

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

ANÁLISE DE FORMAS DISCRETAS DA EQUAÇÃO DE BOLTZMANN
PARA PROBLEMAS TÉRMICOS BI-DIMENSIONAIS

Dissertação submetida à

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

para a obtenção do grau de

MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

DIOGO NARDELLI SIEBERT

Florianópolis, fevereiro de 2007

*“O único homem que está isento de erros,
é aquele que não arrisca acertar.”*

Albert Einstein

Aos meus pais

Agradecimentos

Ao Professor Paulo César Philippi pela orientação, paciência e confiança.

Ao Co-orientador deste trabalho Dr. Luis Orlando Emerich dos Santos pelas incontáveis ajudas recebidas nos momentos de dúvida e dificuldade.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro através da bolsa de estudo.

À todos os funcionários e professores do programa de pós-graduação em engenharia mecânica pela excelente qualidade do curso.

Aos colegas e amigos do LMPT pelas conversas e pelo bom ambiente de trabalho. Em especial gostaria de agradecer aos colegas Rodrigo Surmas e Luis Adolfo Hegele pelo tempo despendido na leitura deste trabalho e pelos comentários e sugestões que, com absoluta certeza, enriqueceram o presente trabalho.

Aos meus pais, Udo e Carmem, por tantas coisas que seria impossível enumera-las em somente um parágrafo mas principalmente pela dedicação e carinho depositados incondicionalmente em mim a partir do momento em que vim a este mundo.

Às minhas irmãs Adriana, Elen e Marilia, pela companhia, paciência e amizade.

Aos meus amigos e ex-colegas de graduação Alexandre, Rafael, Ricardo, Tiago Kroetz e Tiago Ribeiro pelas conversas e cervejas compartilhadas nas horas de descontração.

À Amanda por ser minha companheira de todas as horas, sempre me apoiando e me encorajando e principalmente pelo amor concedido a mim durante estes anos.

À Deus, pelo dom da vida.

Sumário

Resumo	p. v
Abstract	p. vi
Lista de Figuras	p. vii
Lista de Tabelas	p. ix
Simbologia	p. x
1 Introdução	p. 1
2 Método de Boltzmann para Redes	p. 3
2.1 Origens do Método	p. 3
2.2 Discretização da Equação de Boltzmann	p. 8
2.3 Modelos Térmicos	p. 9
2.3.1 McNamara & Alder (1993)	p. 9
2.3.2 Alexander, S. Chen & Sterling (1993)	p. 10
2.3.3 Y. Chen, Ohashi e Akiyama (1994)	p. 11
2.3.4 Modelos do Escalar Passivo	p. 11
2.3.5 He, S. Chen e Doolen (1998)	p. 12
2.3.6 Modelo Híbrido	p. 13
2.3.7 Phillipi et al (2006)	p. 14
2.3.8 Operador com dois tempos de relaxação	p. 14
3 Formas discretas da equação de Boltzmann	p. 16

3.1	Discretização do tempo	p. 16
3.1.1	Método Explícito	p. 18
3.1.2	Método Implícito	p. 18
3.2	Discretização das velocidades	p. 19
3.2.1	Modelo de Segunda Ordem	p. 24
3.2.2	Modelo de Terceira Ordem	p. 25
3.2.3	Modelos de Quarta Ordem	p. 26
4	Análise de Chapman-Enskog	p. 31
4.1	Procedimento e Definições	p. 31
4.1.1	Equação para Conservação da Massa	p. 34
4.1.2	Equação para Quantidade de Movimento	p. 36
4.1.3	Equação da Energia	p. 37
4.1.4	Análise do Método Implícito	p. 38
4.2	Resultados da Análise Multiescala	p. 39
4.2.1	Operador BGK	p. 39
4.2.1.1	Modelo D2V9	p. 40
4.2.1.2	Modelo D2V17	p. 42
4.2.1.3	Redes D2V25	p. 44
4.2.1.4	Rede D2V37	p. 45
4.2.2	Operador TRT	p. 45
4.2.2.1	Modelos D2V25	p. 47
4.2.2.2	Modelo D2V37	p. 48
5	Análise de Estabilidade	p. 49
5.1	Aspectos teóricos	p. 49
5.2	Metodologia	p. 52
5.3	Resultados	p. 54
5.3.1	Modelos Atérmicos	p. 54

5.3.2 Modelos térmicos	p. 57
6 Simulações	p. 60
6.1 Difusão da quantidade de Movimento	p. 60
6.2 Difusão da energia	p. 65
6.3 Velocidade do Som	p. 69
7 Conclusão	p. 72
Referências	p. 74
Apêndice A - Polinômios de Hermite	p. 76
Apêndice B - Operador TRT	p. 78
Apêndice C - Cálculo do tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$	p. 81
Apêndice D - Cálculo do vetor $q_{\alpha}^{(1)}$	p. 83

Resumo

O método de Boltzmann para redes tem obtido grande êxito na simulação de problemas hidrodinâmicos à temperatura constante. Entretanto, apesar dos diversos modelos propostos na literatura, este método foi incapaz de descrever escoamentos não isotérmicos de forma satisfatória, devido, principalmente, à presença de instabilidade numérica e de discrepâncias nas equações macroscópicas que descrevem a dinâmica do fluido. Neste contexto, o presente trabalho estuda uma série de modelos derivados como formas discretas da equação de Boltzmann. O estudo compreende uma análise multiescala, de modo a averiguar a concordância entre o comportamento macroscópico dos modelos e as equações de Navier-Stokes, e uma análise da estabilidade linear, com o objetivo de obter os limites de aplicabilidade dos modelos. Por fim, são apresentadas medições numéricas dos coeficientes de transporte, com a finalidade de corroborar os resultados da análise multiescala.

Abstract

The lattice Boltzmann method has achieved great success in the simulation of hydrodynamic problems at constant temperature. Unfortunately, although several models were proposed, this method was not capable of describing non-isothermal flows in a satisfactory manner, due to the presence of numerical instability and deviations on the macroscopic equations that describe the fluid dynamics. In this context, this work studies a series of models that were derived as discrete forms of the Boltzmann equation. The study starts with a multiscale analysis, for investigating the macroscopic behavior of the models in relation with the Navier-Stokes equations, followed by a linear stability analysis, to obtain the limits of applicability of the models. To conclude the study, numerical measurements of the transport coefficients are presented to corroborate the results of the multiscale analysis.

Lista de Figuras

1	Etapas de colisão e propagação no método booleano em uma rede hexagonal.	p. 4
2	Redes quadradas utilizadas por Qian, d’Humières e Lallemand ^[1]	p. 8
3	Pontos no espaço gerados pelos vetores ξ_i de uma rede D2Q9.	p. 20
4	Rede D2V9	p. 25
5	Rede D2V17	p. 26
6	Redes de 25 velocidades para modelo de quarta ordem incompleto.	p. 28
7	Rede D2V37	p. 29
8	Dependência do maior autovalor com a orientação da velocidade onde α é o ângulo que o vetor \mathbf{k} faz com o eixo x	p. 53
9	Curva da velocidade máxima estável no modelo D2Q9 para diferentes valores do ângulo entre \mathbf{u} e o eixo x	p. 54
10	Limites de estabilidade na velocidade macroscópica para diferentes modelos atérmicos que utilizam a rede D2Q9.	p. 56
11	Comparação do limite de estabilidade na velocidade para diferentes valores da viscosidade absoluta.	p. 57
12	Temperaturas máximas e mínimas dos modelos térmicos D2V25 e D2V37 para qual o modelo é numericamente estável.	p. 59
13	Ilustração da condição inicial utilizada para simulação do problema da difusão.	p. 61
14	Dependência da viscosidade cinemática com o tempo de relaxação para o caso BGK com temperatura $\Theta = 0$, sendo as previsões teóricas representadas por linhas.	p. 62
15	Dependência da viscosidade cinemática com a temperatura para o caso BGK, onde as linhas representam as previsões teóricas.	p. 63

16	Viscosidade com operador TRT usando o modelo D2V25(W1). A figura mostra as regiões (a) negativa e (b) positiva dos valores do segundo o tempo de relaxação.	p. 64
17	Viscosidade com operador TRT usando o modelo D2V25(W6). A figura mostra as regiões (a) negativa e (b) positiva dos valores do segundo o tempo de relaxação.	p. 64
18	Viscosidade com operador TRT usando o modelo D2V37. A figura mostra as regiões (a) negativa e (b) positiva dos valores do segundo o tempo de relaxação.	p. 65
19	Condutividade térmica para os modelos utilizados com operador BGK para diferentes valores do tempo de relaxação.	p. 67
20	Condutividade térmica com operador BGK para diferentes valores da temperatura.	p. 68
21	Medida da condutividade térmica para o modelo D2V25(W1).	p. 68
22	Medida da condutividade térmica para o modelo D2V25(W6).	p. 69
23	Medida da condutividade térmica para o modelo D2V37.	p. 69
24	Medida da velocidade do som para os vários modelos estudados.	p. 71

Lista de Tabelas

1	Pesos das redes usadas em conjunto com a equação Eq. (2.8).	p. 7
2	Pesos e fator de escala para a rede D2V9	p. 24
3	Pesos e fator de escala para a rede D2V17	p. 26
4	Pesos para as redes do tipo D2V25	p. 29
5	Pesos e fator de escala da rede D2V37 , onde $R = (67 + 36\sqrt{30})^{1/3}$. . .	p. 30

