound Absorbing Materials 2e**. [S.l.]: Wiley, 2009. ISBN 9780470747346. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=Tlg096VLYPYC>.
- ALLEBORN, N. *et al.* Further contributions on the two-dimensional flow in a sudden expansion. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 330, p. 169–188, 1997. DOI: 10.1017/S0022112096003382.
- ANSUMALI, S. *et al.* Quasi-equilibrium lattice Boltzmann method. **The European Physical Journal B**, v. 56, n. 2, p. 135–139, 2007. ISSN 1434-6028. DOI: 10.1140/epjb/e2007-00100-1. Disponível em: <http://www.springerlink.com/index/10.1140/epjb/e2007-00100-1>.
- ARISTOV, V.V. **Direct Methods for Solving the Boltzmann Equation and Study of Nonequilibrium Flows**. [S.l.]: Springer Netherlands, 2012. (Fluid Mechanics and Its Applications). ISBN 9789401008662. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=A499CAAQBAJ>.
- BERGAMO, Leandro F. *et al.* Compressible modes in a square lid-driven cavity. **Aerospace Science and Technology**, v. 44, p. 125–134, 2015. Instability and Control of Massively Separated Flows. ISSN 1270-9638. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ast.2015.03.010>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1270963815001030>.
- BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. **Physical Review**, v. 94, n. 3, p. 511–525, 1954. ISSN 0031899X. DOI: 10.1103/PhysRev.94.511.
- BIRD, G.A. **Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows**. [S.l.]: Clarendon Press, 1994. (Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, v. 1). ISBN 9780198561958. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=Bya5QgAACAAJ>.

BOLTZMANN, L. **Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen: vorgelegt in der Sitzung am 10. October 1872.** [S.l.]: k. und k. Hof- und Staatsdr., 1872. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=Fmy5PgAACAAJ>.

BROADWELL, James E. Shock Structure in a Simple Discrete Velocity Gas. **The Physics of Fluids**, v. 7, n. 8, p. 1243–1247, 1964. DOI: 10.1063/1.1711368. eprint: <https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.1711368>. Disponível em: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1711368>.

BROADWELL, James E. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 19, n. 3, p. 401–414, 1964. DOI: 10.1017/S0022112064000817.

BRUSH, S.G. **Kinetic Theory: Irreversible processes.** [S.l.]: Pergamon Press, 1966. (Commonwealth and international library: Selected readings in physics). Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=eJVKAAAAMAAJ>.

CERCIGNANI, C. **Mathematical methods in kinetic theory.** [S.l.]: Plenum Press, 1969. Disponível em: https://books.google.com.br/books?id=oZ%5C_vAAAAMAAJ.

CERCIGNANI, C. **Theory and application of the Boltzmann equation.** [S.l.]: Scottish Academic Press, 1975. (Texts in mathematics). Disponível em: https://books.google.com.br/books?id=S%5C_V9AAAAIAAJ.

CERCIGNANI, C.; LAMPIS, M. Kinetic models for gas-surface interactions. **Transport Theory and Statistical Physics**, Taylor & Francis, v. 1, n. 2, p. 101–114, 1971. DOI: 10.1080/00411457108231440. eprint: <https://doi.org/10.1080/00411457108231440>. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/00411457108231440>.

CERCIGNANI, C.; PENROSE, R. **Ludwig Boltzmann: The Man Who Trusted Atoms.** [S.l.]: OUP Oxford, 2006. ISBN 9780191606984. Disponível em: https://books.google.com.br/books?id=vMVvJKqZJ%5C_oC.

CERCIGNANI, Carlo. **The Boltzmann Equation and Its Applications.** [S.l.]: Springer-Verlag New York, 1988. (Applied Mathematical Sciences). ISBN 978-1-4612-6995-3. Disponível em: <https://www.springer.com/la/book/9780387966373>.

CHAPMAN, S. *et al.* **The Mathematical Theory of Non-uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases.** [S.l.]: Cambridge University Press, 1990. (Cambridge Mathematical Library). ISBN 9780521408448. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=Cbp5JP20TrwC>.

CHEN, Hudong; CHEN, Shiyi; MATTHAEUS, William H. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 45, r5339–r5342, 8 abr. 1992. DOI: 10.1103/PhysRevA.45.R5339. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.45.R5339>.