Simbologia

c_i	velocidade discreta adimensional da partícula associada a uma direção i da rede
\mathbf{x}	vetor posição
n_i	estado de ocupação do sítio na direção i
t	variável tempo
ρ	densidade do fluido
\mathbf{u}	velocidade macroscópica do fluido
\mathbf{u}^*	velocidade macroscópica adimensional do fluido
f_i	função distribuição de velocidades discretas
h	distância entre sítios adjacentes
δ	duração de um passo de tempo da simulação
τ	tempo de relaxação
w_i	peso atribuído à direção i
f	função distribuição contínua
ξ	velocidade molecular
∇	operador gradiente
ξ_i	velocidade molecular discreta
e	energia interna
e^*	energia interna adimensional
T	temperatura
g	distribuição de energia na forma contínua do modelo de duas distribuições
$\tau_{\alpha\beta}$	tensor tensão viscosa
p	pressão hidrodinâmica

τ_1	primeiro tempo de relaxação do operador TRT
τ_2	segundo tempo de relaxação do operador TRT
k_B	constante de Boltzmann
m	massa da partícula
$\langle \varphi_n^{r_n} \rangle$	momento da função distribuição
T_o	temperatura de referência
$\mathcal{H}_n^{r_n}$	polinômio tensorial de Hermite
\mathbf{u}_o	velocidade macroscópica adimensional
ξ_o	velocidade molecular adimensional
Θ	temperatura adimensional que mede a flutuação em torno de uma temperatura de referência T_o
L_c	comprimento macroscópico característico
T_c	tempo macroscópico característico
∂_{t^*}	derivada temporal adimensional
∂_{α^*}	derivada espacial adimensional
ε	número de Knudsen
a	fator de escala
f_n	ordem n em Knudsen da função distribuição discreta
∂_n	ordem n em Knudsen da derivada temporal
$\Omega_i^{(n)}$	ordem n em Knudsen do operador de colisão
e_0	energia interna do fluido à temperatura de referencia T_o
μ	viscosidade absoluta
λ	segundo coeficiente de viscosidade
K	condutividade térmica
K^*	condutividade térmica adimensional
δf_i	flutuação em torno da distribuição de equilíbrio
ν	viscosidade cinemática
ν^*	viscosidade cinemática adimensional
c_s	velocidade do som

1 *Introdução*

O estudo da dinâmica dos fluidos teve como primeira motivação a curiosidade humana em entender os fenômenos que ocorrem na natureza. O desenvolvimento do conhecimento nesta área não é, atualmente, limitado ao puro interesse científico, mas é também impulsionado pelas incontáveis aplicações práticas que a mecânica dos fluidos possui, especialmente no campo da engenharia.

Para boa parte dos fenômenos, tanto de interesse acadêmico quanto tecnológico, as equações de Navier-Stokes contém, nas suas soluções, informação suficiente para a descrição do comportamento dos fluidos. Porém dada a complexidade dessas equações, encontrar estas soluções de maneira analítica se torna uma tarefa difícil e, em alguns casos, impossível.

Com o advento da computação digital, os métodos numéricos, sendo os mais importantes entre estes o de diferenças finitas e o de volumes finitos, forneceram uma nova e poderosa ferramenta para resolver estas equações. Recentes pesquisas, tendo como objetivo a obtenção de soluções numéricas para problemas em mecânica dos fluidos, desenvolveram um método alternativo denominado método de Boltzmann para redes ou *Lattice Boltzmann Method* (LBM).

Diferentemente dos métodos já existentes, o método de Boltzmann para redes não tenta resolver diretamente as equações de Navier-Stokes, mas se utiliza de uma física mais fundamental, a teoria cinética, para cumprir o objetivo final que é obter uma descrição para a dinâmica dos fluidos.

Devido ao caráter cinético inerente a este método, soluções numéricas para escoamentos em geometrias complexas puderam ser obtidas com relativa facilidade, o que utilizando outros métodos numéricos existentes é praticamente inviável. Conseqüentemente, este método se tornou amplamente utilizado para estudo de escoamentos em meios porosos e escoamentos multifásicos, justamente em razão da complexidade da geometria ou do objeto em questão, o fluido.

Como originalmente concebido, este método limitou-se a descrever a evolução tempo-

ral e espacial do campo de velocidades do fluido, sendo a temperatura uma grandeza constante e uniforme. Várias tentativas iniciais de aprimorar o método, para que a evolução espacial e temporal da temperatura fosse idêntica aquela descrita pela equação de balanço da energia interna, não obtiveram sucesso, devido principalmente à instabilidade numérica e ao elevado custo computacional. Posteriormente, tentativas foram realizadas para contornar estas deficiências^[2-4], utilizando o LBM para descrever o campo de velocidades e outros métodos numéricos para descrever a dinâmica da temperatura, o que resultou, na maioria dos casos, em uma descrição incompleta do escoamento.

Aproveitando-se da estrutura da teoria cinética, Philippi et al.^[5] propuseram uma nova maneira de obter modelos a serem utilizados no LBM, onde é possível incorporar, de modo consistente, parte da física existente nesta teoria. Como consequência, vários modelos, compostos de uma rede e de uma distribuição de equilíbrio discreta, foram propostos. Porém, como o foco deste encontra-se nos aspectos teóricos que envolvem a derivação de formas discretas da equação de Boltzmann, nenhuma conexão foi estabelecida entre os campos de velocidade e temperatura descritos por estes modelos e aqueles descritos pelas equações da termohidrodinâmica. Esta conexão é fundamental, pois demonstra que é possível utilizar tal método como uma alternativa para a obtenção da dinâmica de escoamentos onde o conhecimento da temperatura do fluido é essencial.

Dentro deste contexto, este trabalho tem como objetivo realizar esta conexão, demonstrando teoricamente e numericamente a viabilidade destes modelos. Adicionalmente, este trabalho visa estudar o comportamento destes com respeito a estabilidade numérica, tendo em vista a falha dos modelos anteriores em cumprir tal quesito.

Focando tais objetivos, o presente documento está organizado da seguinte maneira. Inicialmente é realizada uma breve revisão sobre o surgimento e desenvolvimento do LBM, assim como uma revisão dos principais modelos voltados à descrição de problemas térmicos propostos na literatura. Após essa revisão, uma abordagem sobre a derivação dos modelos a partir da teoria cinética é realizada, seguida da obtenção do comportamento macroscópico para comparação com as equações de Navier-Stokes. É então realizada uma discussão sobre a metodologia empregada para analisar a estabilidade do método, juntamente com os resultados obtidos. Para completar o estudo, são apresentados resultados de simulações numéricas realizadas através dos modelos analisados.

2 *Método de Boltzmann para Redes*

Neste capítulo, será realizada uma revisão do surgimento e evolução do LBM. Primeiramente será abordada as origens históricas do método, começando pela sua derivação através dos modelos de gás em rede ou *Lattice Gas Automata* (LGA), passando então para os modelos com operador de colisão simplificado e a sua posterior relação com a equação de Boltzmann. Após esta discussão preliminar, os principais modelos para escoamentos não isotérmicos são revisados, focando as dificuldades por estes encontradas. De modo a concluir esta revisão, é realizada uma breve discussão dos modelos térmicos obtidos como formas discretas da equação de Boltzmann.

2.1 Origens do Método

Historicamente o LBM surgiu através do aprimoramento de outro método numérico, o LGA ou, como também é conhecido, método booleano. Este por sua vez tem origem no artigo publicado em 1986 por Frisch, Hasslacher e Pomeau^[6], onde é proposta a utilização de um método baseado em autômatos celulares para obtenção de uma solução numérica para a dinâmica dos fluidos.

O modelo de gás em redes utiliza um mundo microscópico simplificado, onde as partículas que constituem o fluido estão limitadas a ocupar os vértices de uma rede regular, também conhecidos como sítios. A velocidade das partículas é restrita a um conjunto de b velocidades, que denotamos por \mathbf{c}_i , sendo que o módulo e a direção destas são escolhidos de maneira que em um passo de tempo as partículas saltem até os sítios mais próximos.

Restringindo a ocupação de um determinado sítio a uma partícula por direção, o estado de cada sítio pode ser descrito através de um conjunto de variáveis booleanas $n_i(\mathbf{x}, t)$, onde esta função assume o valor 1 para a presença e 0 para a ausência de uma partícula com velocidade \mathbf{c}_i que ocupa um sítio na posição \mathbf{x} no tempo t .

A evolução do sistema é caracterizada por duas etapas distintas: a colisão e a propagação, como ilustrado na Fig. (1). Na propagação as partículas movem-se até os sítios vizinhos na direção de sua velocidade \mathbf{c}_i . Na etapa de colisão, a velocidade das partículas em cada sítio são alteradas de acordo com uma regra que conserva o número de partículas e a quantidade de movimento no sítio. A segunda etapa tem como intuito simular a colisão das partículas neste mundo microscópico simplificado.

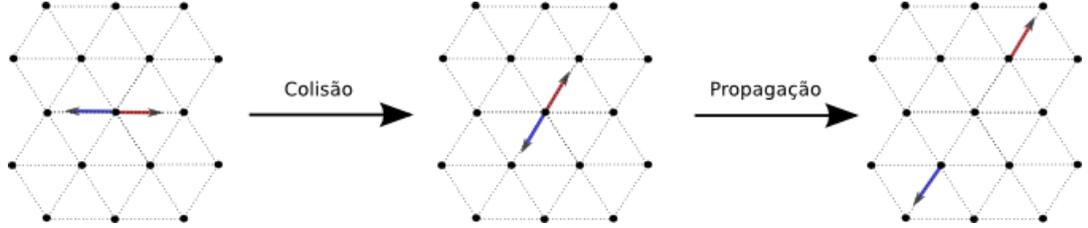


Figura 1: Etapas de colisão e propagação no método booleano em uma rede hexagonal.

Neste método as variáveis macroscópicas densidade, ρ , e velocidade adimensional do fluido, \mathbf{u}^* , são calculadas assumindo que as partículas tem massa unitária e então identificando a densidade do fluido na posição \mathbf{x} com o número de partículas neste sítio,

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^b n_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.1)$$

e a quantidade de movimento do fluido como a soma da quantidade de movimento de cada partícula no sítio,

$$\rho \mathbf{u}^* = \sum_{i=0}^b n_i \mathbf{c}_i. \quad (2.2)$$

Obtêm-se assim, a partir deste modelo simplificado de mundo microscópico, as grandezas que caracterizam o comportamento dinâmico de um fluido.

Como condição de contorno para este método, utiliza-se a inversão das velocidades das partículas de fluido que vão ao encontro de partículas do sólido. Esta condição de contorno garante velocidade nula no contorno e é conhecida como *bounce back*.

Uma das primeiras dificuldades encontradas pelo LGA foi obter um comportamento isotrópico em escalas macroscópicas, o que só foi obtido através da utilização de um conjunto de velocidades \mathbf{c}_i cujos tensores calculados por $\sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \dots \mathbf{c}_i$ são isotrópicos até quarta ordem. Utilizando redes que obedecem essa condição é possível mostrar, através

de uma análise de escala, que a dinâmica desse fluido segue em média a equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis.

Este método obteve um êxito razoável na simulação de problemas em mecânica dos fluidos, tendo como principais vantagens o baixo custo computacional associado ao uso de booleanas, a estabilidade numérica incondicional e a versatilidade no tratamento de geometrias complexas, em virtude da simplicidade da condição de contorno.

Apesar dos pontos positivos citados acima, este método apresentou várias deficiências significativas. Dentre estas vale ressaltar: a) a dependência da pressão com a velocidade do fluido, problema que pode ser atenuado aumentando-se o número de partículas que podem estar em repouso nos sítios, b) a ausência de invariância galileana devido a presença de uma função dependente da densidade no termo advectivo da equação macroscópica para a evolução da quantidade de movimento, c) a existência de um limite inferior para o valor da viscosidade, dificultando assim o tratamento de problemas com valores altos do número de Reynolds e d) a presença de ruídos ou flutuações.

De modo a eliminar ou amenizar esses ruídos são necessárias médias temporais, espaciais ou de *ensemble*. Como média de *ensemble* entende-se a média dos resultados de várias simulações do mesmo problema com condições iniciais microscópicas distintas, porém com condições macroscópicas idênticas.

Com o intuito de resolver o problema dos ruídos, McNamara e Zanetti^[7] propuseram um método alternativo que simula diretamente a média de *ensemble*, ou seja, a média da ocupação de um sítio $f_i = \langle n_i \rangle$. Considerando a analogia deste procedimento com a obtenção da equação de Boltzmann a partir das leis da mecânica, este foi denominado *Lattice Boltzmann Method* (LBM) ou Método de Boltzmann para redes. Neste caso, a grandeza calculada, $f_i(\mathbf{x}, t)$, é um número real entre 0 e 1 que representa a probabilidade de encontrarmos uma partícula com velocidade \mathbf{c}_i no sítio \mathbf{x} no tempo t e é conhecida como a função distribuição de velocidades.

Este primeiro LBM herda várias características do seu antecessor, tanto positivas, como a estabilidade numérica e a separação em etapas de colisão e propagação, quanto negativas, como a dependência da pressão com a velocidade, a ausência de invariância galileana e a limitação nos valores da viscosidade. Porém, ao fazer esta transição, perde-se um dos aspectos mais notáveis do modelo booleano: o baixo custo computacional. Isto se deve, em grande parte, a dois fatores: o aumento da quantidade de memória necessária acarretado pelo uso de valores de ponto flutuante e o aumento do tempo de processamento requerido pela etapa de colisão. Estes fatores tornaram praticamente inviável a aplicação deste LBM para problemas tridimensionais.

A equação que rege a evolução do LBM, denominada de *lattice Boltzmann equation* (LBE) ou equação de Boltzmann para redes, pode ser escrita na forma geral como:

$$f_i(\mathbf{x} + h\mathbf{c}_i, t + \delta) = f_i(\mathbf{x}, t) + \delta\Omega_i[f]. \quad (2.3)$$

Nesta equação estão sintetizados o processo de colisão e propagação herdados do LGA, onde o parâmetro h é a distância entre os sítios adjacentes e δ é o tempo que transcorre no problema físico durante um passo na simulação. O cálculo no lado direito da equação representa a colisão, enquanto a propagação consiste na atribuição do resultado desse cálculo para o lado esquerdo. O termo $\Omega_i[f]$ é conhecido como operador de colisão, novamente em analogia com a equação de Boltzmann da teoria cinética. No LBM, densidade e quantidade de movimento são calculados respectivamente através de:

$$\rho = \sum_{i=0}^b f_i \quad (2.4)$$

$$\rho\mathbf{u}^* = \sum_{i=0}^b f_i\mathbf{c}_i \quad (2.5)$$

O operador de colisão na forma inicialmente sugerida na Ref. [7], consiste em uma média do termo que trata das colisões no LGA, o que resulta em um operador não linear em f_i . Por este motivo a equação resultante ficou conhecida como LBE não linear. Um trabalho posterior, apresentado por Higuera e Zanetti^[8], concentrou-se na simplificação deste operador. O caminho escolhido pelos autores para realizar tal simplificação, foi expandir o operador de colisão em torno da distribuição encontrada no equilíbrio. Desprezando termos de segunda ordem nessa expansão, os autores chegaram a uma forma simplificada para o operador de colisão,

$$\Omega_i[f] = \sum_{j=0}^b A_{ij}(f_j - f_j^{eq}) \quad (2.6)$$

onde A_{ij} permanece constante durante a simulação e pode ser determinado a partir do operador de colisão da LBE não linear. A equação que resulta do uso desse operador foi chamada de LBE quase-linear, pois embora tenha uma aparência linear em f_i , esta ainda apresenta termos não lineares já que f_j^{eq} depende de ρ e \mathbf{u}^* , que por sua vez dependem de f_i . Mesmo com a permanência de termos não lineares, este procedimento tornou a etapa de colisão mais eficiente permitindo o uso do LBM em problemas tridimensionais.

Motivados por este operador quase-linear, Chen et al.^[9] sugeriram utilizar uma forma

diagonal para a matriz A_{ij} , resultando na seguinte forma para o operador de colisão:

$$\Omega_i[f] = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{eq}), \quad (2.7)$$

onde τ é um parâmetro do modelo chamado de tempo de relaxação, que permite controlar os coeficientes de transporte. Esta forma para o operador de colisão já havia sido utilizada em 1954 por Bhatnagar, Gross e Krook^[10] com o objetivo de simplificar a equação de Boltzmann e é conhecido como operador BGK. Por este motivo a equação resultante do uso desse operador na Eq. (2.3) é conhecida como *Lattice BGK Equation* (LBGK).

De modo quase que simultâneo, Qian, d'Humières e Lallemand^[1] realizaram uma abordagem semelhante. A contribuição destes autores foi notar que a distribuição de equilíbrio utilizada no operador BGK não precisa ser necessariamente aquela herdada do método LGA. Partindo desta constatação, estes sugeriram uma nova forma para a distribuição de equilíbrio¹:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + 3c_{\alpha i} u_{\alpha}^* + \frac{9}{2}(c_{\alpha i} u_{\alpha}^*)(c_{\beta i} u_{\beta}^*) - \frac{3u_{\alpha}^* u_{\alpha}^*}{2} \right]. \quad (2.8)$$

Como consequência dessa alteração, as redes utilizadas não necessitam mais obedecer os requisitos de isotropia do LGA, sendo os pesos w_i escolhidos de maneira a assegurar a isotropia das equações macroscópicas. A Eq. (2.8) pode ser utilizada com redes unidimensionais, bidimensionais ou tridimensionais. Esta família de redes foi classificada pelo número de velocidades (b) e pela dimensão (d), sendo as redes denotadas por $DdQb$. As principais redes deste grupo podem ser visualizadas na Fig. (2). Os valores de w_i para estas redes são encontradas na Tab. (1).

Tabela 1: Pesos das redes usadas em conjunto com a equação Eq. (2.8).