CHEN, Shiyi; CHEN, Hudong; MARTNEZ, Daniel *et al.* Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 67, p. 3776–3779, 27 dez. 1991. DOI: 10.1103/PhysRevLett.67.3776. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.67.3776>.

CHEN, Shiyi; MARTÍNEZ, Daniel; MEI, Renwei. On boundary conditions in lattice Boltzmann methods. **Physics of Fluids**, v. 8, n. 9, p. 2527–2536, 1996. DOI: 10.1063/1.869035. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.869035>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.869035>.

CLERCX, H. J. H.; HEIJST, G. J. F. van. Dissipation of coherent structures in confined two-dimensional turbulence. **Physics of Fluids**, v. 29, n. 11, p. 111103, 2017. DOI: 10.1063/1.4993488. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.4993488>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.4993488>.

COLONIUS, Tim; LELE, Sanjiva K. Computational aeroacoustics: progress on nonlinear problems of sound generation. **Progress in Aerospace Sciences**, v. 40, n. 6, p. 345–416, 2004. ISSN 0376-0421. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2004.09.001>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0376042104000570>.

CORNUBERT, R.; D'HUMIÈRES, D.; LEVERMORE, D. A Knudsen layer theory for lattice gases. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 47, n. 1, p. 241–259, 1991. ISSN 0167-2789. DOI: [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(91\)90295-K](https://doi.org/10.1016/0167-2789(91)90295-K). Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016727899190295K>.

D'ANTONA, Gabriele; FERRERO, Alessandro. **Digital Signal Processing for Measurement Systems**. [S.l.]: Springer US, 2006. ISBN 978-0-387-28666-2. Disponível em: <https://www.springer.com/us/book/9780387249667>.

D'HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P. Lattice gas automata for fluid mechanics. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 140, n. 1, p. 326–335, 1986. ISSN 0378-4371. DOI: [https://doi.org/10.1016/0378-4371\(86\)90239-6](https://doi.org/10.1016/0378-4371(86)90239-6). Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0378437186902396>.

DE VAHL DAVIS, G. Natural convection of air in a square cavity: A bench mark numerical solution. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 3, n. 3, p. 249–264, 1983. DOI: 10.1002/flid.1650030305. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/flid.1650030305>. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/flid.1650030305>.

DING, DaoYang; WU, ShiQiang. Direct numerical simulation of turbulent flow over backward-facing at high Reynolds numbers. **Science China Technological Sciences**, v. 55, n. 11, p. 3213–3222, nov. 2012. ISSN 1869-1900. DOI: 10.1007/s11431-012-5006-3. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11431-012-5006-3>.

DITARANTO, Mario; HALS, Jørgen. Combustion instabilities in sudden expansion oxy–fuel flames. **Combustion and Flame**, v. 146, n. 3, p. 493–512, 2006. ISSN 0010-2180. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2006.04.015>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218006001350>.

DOCHERTY, Stephanie Y *et al.* Boundary conditions for molecular dynamics simulations of water transport through nanotubes. **Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science**, v. 228, n. 1, p. 186–195, 2014. DOI: 10.1177/0954406213481760. eprint: <https://doi.org/10.1177/0954406213481760>. Disponível em: <https://doi.org/10.1177/0954406213481760>.

DRIKAKIS, D. Bifurcation phenomena in incompressible sudden expansion flows. **Physics of Fluids**, v. 9, n. 1, p. 76–87, 1997. DOI: 10.1063/1.869174. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.869174>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.869174>.

FEARN, R. M.; MULLIN, T.; CLIFFE, K. A. Nonlinear flow phenomena in a symmetric sudden expansion. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 211, p. 595–608, 1990. DOI: 10.1017/S0022112090001707.

FLEKKØY, Eirik G.; DELGADO-BUSCALIONI, Rafael; COVENEY, Peter V. Flux boundary conditions in particle simulations. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 72, p. 026703, 2 ago. 2005. DOI: 10.1103/PhysRevE.72.026703. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.72.026703>.

FRAPOLLI, N.; CHIKATAMARLA, S. S.; KARLIN, I. V. Entropic lattice Boltzmann model for gas dynamics: Theory, boundary conditions, and implementation. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 93, p. 063302, 6 jun. 2016. DOI: 10.1103/PhysRevE.93.063302. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.93.063302>.