Modelo	w_i		
	Repouso	Principais	Diagonais
D1Q3	2/3	1/6	0
D2Q9	4/9	1/9	1/36
D3Q19	1/3	1/18	1/36

Para derivar a função na Eq. (2.8), os autores usaram uma distribuição de equilíbrio genérica em série de potências até segunda ordem da variável \mathbf{u}^* escolhendo os coeficientes dessa expansão de modo a obter equações macroscópicas compatíveis com aquelas das

¹Neste trabalho será empregada a notação de Einstein para somas, onde índices repetidos em uma multiplicação indicam uma soma sobre todas as componentes. Ex: $a_{\alpha} b_{\alpha} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$

equações de Navier-Stokes para um escoamento isotérmico.

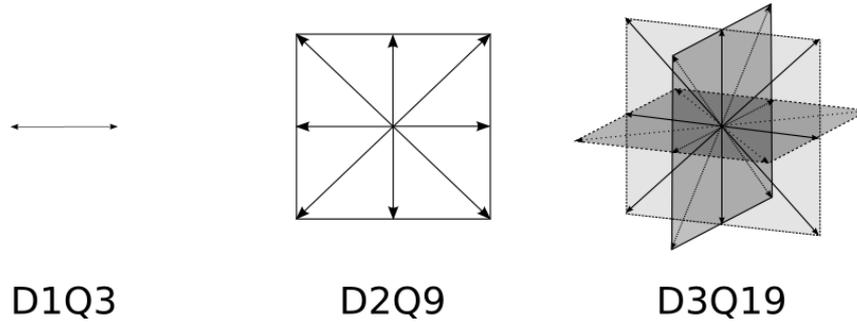


Figura 2: Redes quadradas utilizadas por Qian, d’Humières e Lallemand^[1]

Esta nova abordagem trouxe vantagens como a eliminação dos termos que dão origem à ausência de invariância galileana e à dependência da pressão com a velocidade. Estes modelos se tornaram muito utilizados na área de gases em rede, em virtude principalmente da simplicidade do operador BGK e das vantagens aqui citadas.

2.2 Discretização da Equação de Boltzmann

No fim do século XIX, Ludwig Boltzmann ajudou a fundamentar uma das teorias mais importantes da física atual, a teoria cinética dos gases. Esta teoria tem como objetivo a descrição do comportamento dinâmico dos gases, tendo como ponto de partida a descrição molecular da matéria e as leis da mecânica. A contribuição mais importante de Boltzmann foi a equação que hoje leva seu nome:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = \Omega[f]. \quad (2.9)$$

A função $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, conhecida como função distribuição, nos fornece a fração de partículas do fluido por unidade de volume que ocupam a posição \mathbf{x} e que possuem uma velocidade molecular $\boldsymbol{\xi}$. O termo do lado direito da Eq. (2.9) é conhecido como operador de colisão, já que este leva em conta a interação a curta distância das partículas.

Do ponto de vista conceitual, a LBE é muito semelhante a equação de Boltzmann. Tal semelhança tem sido observada desde sua criação, porém foi somente no trabalho pioneiro realizado por He e Luo^[11] em 1997 que uma conexão formal entre as duas equações foi obtida. Estes autores demonstraram que alguns modelos que utilizam a equação LBGK, em especial o D2Q9, podem ser obtidos a partir da equação de Boltzmann com um operador de colisão do tipo BGK empregando uma discretização combinada do tempo, da posição espacial e do espaço de velocidades. Este processo é realizado de modo que o espaçamento entre os sítios da rede sejam iguais à multiplicação entre as velocidades

discretas e o intervalo de integração δ . A parte essencial desta discretização é a derivação da distribuição de equilíbrio, que é obtida expandindo-se parte da distribuição local de Maxwell-Boltzmann (MB), que pode ser encontrada na Ref. [12], até segunda ordem de \mathbf{u}^* e substituindo a parte não expandida pelo peso discreto w_i . Para calcular o valor dos pesos é primeiramente escolhida uma rede em particular e então é imposto que os momentos até segunda ordem sejam recuperados no espaço discreto, ou seja:

$$\sum_{i=0}^b w_i \psi(\boldsymbol{\xi}_i) f_i^{eq} = \int f^{eq} \psi(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.10)$$

onde $\psi(\boldsymbol{\xi}) = (1, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi})$, transformando assim o problema de encontrar as constantes w_i utilizados por Qian, d'Humières e Lallemand^[1] em um problema de quadratura.

Através desta derivação a LBE pode ser interpretada não só como um método que calcula médias sobre simulações do LGA, mas também como uma forma discreta da equação de Boltzmann. Juntamente com esta nova interpretação, o trabalho desenvolvido por He e Luo^[11] criou um novo caminho para obtenção de modelos LBM, através de outras formas de discretização da equação de Boltzmann.

2.3 Modelos Térmicos

2.3.1 McNamara & Alder (1993)

Como descrito anteriormente, o método LBGK mostrou ser de grande valia para a descrição de fenômenos hidrodinâmicos isotérmicos. O próximo passo no desenvolvimento deste método foi a busca por um modelo capaz de simular de forma satisfatória problemas onde há variações de temperatura.

Uma primeira possibilidade foi estender o tratamento realizado por Qian, d'Humières e Lallemand^[1], que consiste em escolher a forma apropriada para a distribuição de equilíbrio, com objetivo de obter juntamente com as equações da hidrodinâmica uma equação para a evolução do campo de temperatura. Esta questão foi abordada no trabalho desenvolvido por McNamara e Alder^[13] em 1993, utilizando um operador da forma quase-linear apresentada na Eq. (2.6). A temperatura é obtida através da energia interna que por sua vez é calculada por:

$$\rho e^* = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^b f_i (\mathbf{c}_i - \mathbf{u})^2. \quad (2.11)$$

Partindo de uma distribuição de equilíbrio a ser determinada posteriormente, os au-

tores realizam uma análise de escala, conhecida como análise de Chapman-Enskog [12]. Comparando o resultado desta análise com as equações de Navier-Stokes, eles obtêm um conjunto de restrições aos quais a distribuição de equilíbrio deve obedecer para que o comportamento macroscópico seja regido por estas equações.

Através deste procedimento são encontrados sistemas de 13 e 26 equações para os casos bidimensional e tridimensional, respectivamente. De modo a resolver tal sistema, é sugerida a utilização de uma rede de 13 velocidades para o caso bidimensional, o que fornece o número de parâmetros suficientes para solucionar o sistema, porém nenhuma rede é sugerida.

Esta primeira abordagem do uso do LBM para problemas térmicos ficou basicamente concentrada no estudo teórico dos requisitos da distribuição de equilíbrio e apesar de os autores reportarem instabilidades em simulações, nenhum modelo foi explicitamente proposto. Apesar desta limitação, este trabalho demonstra que, pelo menos do ponto de vista teórico, é possível a criação de um LBM térmico.

2.3.2 Alexander, S. Chen & Sterling (1993)

Ainda em 1993, Alexander, Chen e Sterling^[14] publicaram um trabalho que visou apresentar explicitamente o primeiro modelo de rede de Boltzmann capaz de simular escoamentos não isotérmicos. Tendo como base a equação LBGK, foi utilizada uma f_i^{eq} expandida até terceira ordem na velocidade macroscópica \mathbf{u}^* , onde os coeficientes dessa expansão são desconhecidos.

Fazendo uma abordagem semelhante àquela utilizada na Ref. [13], os autores realizaram uma análise de Chapman-Enskog determinando os coeficientes de modo que as equações macroscópicas de conservação da massa, quantidade de movimento e energia tivessem a forma desejada. Para demonstrar o uso desta abordagem, uma distribuição de equilíbrio para uma rede hexagonal foi calculada.

Um dos resultados mais importantes obtidos através da análise de multiescala realizada neste trabalho é que o número de Prandtl, definido como a razão entre a viscosidade cinemática e a difusividade térmica, está limitado a um valor fixo. Assim, neste modelo é impossível escolher de forma independente a viscosidade e a condutividade térmica do fluido. Esta não é uma característica somente deste modelo, mas sim um aspecto importante de todos os modelos térmicos que utilizam um operador de colisão BGK.

Para demonstrar que o modelo calculado não está restrito ao campo teórico, várias simulações foram realizadas, tendo a maioria delas o objetivo de calcular numericamente os coeficientes de transporte, sendo que os resultados concordaram com as previsões teóricas

fornecidas pela análise multiescala. Os autores ainda resolveram um escoamento de Couette, que teve boa concordância com a solução analítica. Apesar do resultado satisfatório, alguns aspectos importantes da análise de um método numérico como a estabilidade numérica e o custo computacional não foram abordados.

2.3.3 Y. Chen, Ohashi e Akiyama (1994)

O trabalho de Chen, Ohashi e Akiyama^[15] tem como motivação principal um estudo realizado por Qian e Orszag^[16], onde foi demonstrado que os modelos LBGK convencionais, particularmente o modelo da Ref. [1], apresentam desvios não-lineares na equação macroscópica para a quantidade de movimento quando comparada com a equação de Navier-Stokes para essa grandeza. Os autores relatam que tais desvios também são encontrados na equação da quantidade de movimento e na equação da energia para o modelo térmico apresentado por Alexander, Chen e Sterling^[14].