FRAPOLLI, N.; CHIKATAMARLA, S. S.; KARLIN, I. V. Multispeed entropic lattice Boltzmann model for thermal flows. **Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics**, v. 90, n. 4, p. 1–13, 2014. ISSN 15502376. DOI: 10.1103/PhysRevE.90.043306.

FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 56, p. 1505–1508, 14 abr. 1986. DOI: 10.1103/PhysRevLett.56.1505. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.1505>.

- FRISCH, Uriel; D'HUMIÈRES, Dominique *et al.* Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions. **Complex Systems**, Complex Systems Publications, Inc., v. 1, p. 649–707, 4 1987. Disponível em: http://www.complex-systems.com/abstracts/v01_i04_a07/.
- GATIGNOL, R. Kinetic theory for a discrete velocity gas and application to the shock structure. **Phys. Fluids**, 18(2), n. 1975, p. 153, 1975. ISSN 00319171. DOI: 10.1063/1.861121.
- GATIGNOL, R. Kinetic theory boundary conditions for discrete velocity gases. **Physics of Fluids**, v. 20, n. 1977, p. 2022, 1977. ISSN 00319171. DOI: 10.1063/1.861834. Disponível em: <http://link.aip.org/link/?PFLDAS/20/2022/1>.
- 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, n. 3, p. 387–411, 1982. ISSN 0021-9991. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(82\)90058-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(82)90058-4). Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999182900584>.
- GODUNOV, S K; SULTANGAZIN, U M. ON DISCRETE MODELS OF THE KINETIC BOLTZMANN EQUATION. **Russian Mathematical Surveys**, v. 26, n. 3, p. 1, 1971. Disponível em: <http://stacks.iop.org/0036-0279/26/i=3/a=R01>.
- GOLSE, F. Boltzmann-Grad limit. **Scholarpedia**, v. 8, n. 10, p. 9141, 2013. revision #143362. DOI: 10.4249/scholarpedia.9141.
- GORBAN, A. N.; KARLIN, I. V. Beyond Navier–Stokes equations: capillarity of ideal gas. **Contemporary Physics**, Taylor & Francis, v. 58, n. 1, p. 70–90, 2017. DOI: 10.1080/00107514.2016.1256123. eprint: <https://doi.org/10.1080/00107514.2016.1256123>. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/00107514.2016.1256123>.
- GRAD, Harold. Note on N-dimensional hermite polynomials. **Communications on Pure and Applied Mathematics**, v. 2, n. 4, p. 325–330, 1949. DOI: 10.1002/cpa.3160020402. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/cpa.3160020402>. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cpa.3160020402>.
- GRAD, Harold. On the kinetic theory of rarefied gases. **Communications on Pure and Applied Mathematics**, v. 2, n. 4, p. 331–407, 1949. DOI: 10.1002/cpa.3160020403. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/cpa.3160020403>. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cpa.3160020403>.
- HARDY, J.; PAZZIS, O. de; POMEAU, Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions. **Phys. Rev. A**, American Physical

Society, v. 13, p. 1949–1961, 5 mai. 1976. DOI: 10.1103/PhysRevA.13.1949. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.13.1949>.

HARDY, J.; POMEAU, Y. Thermodynamics and Hydrodynamics for a Modeled Fluid. **Journal of Mathematical Physics**, v. 13, n. 7, p. 1042–1051, 1972. DOI: 10.1063/1.1666083. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.1666083>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1666083>.

HARDY, J.; POMEAU, Y.; PAZZIS, O. de. Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions. **Journal of Mathematical Physics**, v. 14, n. 12, p. 1746–1759, 1973. DOI: 10.1063/1.1666248. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.1666248>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1666248>.

HE, Xiaoyi; LUO, Li-Shi. A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. **Physical Review E**, v. 55, n. 6, r6333–r6336, jun. 1997. ISSN 1063-651X. DOI: 10.1103/PhysRevE.55.R6333. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.55.R6333>.

HÉNON, Michel. Viscosity of a Lattice Gas. **Complex Systems**, v. 1, n. 4, 1987.

HIGUERA, F. J; JIMÉNEZ, J. Boltzmann Approach to Lattice Gas Simulations. **Europhysics Letters (EPL)**, IOP Publishing, v. 9, n. 7, p. 663–668, ago. 1989. DOI: 10.1209/0295-5075/9/7/009. Disponível em: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/9/7/009>.