Deste modo é proposto um novo modelo que não contenha tais desvios. Isto é realizado seguindo a abordagem já utilizada na Ref. [14], ou seja, expandir a função de equilíbrio em potências de \mathbf{u}^* , mas ao contrario dos trabalhos anteriores esta expansão é levada até a quarta ordem tentando assim eliminar os desvios não lineares.

Os autores utilizam combinações de redes quadradas de maneira a suprir o número de incógnitas necessárias pelas restrições na distribuição de equilíbrio. Tais redes são escolhidas devido a insuficiência das redes hexagonais em descrever tensores isotrópicos de sexta ordem, que por sua vez são necessários para obtenção de uma equação isotrópica para a energia. Obtêm-se então redes de 16 velocidades em duas dimensões e 41 velocidades em três dimensões.

Simulações realizadas pelos autores obtêm boa concordância para os coeficientes de transporte obtidos analiticamente e demonstram que o objetivo de eliminar os desvios dos modelos LBGK convencionais é aparentemente atingido.

2.3.4 Modelos do Escalar Passivo

Confrontados com a insuficiência dos modelos térmicos até então encontrados na literatura, devido principalmente a instabilidade numérica, alguns autores^[2, 3] buscaram um caminho alternativo para resolver simultaneamente, através do LBM, as equações para densidade, quantidade de movimento e energia.

A idéia do modelo proposto é utilizar uma segunda distribuição Q_i que se encarrega da evolução do campo de temperatura, onde estas se relacionam através de:

$$\sum_{i=0}^b Q_i = \rho T. \quad (2.12)$$

Esta função também é calculada através de uma equação similar à LBE, porém escolhe-se um operador de colisão que recupere os efeitos de convecção e difusão em uma análise multiescala realizada sobre Q_i .

Com essa nova distribuição, f_i fica independente da temperatura, conservando a estabilidade numérica existente nos modelos isotérmicos. Já a equação para Q_i depende da velocidade local \mathbf{u} , já que um dos objetivos é recuperar o termo de advecção na equação da energia. Devido a esta propriedade, este modelo foi chamado de escalar passivo.

O ponto negativo deste modelo é a limitação a um certo grupo de problemas térmicos onde este pode ser aplicado, já que o modelo não descreve efeitos como o trabalho realizado pela pressão e a dissipação viscosa. Logo, apesar de ser possível resolver vários problemas com modelos de escalar passivo, este não constitui um modelo definitivo para LBM voltado a escoamentos não isotérmicos.

2.3.5 He, S. Chen e Doolen (1998)

Dando continuidade ao uso de uma segunda distribuição encarregada da evolução do campo de temperatura, He, Chen e Doolen^[17] propuseram estender essa idéia, tornando o modelo do escalar passivo mais completo.

Diferindo dos autores que trabalharam anteriormente com modelos de escalar passivo, He, Chen e Doolen^[17] tiveram como ponto de partida a equação de Boltzmann. Os autores demonstram que multiplicando a equação de Boltzmann, encontrada na Eq. (2.9), por ξ^2 e definindo uma função distribuição de energia, $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \equiv \xi^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, é possível obter uma equação no contínuo para esta nova função.

Aplicando a análise de Chapman-Enskog na equação para a função $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ é obtida uma equação para a energia interna que contém, além dos termos de advecção e difusão, os termos de dissipação viscosa e de trabalho realizado pela pressão. Utilizando o processo de discretização realizado por Shan e He^[18], os autores obtêm uma LBE para distribuição da energia, com um operador de colisão da forma:

$$\Omega_i^g = -\frac{g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau_c} + f_i(\mathbf{x}, t)(\xi_{i,\alpha} - u_\beta) \left[\frac{-\partial_\alpha p + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} + (\xi_{i,\beta} - u_\beta) \partial_\alpha u_\beta}{\rho} \right] \quad (2.13)$$

onde p é a pressão, $\tau_{\alpha\beta}$ é o tensor tensão viscosa e τ_c é o tempo de relaxação da distribuição

de energia interna. O primeiro termo da colisão consiste em um operador BGK e é responsável pela difusão de calor no fluido, enquanto o segundo termo é responsável pelo trabalho e pela dissipação viscosa. Note que este segundo termo depende de propriedades que são calculadas através da distribuição f_i , logo existe uma dependência explícita no cálculo da colisão da distribuição de energia com a distribuição de velocidades.

Este modelo consegue contornar dois dos principais problemas encontrados pelos modelos anteriores baseados em uma distribuição: a estabilidade, já que a evolução para o campo de velocidades é independente e determinada pelo modelo de Qian, d’Humières e Lallemand^[1], e a limitação de um número de Prandtl fixo, que é consequência do fato de termos um tempo de relaxação para cada distribuição. Adicionalmente, este contorna a limitação encontrada pelos modelos do escalar passivo de só lidar com efeitos convectivos e difusivos.

O principal aspecto negativo deste modelo é o custo computacional. Como pode ser observado no termo de colisão na Eq. (2.13), a etapa de colisão da distribuição g_i envolve derivadas espaciais de grandezas tensoriais, o que além de consumir tempo computacional torna o cálculo de g_i não local. Outro ponto importante deste modelo é o fato de a pressão ser independente da energia interna, fazendo com que o fluido que estamos descrevendo não se comporte como um gás ideal, sendo esta uma consequência de utilizarmos um modelo isotérmico para a distribuição de velocidades.

2.3.6 Modelo Híbrido

Em 2003, Lallemand e Luo^[4] realizaram uma interessante revisão dos modelos para escoamentos não isotérmicos que utilizam a estrutura do LBM. Os autores argumentam que apesar dos esforços notáveis realizados por pesquisas anteriores, tais modelos não eram, até aquele momento, capazes de lidar com escoamentos térmicos de maneira satisfatória, devido principalmente a presença de instabilidades numéricas. Apoiados em tal argumentação, estes propuseram um novo meio de resolver escoamentos não isotérmicos usando, pelo menos em parte, o LBM.

A proposta dos autores é utilizar o LBM para encontrar a densidade e a quantidade de movimento do fluido enquanto a equação para temperatura é resolvida simultaneamente utilizando um método de diferenças finitas. As duas equações ficam acopladas, com a temperatura influenciando a pressão e a velocidade \mathbf{u} aparecendo tanto no termo advectivo da equação da temperatura quando no termo de trabalho realizado pela pressão. Devido a estas características o modelo foi denominado modelo híbrido.

Infelizmente, este modelo não pode ser encarado como uma solução definitiva para

o problema mas sim uma alternativa na ausência de um TLBM realmente eficaz. O motivo para tal afirmação é que este não leva em consideração efeitos de dissipação na equação térmica e mesmo sendo possível incorporar estes efeitos isto levaria a um custo computacional elevado devido as derivadas espaciais a serem adicionadas a equação. É importante notar que em um TLBM propriamente dito, esses efeitos são incorporados de forma natural sendo uma consequência direta do processo de colisão local.

2.3.7 Phillipi et al (2006)

Os modelos térmicos que utilizam a forma convencional do LBM com única distribuição apresentados até então na literatura são obtidos de modo “a posteriori”, ou seja, o modelo é deduzido para se enquadrar ao comportamento macroscópico. Assim, não havia sido desenvolvido nenhum trabalho que partindo de uma física mais elementar, como a teoria cinética, chegasse à um modelo térmico consistente, onde a dinâmica macroscópica fosse uma consequência.

Explorando essa alternativa, Phillipi et al.^[5] estenderam a abordagem realizada anteriormente por He e Luo^[11], propondo uma nova maneira de discretizar as velocidades e a distribuição de equilíbrio, utilizando um método de quadratura com abscissas prescritas, onde a conservação dos momentos de alta ordem da função distribuição de Maxwell-Boltzmann é realizada de forma sistemática.

Conforme descrito no primeiro trabalho de modelos térmicos realizado por McNamara e Alder^[13], a análise multiescala de modelos não isotérmicos envolve momentos de quarta ordem da distribuição de equilíbrio discreta. Desse modo, os autores realizam o procedimento de discretização até quarta ordem o que resulta a modelos térmicos com redes de 25 velocidades e 37 velocidades para duas dimensões.

Como este trabalho é voltado para o processo teórico de discretização da equação de Boltzmann nenhum estudo sobre a aplicação prática ou a análise de Chapman-Enskog, com o intuito de demonstrar as equações macroscópicas que regem o sistema, são apresentados.

2.3.8 Operador com dois tempos de relaxação

Como discutido anteriormente, a utilização do operador BGK em problemas térmicos leva a um número de Prandtl fixo o que impossibilita o controle da viscosidade e da condutividade térmica de forma independente. Com o objetivo de contornar tal limitação, Phillipi et al.^[19] sugeriram a utilização de um operador com dois tempos de relaxação ou

two relaxation time (TRT):

$$\Omega_i = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau_1} - \frac{f_i^{eq} \tau_{\alpha\beta} (\xi_{i,\alpha} - u_\alpha) (\xi_{i,\beta} - u_\beta)}{\rho e^2 \tau_2} \quad (2.14)$$

onde o tensor tensão viscosa é calculado por:

$$\tau_{\alpha\beta} = \sum_{i=0}^b [(f_i - f_i^{eq}) (\xi_{i,\alpha} - u_\alpha) (\xi_{i,\beta} - u_\beta)] \quad (2.15)$$

Este operador pode ser deduzido a partir do operador de colisão linearizado da equação de Boltzmann, utilizando-se algumas hipóteses adicionais. O procedimento de obtenção deste operador é descrito em detalhe no apêndice B.