HIGUERA, F. J; JIMÉNEZ, J. Boltzmann Approach to Lattice Gas Simulations. **Europhysics Letters (EPL)**, v. 9, n. 7, p. 663–668, 1989. ISSN 0295-5075. DOI: 10.1209/0295-5075/9/7/009.

HIGUERA, F. J; SUCCI, S; BENZI, R. Lattice Gas Dynamics with Enhanced Collisions. **Europhysics Letters (EPL)**, IOP Publishing, v. 9, n. 4, p. 345–349, jun. 1989. DOI: 10.1209/0295-5075/9/4/008. Disponível em: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/9/4/008>.

HOLMES, M.H. **Introduction to Perturbation Methods**. [S.l.]: Springer New York, 1998. (Texts in Applied Mathematics). ISBN 9780387942032. Disponível em: https://books.google.com.br/books?id=-jSsvzJa%5C_XMC.

HORTMANN, M.; PERIĆ, M.; SCHEUERER, G. Finite volume multigrid prediction of laminar natural convection: Bench-mark solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 11, n. 2, p. 189–207, 1990. DOI: 10.1002/flid.1650110206. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/flid.1650110206>. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/flid.1650110206>.

- HUANG, K. **Statistical Mechanics**. [S.l.]: John Wiley e Sons, 2000. ISBN 9789971512958. Disponível em:
<https://books.google.com.br/books?id=jbNTewAACAAJ>.
- I. M. GEL'FAND, G. E. Shilov. **Generalized Functions, Volume 1: Properties and Operations**. [S.l.]: AMS Chelsea Publishing, 1964. v. 1.
- JAHANSHALOO, Leila *et al.* An overview of boundary implementation in lattice Boltzmann method for computational heat and mass transfer. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 78, p. 1–12, 2016. ISSN 0735-1933. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2016.08.014>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0735193316302342>.
- KIRCHHOFF, G. Ueber den Einfluss der Wärmeleitung in einem Gase auf die Schallbewegung. **Annalen der Physik**, v. 210, n. 6, p. 177–193, 1868. DOI: [10.1002/andp.18682100602](https://doi.org/10.1002/andp.18682100602). eprint:
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/andp.18682100602>.
Disponível em:
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.18682100602>.
- KOLMOGOROV, Andrei Nikolaevich *et al.* The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences**, v. 434, n. 1890, p. 9–13, 1991. DOI: [10.1098/rspa.1991.0075](https://doi.org/10.1098/rspa.1991.0075). eprint:
<https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rspa.1991.0075>.
Disponível em:
<https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1991.0075>.
- KREMER, G.M. **Introdução à Equação de Boltzmann, Uma**. [S.l.]: EDUSP, 2005. ISBN 9788531409271. Disponível em:
<https://books.google.com.br/books?id=KIgG-WDap3wC>.
- KROOK, Max. On the Solution of Equations of Transfer. I. **Astrophysical Journal**, American Astronomical Society, v. 122, p. 488–497, nov. 1955. DOI: [10.1086/146110](https://doi.org/10.1086/146110).
Disponível em: <http://adsabs.harvard.edu/full/1955ApJ...122..488K>.
- LATT, Jonas; CHOPARD, Bastien. Lattice Boltzmann method with regularized pre-collision distribution functions. **Mathematics and Computers in Simulation**, v. 72, n. 2-6, p. 165–168, 2006. ISSN 03784754. DOI: [10.1016/j.matcom.2006.05.017](https://doi.org/10.1016/j.matcom.2006.05.017).
arXiv: 0506157 [physics].
- LE, HUNG; MOIN, PARVIZ; KIM, JOHN. Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 330, p. 349–374, 1997. DOI: [10.1017/S0022112096003941](https://doi.org/10.1017/S0022112096003941).

- LORD, R. G. Some extensions to the Cercignani–Lampis gas–surface scattering kernel. **Physics of Fluids A: Fluid Dynamics**, v. 3, n. 4, p. 706–710, 1991. DOI: 10.1063/1.858076. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.858076>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.858076>.
- LORD, R. G. Some further extensions of the Cercignani–Lampis gas–surface interaction model. **Physics of Fluids**, v. 7, n. 5, p. 1159–1161, 1995. DOI: 10.1063/1.868557. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.868557>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.868557>.
- LUMLEY, J. L. Some comments on turbulence. **Physics of Fluids A: Fluid Dynamics**, v. 4, n. 2, p. 203–211, 1992. DOI: 10.1063/1.858347. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.858347>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.858347>.
- MANSOUR, M. Malek; BARAS, F.; GARCIA, Alejandro L. On the validity of hydrodynamics in plane Poiseuille flows. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 240, n. 1, p. 255–267, 1997. Proceedings of the Euroconference on the microscopic approach to complexity in non-equilibrium molecular simulations. ISSN 0378-4371. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(97\)00149-0](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(97)00149-0). Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437197001490>.
- MATTILA, Keijo K.; PHILIPPI, Paulo C.; HEGELE, Luiz A. High-order regularization in lattice-Boltzmann equations. **Physics of Fluids**, v. 29, n. 4, p. 046103, 2017. DOI: 10.1063/1.4981227. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.4981227>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.4981227>.
- MATTILA, KEIJO K. *et al.* High-Order Lattice-Boltzmann Equations and Stencils for Multiphase Models. **International Journal of Modern Physics C**, v. 24, n. 12, p. 1340006, 2013. ISSN 0129-1831. DOI: 10.1142/S0129183113400068. Disponível em: <http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183113400068>.
- MAXWELL, James Clerk. VII. On stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, v. 170, p. 231–256, 1879. DOI: 10.1098/rstl.1879.0067. eprint: <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rstl.1879.0067>. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rstl.1879.0067>.
- MCNAMARA, Guy R.; ZANETTI, Gianluigi. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. **Physical Review Letters**, v. 61, n. 20, p. 2332–2335, 1988. ISSN 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.2332.
- MENG, Jianping; ZHANG, Yonghao. Diffuse reflection boundary condition for high-order lattice Boltzmann models with streaming–collision mechanism. **Journal of Computational Physics**, v. 258, p. 601–612, 2014. ISSN 0021-9991. DOI:

<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.10.057>. Disponível em:
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199911300733X>.

MOHAMAD, A.A.; KUZMIN, A. A critical evaluation of force term in lattice Boltzmann method, natural convection problem. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 53, n. 5, p. 990–996, 2010. ISSN 0017-9310. DOI:
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2009.11.014>. Disponível em:
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931009006036>.

NICHOLLS, William D. *et al.* Water transport through (7,7) carbon nanotubes of different lengths using molecular dynamics. **Microfluidics and Nanofluidics**, v. 12, n. 1, p. 257–264, jan. 2012. ISSN 1613-4990. DOI: 10.1007/s10404-011-0869-3. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10404-011-0869-3>.

PANTOKRATORAS, Asterios. Classical Plane Couette Flow with Viscous Dissipation and Variable Fluid Properties. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, American Institute of Aeronautics e Astronautics, v. 21, n. 2, p. 437–442, abr. 2007. ISSN 0887-8722. DOI: 10.2514/1.23496. Disponível em:
<https://doi.org/10.2514/1.23496>.

PAPOULIS, A.; PILLAI, S.U. **Probability, Random Variables, and Stochastic Processes**. [S.l.]: Tata McGraw-Hill, 2002. (McGraw-Hill series in electrical engineering: Communications and signal processing). ISBN 9780070486584. Disponível em:
<https://books.google.com.br/books?id=g6eUoW01cQMC>.

PATHRIA, R.K.; BEALE, P.D. **Statistical Mechanics**. [S.l.]: Elsevier Science, 2011. ISBN 9780123821898. Disponível em:
<https://books.google.com.br/books?id=KdbJJAXQ-RsC>.

PHILIPPI, Paulo C. *et al.* From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 73, p. 056702, 5 mai. 2006. DOI: 10.1103/PhysRevE.73.056702. Disponível em:
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.73.056702>.

PHILIPPI, Paulo Cesar; HEGELE JR., LUIZ ADOLFO *et al.* **From the Boltzmann To the Lattice-Boltzmann Equation: Beyond Bgk Collision Models**. v. 18. [S.l.: s.n.], 2007. P. 556–565. DOI: 10.1142/S0129183107010796. Disponível em:
<http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true%7B%5C%7Ddb=aph%7B%5C%7DAN=25811532%7B%5C%7Dsite=ehost-live>.

PHILIPPI, Paulo Cesar; HEGELE, Luiz Adolfo *et al.* Deriving thermal lattice-Boltzmann models from the continuous Boltzmann equation: theoretical aspects. **arXiv:physics/0506064v1**, February 2008, p. 29, 2005. arXiv: 0506064 [physics]. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/physics/0506064>.