O trabalho desenvolvido pelos autores limita-se a dedução deste operador e a obtenção das equações macroscópicas quando este é utilizado com a equação de Boltzmann, demonstrando que no contínuo é possível variar o número de Prandtl do fluido. Este trabalho restringi-se a propor o operador, sem abordar simulações com sua utilização na LBE e sem apressar uma análise multiescala no caso discreto, o que é um dos objetivos desta dissertação.

3 Formas discretas da equação de Boltzmann

Como os modelos que são objeto de estudo deste trabalho são obtidos como formas discretas da equação de Boltzmann, neste capítulo são descritos os métodos utilizados para derivação de tais modelos. Primeiramente discute-se a discretização da variável temporal, passando então para a parte crucial que é a discretização da variável velocidade molecular. Por fim, os modelos obtidos pelo procedimento descrito são apresentados.

3.1 Discretização do tempo

O processo de derivação de uma forma discreta da equação de Boltzmann começa na variável temporal. Os passos utilizados aqui tem como ponto de partida o trabalho realizado por He e Luo^[11], porém, como será discutido a seguir, correções podem ser incorporadas a esta abordagem.

Utilizando uma curva paramétrica de \mathbf{x} que siga a relação $\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \boldsymbol{\xi}$, pode-se escrever o lado direito da equação de Boltzmann, encontrada na Eq. (2.9), como uma derivada total no tempo:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \frac{df}{dt} = \Omega[f]. \quad (3.1)$$

Neste trabalho serão utilizados somente operadores de colisão que envolvam o termo de relaxação BGK para o equilíbrio local. Assim, explicitar-se-á o operador de colisão como sendo desta forma, adicionada de um termo extra que poderá incorporar ao modelo a presença de uma força externa ou ainda assumir o papel de uma correção no operador BGK. Utilizando tal forma para o operador, pode-se escrever a Eq. (3.1) como:

$$\frac{df}{dt} = -\frac{f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau} + F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t). \quad (3.2)$$

A distribuição de equilíbrio utilizada na equação anterior é conhecida como distri-

buição de Maxwell-Boltzmann e tem a seguinte forma para um espaço físico com D dimensões:

$$f^{eq}(\boldsymbol{\xi}) = \rho \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{D/2} e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi}-\mathbf{u})^2}{2k_B T/m}}, \quad (3.3)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e m é a massa de uma molécula do fluido. A densidade, velocidade e temperatura são respectivamente calculadas por:

$$\rho = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.4)$$

$$\rho \mathbf{u} = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.5)$$

$$\rho \frac{k_B T}{m} = \frac{1}{2} \int (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}. \quad (3.6)$$

De modo a simplificar a integração que será realizada posteriormente sobre a variável temporal, multiplica-se ambos os lados da Eq. (3.2) por $e^{t/\tau}$, o que permite escrever:

$$\frac{d(e^{t/\tau} f)}{dt} = \frac{e^{t/\tau}}{\tau} (f^{eq} + F\tau) \equiv \frac{e^{t/\tau}}{\tau} g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t). \quad (3.7)$$

A definição da função $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ é realizada com o objetivo de tornar o cálculo mais compacto.

O objetivo é obter uma relação que forneça o valor da função distribuição no tempo $t + \delta$ a partir do conhecimento do valor desta no tempo t . Para isso integra-se a Eq. (3.7) no tempo, com extremos de integração t e $t + \delta$:

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - e^{-\delta/\tau} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{e^{-\delta/\tau}}{\tau} \int_t^{t+\delta} e^{(\bar{t}-t)/\tau} g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, \bar{t}) d\bar{t} \quad (3.8)$$

Na derivação da Eq. (3.8) nenhuma aproximação foi necessária, porém para dar seqüência ao processo temos que conhecer a forma da dependência temporal de $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, \bar{t})$, para que a integral no lado direito desta equação possa ser calculada. Com esta finalidade, realiza-se a expansão desta função em torno do tempo t :

$$g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, \bar{t}) = g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \left[\frac{g(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\delta} \right] (\bar{t} - t) + \mathcal{O}(\delta^2) \quad (3.9)$$

Nota-se que, apesar de ser utilizada uma derivada discreta com erros de ordem δ para escrever a expansão em série, este termo é multiplicado por $(\bar{t} - t)$ cujos valores são menores que δ , logo o erro devido a essa simplificação é na verdade de segunda ordem para $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$. Desprezando os termos de segunda ordem na expansão e calculando a integral no lado esquerdo da Eq. (3.8):

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - e^{-\delta/\tau} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = (1 - e^{-\delta/\tau})g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \left(1 - \frac{\tau}{\delta} + \frac{\tau}{\delta}e^{-\delta\tau}\right) [g(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)]. \quad (3.10)$$

O próximo passo é expandir as exponenciais em série de δ . Alguns autores divergem no modo como este procedimento é realizado, o que leva a dois métodos diferentes: o implícito e o explícito.

3.1.1 Método Explícito

O método explícito é o mais conhecido e utilizado em LBM, e é obtido aproximando todas as exponenciais na Eq. (3.10) em série de Taylor até primeira ordem em delta:

$$e^{-\delta/\tau} \approx 1 - (\delta/\tau) \quad (3.11)$$

Com esta aproximação, o segundo termo do lado direito da Eq. (3.10) se anula e a seguinte equação discreta para a evolução da função distribuição é obtida:

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\frac{f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau/\delta} + \delta F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \quad (3.12)$$

Esta derivação foi inicialmente proposta por He e Luo^[11]. O procedimento apresentado pelos autores recupera a forma do LBM até então utilizada. Infelizmente, este procedimento leva a um método discreto com erros da ordem de δ no tempo e não de δ^2 como se supunha originalmente, o que levou outros autores a proporem o método implícito.

3.1.2 Método Implícito

O método implícito foi sugerido por He, Chen e Doolen^[17] e teve como motivação a eliminação dos erros que surgem na equação da energia do modelo de duas distribuições quando se aplica a discretização convencional, que leva ao método explícito.

A diferença na derivação destes dois métodos surge na expansão das exponenciais da Eq. (3.10). Nesta equação nota-se que uma das exponenciais é dividida por δ , logo a expansão dessa exponencial deve ser levada até segunda ordem em δ , para que o erro na equação seja de δ^2 . Expandindo o termo em questão até segunda ordem:

$$\frac{\tau}{\delta} e^{-\delta/\tau} \approx \frac{\tau}{\delta} - 1 + \frac{1}{2} \frac{\delta}{\tau}. \quad (3.13)$$

Substituindo esta expansão na Eq. (3.10) e multiplicando ambos os lados da equação resultante por $(1 + \frac{\delta}{2\tau})$ e desprezando erros de δ^2 :

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \\ \frac{\delta}{2\tau} [g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + g(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta)]. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Nesta aproximação, obtemos uma equação implícita para $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ devido à presença do termo $g(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta)$, que não nos permite isolar $f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta)$. Define-se então a função

$$\tilde{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \equiv \left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - \frac{\delta}{2\tau} g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t), \quad (3.15)$$

o que permite obter a seguinte relação implícita para a evolução da função distribuição:

$$\tilde{f}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - \tilde{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\frac{\tilde{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{(\tau/\delta + 0.5)} + \frac{\tau F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\tau/\delta + 0.5}. \quad (3.16)$$

É importante notar que apesar da aparente semelhança entre as Eqs. (3.12) e (3.16), a diferença não se encontra somente no fator 1/2 adicionado ao tempo de relaxação. As equações fornecem descrições diferentes pois as grandezas macroscópicas que determinam a distribuição de equilíbrio são calculadas a partir da função distribuição $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ e não da função $\tilde{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$.

3.2 Discretização das velocidades

O próximo passo na obtenção de uma forma discreta da equação de Boltzmann consiste em substituir a variável contínua $\boldsymbol{\xi}$ por um conjunto finito e enumerável de velocidades $\boldsymbol{\xi}_i$, encontrando também a forma correspondente para a distribuição de equilíbrio discreta.

Ao fazer esta substituição, a variável \mathbf{x} também é discretizada. Isto pode ser observado através da Eq. (3.12), onde para calcular $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_i, t)$ é necessário conhecer o valor da função distribuição no ponto $\mathbf{x} - \delta\boldsymbol{\xi}_i$ no tempo $t - \delta$. Logo, escolhendo um conjunto de vetores $\boldsymbol{\xi}_i$ que gere uma rede regular no espaço, só é necessário calcular a evolução da função distribuição em um número finito de pontos do espaço, conforme mostra a Fig. (3) para a rede D2Q9.

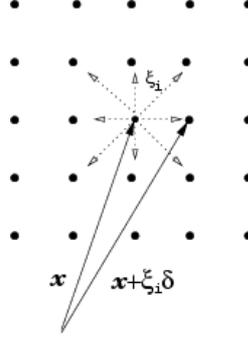


Figura 3: Pontos no espaço gerados pelos vetores $\boldsymbol{\xi}_i$ de uma rede D2Q9.

A obtenção da distribuição de equilíbrio discreta é necessária porque o essencial para a dinâmica macroscópica dos modelos discretos, como pode ser observado através de uma análise multiescala, é que os momentos ou médias desta distribuição sejam iguais aos da distribuição de MB. Logo não podemos simplesmente usar a distribuição MB calculada em $\boldsymbol{\xi}_i$, pois apesar de obtermos uma igualdade ponto a ponto, os momentos das duas distribuições seriam diferentes. Como momento de ordem n da função distribuição entende-se o tensor definido pela seguinte integral¹ no caso onde $\boldsymbol{\xi}$ é uma variável contínua,

$$\langle \varphi_{r_n}^{(n)} \rangle = \int \varphi_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} \quad \varphi_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o) \equiv \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \dots \xi_{\alpha_n} \quad (3.17)$$

e pela seguinte quadratura quando a velocidade molecular é discreta:

$$\langle \varphi_{r_n}^{(n)} \rangle = \sum_{i=0}^b \mathcal{W}_i \varphi_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_i) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_i, t). \quad (3.18)$$

onde \mathcal{W}_i são pesos a serem determinados.

Observa-se também que, em problemas usuais, quanto maior a ordem do momento, menor é sua influência sobre a dinâmica macroscópica do escoamento. Assim, nosso problema se resume a encontrar uma distribuição de equilíbrio discreta e um conjunto de vetores velocidade $\boldsymbol{\xi}_i$ de modo que os momentos de baixa ordem sejam iguais ao da

¹Se A é um tensor de ordem n e $r_n = \alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_n$ é o seu conjunto de n índices que caracteriza um de seus elementos, denotaremos o elemento desse tensor como $A_{r_n}^{(n)}$

distribuição de MB.

No presente trabalho estudar-se-à os modelos obtidos através do método das abscissas prescritas proposto por Philippi et al.^[5]. Para realizar este procedimento inicialmente é necessária a utilização das velocidades adimensionais $\mathbf{u}_o = (k_B T_o/m)^{-\frac{1}{2}} \mathbf{u}$ e $\boldsymbol{\xi}_o = (k_B T_o/m)^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\xi}$, onde T_o é uma temperatura de referência. O uso de T_o é essencial para que as velocidades adimensionais não dependam da temperatura. Utilizando estas velocidades adimensionais, a distribuição de MB na Eq. (3.3) pode ser reescrita como:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_o, t) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T_o} \right)^{D/2} \frac{\rho}{(\Theta + 1)^{\frac{D}{2}}} e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi}_o - \mathbf{u}_o)^2}{\Theta + 1}} \quad (3.19)$$

onde $\Theta = \frac{T}{T_o} - 1$ é uma temperatura adimensional. Esta grandeza é bastante útil pois quando a temperatura estiver próxima da temperatura de referência termos de alta ordem em Θ poderão ser desprezados.

Para aplicar o método das abscissas é necessário primeiramente expandir a distribuição de MB em polinômios tensoriais de Hermite², na seguinte forma³:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_o, t) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T_o} \right)^{D/2} e^{-\boldsymbol{\xi}_o^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{r_n}^{(n)} \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o) \quad (3.20)$$

sendo que os coeficientes $a_{r_n}^{(n)}$ podem ser obtidos através da ortogonalidade dos polinômios tensoriais de Hermite e da Eq. (3.19), o que fornece a relação:

$$a_{r_n}^{(n)} = \frac{k_B T_o}{m} \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_o, t) \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o) d\boldsymbol{\xi}_o \quad (3.21)$$

Para entender a motivação para o uso desta expansão é preciso primeiramente notar que o monômio $\varphi_{r_n}^{(n)}$ pode ser escrito com uma combinação de tensores polinomiais de Hermite de ordem menor ou igual a n , ou seja,

$$\varphi_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o) = \sum_{m=0}^n b_{r_m}^{(m)} \mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\boldsymbol{\xi}_o) \quad (3.22)$$

Se desprezarmos polinômios de Hermite com ordem superior a N na Eq. (3.20), denotando essa distribuição de equilíbrio aproximada por $f^{eq,N}$, ainda é possível recuperar os mesmos

²Este polinômio pode ser definido de maneiras distintas. Para maiores detalhes da definição adotada neste trabalho e propriedades destes polinômios consultar o Apêndice A.

³Aqui faremos uso da convenção de Einstein para soma, que convencionamos que quando índices repetidos indicam uma soma sobre os índices, ou seja, o produto $A_{r_n}^{(n)} B_{r_n}^{(n)} = A_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}^{(n)} B_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}^{(n)}$ representa uma soma sobre todos os valores dos índices

momentos de ordem menor ou igual a N . Este resultado pode ser observado calculando o momento de ordem $m \leq N$ com a forma expandida da distribuição de equilíbrio:

$$\begin{aligned} \int f^{eq} \varphi_{r_m}^{(m)}(\boldsymbol{\xi}_o) d\boldsymbol{\xi} &= \int f^{eq,N} \varphi_{r_m}^{(m)}(\boldsymbol{\xi}_o) d\boldsymbol{\xi}_o + \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{a_{r_n}^{(n)}}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}} \underbrace{\int e^{-\xi_o^2/2} \varphi_{r_m}^{(m)}(\boldsymbol{\xi}_o) \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o) d\boldsymbol{\xi}_o}_{=0} \\ &= \int f^{eq,N} \varphi_{r_m}^{(m)}(\boldsymbol{\xi}_o) d\boldsymbol{\xi}_o \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde o segundo termo se anula devido a ortogonalidade entre os polinômios tensoriais de Hermite.

Outra conclusão que se pode observar através das Eqs. (3.22) e (3.23) é que, ao calcular um momento da distribuição de equilíbrio na forma expandida, este se transforma numa soma de produtos internos entre polinômios tensoriais de Hermite com ordem menor ou igual a N :

$$\int \varphi_{r_n}^{(n)} f^{eq,N}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^N a_{r_l}^{(l)} b_{r_m}^{(m)} \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int e^{-\xi_o^2/2} \mathcal{H}_{r_l}^{(l)}(\boldsymbol{\xi}_o) \mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\boldsymbol{\xi}_o) d\boldsymbol{\xi}_o \quad (3.24)$$

Calculando este mesmo momento utilizando velocidades discretas e igualando ambos, obtém-se que a seguinte relação precisa ser satisfeita:

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int e^{-\xi_o^2/2} \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o) \mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\boldsymbol{\xi}_o) d\boldsymbol{\xi}_o = \sum_{i=0}^b w_i \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_{o,i}) \mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\boldsymbol{\xi}_{o,i}) \quad (3.25)$$

para todo $n \leq N$ e $m \leq N$, onde definimos o peso adimensional w_i como:

$$w_i \equiv \left(\frac{m}{2\pi k_B T_o} \right)^{D/2} \mathcal{W}_i e^{-\xi_{o,i}^2/2}. \quad (3.26)$$

Logo, mantendo as relações de ortogonalidade e norma dos polinômios de Hermite até uma ordem N conforme a Eq. (3.25) e utilizando $f^{eq,N}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_i, t)$ como distribuição de equilíbrio discreta, teremos os mesmos momentos até ordem N que a distribuição de MB.

Nas quadraturas convencionais os vetores $\boldsymbol{\xi}_{o,i}$, assim como os pesos w_i , são incógnitas, sendo conhecidos como abscissas da quadratura. Porém, como descrito anteriormente, é necessário impor que os vetores velocidades gerem uma rede regular. Desse modo escolhemos vetores velocidades que cumpram essa exigência, a menos de um fator de

escala comum a todas as velocidades.

Entretanto, a Eq. (3.25) fornece um sistema com um grande número de equações, já que impõe-se que a norma de cada polinômio e a ortogonalidade entre todos os polinômios até uma determinada ordem sejam respeitadas pela quadratura. Conseqüentemente, é necessário um grande número de incógnitas w_i , o que significa um grande número de velocidades discretas. Porém Philippi et al.^[5] demonstraram que se o conjunto de vetores $\xi_{o,i}$ for simétrico em relação a reflexão dos eixos coordenados, as equações de imposição de ortogonalidade são linearmente dependentes das equações de imposição da norma, ou seja, se a rede obedecer esta simetria nosso sistema fica restrito as equações em que $m = n$.

Podemos escrever os vetores velocidade molecular do caso discreto como $\xi_{o,i} = a\mathbf{c}_i$, onde a é o fator de escala a ser determinado pela quadratura e \mathbf{c}_i são vetores cujas componentes são valores inteiros⁴. Vale observar que a velocidade dimensional se relaciona com \mathbf{c}_i através de:

$$\xi_i = a\sqrt{\frac{k_B T_o}{m}}\mathbf{c}_i \quad (3.27)$$

Logo, o conjunto de equações proveniente da Eq. (3.25) que formam o sistema a ser resolvido quando utilizamos uma rede com simetria por reflexão fica:

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int e^{-\xi_o^2/2} [\mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\xi_o)]^2 d\xi_o = \sum_{i=0}^b w_i [\mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(a\mathbf{c}_i)]^2 \quad (3.28)$$

Para obtermos um modelo de rede de Boltzmann que recupere momentos até uma determinada ordem N , primeiramente contabilizamos o número de equações independentes resultantes da aplicação da Eq. (3.28) para todos os polinômios de Hermite até essa ordem. Escolhemos então um conjunto apropriado de vetores \mathbf{c}_i para que o número de incógnitas seja igual ou maior que o número de equações. Por questões de simetria, os pesos w_i correspondentes a vetores \mathbf{c}_i que possuem a mesma norma devem ter pesos iguais, assim o número de velocidades necessárias é sempre maior que o número de equações.