PHILIPPI, Paulo *et al.* From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. **Physical Review E**, v. 73, n. 5, p. 056702, mai. 2006. ISSN 1539-3755. DOI: 10.1103/PhysRevE.73.056702. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.73.056702>.

PONT-VÍLCHEZ, A. *et al.* Direct numerical simulation of backward-facing step flow at $Re_\tau = 395$ and expansion ratio 2. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 863, p. 341–363, 2019. DOI: 10.1017/jfm.2018.1000.

POPE, Stephen B. **Turbulent Flows**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. DOI: 10.1017/CB09780511840531.

QIAN, Y. H; D'HUMIÈRES, D; LALLEMAND, P. Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation. **Europhysics Letters (EPL)**, IOP Publishing, v. 17, n. 6, p. 479–484, fev. 1992. DOI: 10.1209/0295-5075/17/6/001. Disponível em: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/17/6/001>.

QIU, Ruo-Fan *et al.* A double-distribution-function lattice Boltzmann model for high-speed compressible viscous flows. **Computers and Fluids**, v. 166, p. 24–31, 2018. ISSN 0045-7930. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.01.039>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793018300483>.

RASTI, Mehdi; JEONG, Ji Hwan. Assessment of Dimensionless Correlations for Prediction of Refrigerant Mass Flow Rate Through Capillary Tubes — A Review. **International Journal of Air-Conditioning and Refrigeration**, v. 25, n. 04, p. 1730004, 2017. DOI: 10.1142/S201013251730004X. eprint: <https://doi.org/10.1142/S201013251730004X>. Disponível em: <https://doi.org/10.1142/S201013251730004X>.

REYNOLDS, Osborne. IV. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. (A.)**, v. 186, p. 123–164, 1895. DOI: 10.1098/rsta.1895.0004. eprint: <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rsta.1895.0004>. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsta.1895.0004>.

RICE, John R. 14 - THE VALIDATION OF NUMERICAL COMPUTATIONS. *In*: RICE, John R. (Ed.). **Numerical Methods in Software and Analysis (Second Edition)**. Second Edition. San Diego: Academic Press, 1993. P. 677–684. ISBN 978-0-12-587755-8. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-587755-8.50017-3>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780125877558500173>.

ROTHMAN, D.H.; ZALESKI, S. **Lattice-Gas Cellular Automata: Simple Models of Complex Hydrodynamics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2004. (Aléa-Saclay).

ISBN 9780521607605. Disponível em:
<https://books.google.com.br/books?id=STHngizh7LoC>.

SAADAT, Mohammad Hossein; BÖSCH, Fabian; KARLIN, Ilya V. Lattice Boltzmann model for compressible flows on standard lattices: Variable Prandtl number and adiabatic exponent. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 99, p. 013306, 1 jan. 2019. DOI: 10.1103/PhysRevE.99.013306. Disponível em:
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.99.013306>.

SCHREIBER, R; KELLER, H.B. Driven cavity flows by efficient numerical techniques. **Journal of Computational Physics**, v. 49, n. 2, p. 310–333, 1983. ISSN 0021-9991. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(83\)90129-8](https://doi.org/10.1016/0021-9991(83)90129-8). Disponível em:
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999183901298>.

SHAN, XIAOWEN; CHEN, HUDONG. A GENERAL MULTIPLE-RELAXATION-TIME BOLTZMANN COLLISION MODEL. **International Journal of Modern Physics C**, v. 18, n. 04, p. 635–643, 2007. DOI: 10.1142/S0129183107010887. eprint: <https://doi.org/10.1142/S0129183107010887>. Disponível em: <https://doi.org/10.1142/S0129183107010887>.

SHAN, Xiaowen; YUAN, Xue-Feng; CHEN, Hudong. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier–Stokes equation. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 550, n. -1, p. 413, 2006. ISSN 0022-1120. DOI: 10.1017/S0022112005008153.

SOFONEA, Victor; SEKERKA, Robert F. Diffuse-reflection boundary conditions for a thermal lattice Boltzmann model in two dimensions: Evidence of temperature jump and slip velocity in microchannels. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 71, p. 066709, 6 jun. 2005. DOI: 10.1103/PhysRevE.71.066709. Disponível em:
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.71.066709>.

SREENIVASAN, Katepalli R. On the universality of the Kolmogorov constant. **Physics of Fluids**, v. 7, n. 11, p. 2778–2784, 1995. DOI: 10.1063/1.868656. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.868656>. Disponível em:
<https://doi.org/10.1063/1.868656>.

STRUCHTRUP, Henning. Maxwell boundary condition and velocity dependent accommodation coefficient. **Physics of Fluids**, v. 25, n. 11, p. 112001, 2013. DOI: 10.1063/1.4829907. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.4829907>. Disponível em:
<https://doi.org/10.1063/1.4829907>.

STRUCHTRUP, Henning. Some Remarks on the Equations of Burnett and Grad. *In*: ABDALLAH, Naoufel Ben *et al.* (Ed.). **Transport in Transition Regimes**. New York, NY: Springer New York, 2004. P. 265–276.

SURMAS, Rodrigo. **Simulação de fenômenos termo-fluidodinâmicos pelo emprego dos métodos de diferenças finitas à solução da equação de Boltzmann**. 2010. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Santa Catarina.

THORPE, S. A. On the Kelvin–Helmholtz route to turbulence. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 708, p. 1–4, 2012. DOI: 10.1017/jfm.2012.383.

TIJDEMAN, H. On the propagation of sound waves in cylindrical tubes. **Journal of Sound and Vibration**, v. 39, n. 1, p. 1–33, 1975. ISSN 0022-460X. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0022-460X\(75\)80206-9](https://doi.org/10.1016/S0022-460X(75)80206-9). Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022460X75802069>.

TODD, B. D.; EVANS, Denis J. Temperature profile for Poiseuille flow. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 55, p. 2800–2807, 3 mai. 1997. DOI: 10.1103/PhysRevE.55.2800. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.55.2800>.

WANG, G. R.; YANG, Fang; ZHAO, Wei. There can be turbulence in microfluidics at low Reynolds number. **Lab Chip**, The Royal Society of Chemistry, v. 14, p. 1452–1458, 8 2014. DOI: 10.1039/C3LC51403J. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1039/C3LC51403J>.

WILKS, J. **The Third Law of Thermodynamics**. [S.l.]: Oxford University Press, 1963. (Oxford Library of the Physical Sciences). Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=ws05nQEACAAJ>.

WOLFRAM, S. Universality and Complexity in Cellular Automata. **Physica D**, v. 10, p. 1–35, 1984.

XIAO, Cheng-Nian *et al.* Numerical Investigation and Experimental Comparison of the Gas Dynamics in a Highly Underexpanded Confined Real Gas Jet. **Flow, Turbulence and Combustion**, fev. 2019. ISSN 1573-1987. DOI: 10.1007/s10494-019-00014-2. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10494-019-00014-2>.

XU, Duo; CHEN, Jun. Accurate estimate of turbulent dissipation rate using PIV data. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 44, p. 662–672, 2013. ISSN 0894-1777. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2012.09.006>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0894177712002464>.

XU, Hui; SAGAUT, Pierre. Analysis of the absorbing layers for the weakly-compressible lattice Boltzmann methods. **Journal of Computational Physics**, v. 245, p. 14–42, 2013. ISSN 0021-9991. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.02.051>. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999113001915>.

ZANK, G. P. **Transport Processes in Space Physics and Astrophysics**. [S.l.]: Springer-Verlag New York, 2014. (Lecture Notes in Physics).

ZHENG, Y.; GARCIA, A. L.; ALDER, B. J. Comparison of Kinetic Theory and Hydrodynamics for Poiseuille Flow. **Journal of Statistical Physics**, v. 109, November, p. 495–505, 2002. ISSN 00224715. DOI: 10.1023/A:1020498111819.

ZIEGLER, Donald P. Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations. **Journal of Statistical Physics**, v. 71, n. 5, p. 1171–1177, jun. 1993. ISSN 1572-9613. DOI: 10.1007/BF01049965. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01049965>.

ZOU, Qisu; HE, Xiaoyi. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. **Physics of Fluids**, v. 9, n. 6, p. 1591–1598, 1997. DOI: 10.1063/1.869307. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.869307>. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.869307>.

ZWIKKER, C.; KOSTEN, C.W. **Sound Absorbing Materials**. [S.l.]: Elsevier Publishing Company, 1949. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=ezUOnQEACAAJ>.