Com o objetivo de simplificar a implementação dos métodos e para fazer analogia com os LBM já existentes, multiplica-se as equações de evolução da função distribuição por \mathcal{W}_i , definindo $f_i(x, t) \equiv \mathcal{W}_i f(\mathbf{x}, \xi_i, t)$, $\tilde{f}_i(x, t) \equiv \mathcal{W}_i \tilde{f}(\mathbf{x}, \xi_i, t)$ e $F_i(x, t) \equiv \mathcal{W}_i F(\mathbf{x}, \xi_i, t)$. Realizando esta operação sobre a Eq. (3.12) para o método explícito obtém-se:

⁴No restante deste trabalho usaremos \mathbf{c}_i como a velocidade adimensional, restringindo o uso de $\xi_{o,i}$ a esta etapa conceitual sobre a discretização.

$$f_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta, t + \delta) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau/\delta} + \delta F_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.29)$$

Analogamente, para o método implícito da Eq. (3.16) tem-se:

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta, t + \delta) - \tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{(\tau/\delta + 0.5)} + \frac{\tau F_i(\mathbf{x}, t)}{\tau/\delta + 0.5} \quad (3.30)$$

Com esta definição os pesos da quadratura já estão incluídos na distribuição $f_i(\mathbf{x}, t)$, o que torna desnecessário o uso destes pesos em cálculos como o da densidade e da quantidade de movimento. Utilizando os pesos w_i obtidos pelo método aqui descrito, podemos escrever a distribuição de equilíbrio discreta das equações anteriores como:

$$f_i^{eq} = w_i \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_{r_n}^{(n)} \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(a \mathbf{c}_i) \quad (3.31)$$

sendo que esta distribuição tem os mesmos momentos até a ordem N que a distribuição de MB.

3.2.1 Modelo de Segunda Ordem

O modelo de segunda ordem em duas dimensões resulta, em razão da simetria dos polinômios de Hermite em relação as coordenadas x e y , em um sistema de quatro equações linearmente independentes. Desse modo é utilizada a rede D2V9, mostrada na Fig. (4). Os vetores c_i dessa rede são idênticos aos da D2Q9 porém como a distribuição de equilíbrio não é a mesma adotaremos esta nova nomenclatura. A solução do sistema leva aos pesos e fator de escala mostrados na Tab. (2).

Tabela 2: Pesos e fator de escala para a rede D2V9

i	w_i
0	4/9
1-4	1/9
5-8	1/36
a	$\sqrt{3}$

Usando a Eq. (3.31) e rearranjando os termos a seguinte distribuição de equilíbrio de segunda ordem é obtida:

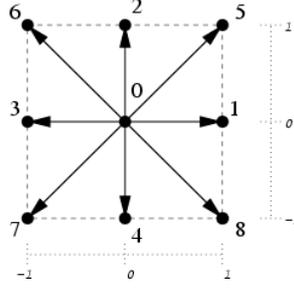


Figura 4: Rede D2V9

$$f_i^{eq,2} = \rho w_i \left[1 + a^2 c_{i,\alpha} u_\alpha^* + \frac{a^4}{2} (c_{i,\alpha} u_\alpha^*)^2 - \frac{a^2}{2} (u_\alpha^* u_\alpha^*) + \Theta \left(\frac{a^2}{2} c_{i,\alpha} c_{i,\alpha} - 1 \right) \right] \quad (3.32)$$

As grandes ρ e u^* são calculadas conforme as Eqs. (2.4) e (2.5). A variável macroscópica Θ pode ser calculada notando-se que:

$$\Theta = \frac{T}{T_o} - 1 = \frac{k_B T/m}{k_B T_o/m} - 1 = \frac{a^2 e}{a^2 k_B T_o/m} - 1 = a^2 e^* - 1 \quad (3.33)$$

onde e^* é obtido através da Eq. (2.11).

Um aspecto importante da distribuição mostrada na Eq. (3.32) é que impondo $\Theta = 0$, obtemos a mesma distribuição de equilíbrio encontrada na Eq. (2.8) derivada por Qian, d'Humières e Lallemand^[1]. Isto demonstra que o modelo D2Q9 é uma forma discreta da equação de Boltzmann restrita ao caso isotérmico.

3.2.2 Modelo de Terceira Ordem

Para terceira ordem em duas dimensões, o sistema contém seis equações. A rede com menor número de velocidades encontrada em que existe solução para os pesos e fator de escala é a rede D2V17, mostrada na Fig. (5).

A distribuição de equilíbrio para este modelo pode ser escrita como:

$$f_i^{eq,3} = f_i^{eq,2} + \rho w_i \left[\frac{a^4}{2} \Theta (c_i^2) (c_{i,\alpha} u_\alpha^*) + \frac{a^6}{3} (c_{i,\alpha} u_\alpha^*)^3 - 2\Theta a^2 (c_{i,\alpha} u_\alpha^*) - \frac{a^4}{2} (u_\beta^* u_\beta^*) (c_{\alpha,i} u_\alpha^*) \right]. \quad (3.34)$$

onde os pesos e o fator de escala podem ser encontrados na Tab. (3).

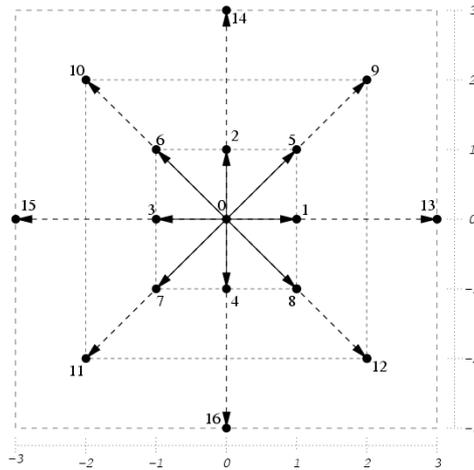


Figura 5: Rede D2V17

3.2.3 Modelos de Quarta Ordem

Para finalizar este capítulo sobre discretização, abordar-se-á modelos de quarta ordem na função distribuição. Como será discutido mais adiante no capítulo 4, através da análise de Chapman-Enskog observa-se que nem todos os momentos de quarta ordem são necessários para uma descrição adequada da equação da energia. Portanto, alguns modelos podem ser obtidos de modo a recuperar, além da terceira ordem, momentos de quarta ordem do tipo $\langle \xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta \rangle$.

O método proposto por Philippi et al.^[5] para incluir somente alguns momentos de uma determinada ordem, é utilizar uma ortogonalização de Gramm-Schmidt. Usando o monômio $\xi^2 \xi_x \xi_x$ como exemplo, este procedimento consiste em escrever a nova função que fará parte da expansão na forma:

Tabela 3: Pesos e fator de escala para a rede D2V17

i	w_i
0	$\frac{575+193\sqrt{193}}{8100}$
1-4	$\frac{3355-91\sqrt{193}}{18000}$
5-8	$\frac{655+17\sqrt{193}}{27000}$
9-12	$\frac{685-49\sqrt{193}}{54000}$
13-16	$\frac{1445-101\sqrt{193}}{162000}$
a	$\sqrt{\frac{5(25+\sqrt{193})}{72}}$

$$\psi_{xx}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}) = \xi^2 \xi_x \xi_x + \sum_{n=0}^3 b_{r_n}^{(n)} \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.35)$$

Então impõe-se que esta nova função seja ortogonal aos polinômios da expansão, ou seja,

$$\int e^{-\xi_o^2/2} \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o) \psi_{xx}^{(4)} d\boldsymbol{\xi}_o = 0. \quad (3.36)$$

Fazendo tal imposição para todos os polinômios com ordem menor ou igual a três obtemos as equações necessárias para encontrar os coeficientes $b_{r_n}^{(n)}$. Encontrado esses coeficientes, passamos a ortogonalização de $\xi^2 \xi_y \xi_y$ procedendo de maneira análoga, porém impondo que esta nova função $\psi_{yy}^{(4)}$ seja também ortogonal a função $\psi_{xx}^{(4)}$. Realizada a ortogonalização desses três monômios e normalizando as funções resultantes obtemos:

$$\psi_{xx}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\xi_x^4 + \xi_y^2 \xi_x^2 - 7\xi_x^2 - \xi_y^2 + 4}{2\sqrt{7}} \quad (3.37)$$

$$\psi_{yy}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{-\xi_x^4 + 6\xi_y^2 \xi_x^2 + 7\xi_y^4 - 48\xi_y^2 + 24}{8\sqrt{21}} \quad (3.38)$$

$$\psi_{xy}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\xi_y \xi_x^3 + \xi_y^3 \xi_x - 6\xi_y \xi_x}{2\sqrt{3}} \quad (3.39)$$

Com essa novas funções podemos escrever a distribuição de equilíbrio até quarta ordem incompleta:

$$f^{eq,4i}(\boldsymbol{\xi}_o) = \frac{e^{-\xi_o^2/2}}{2\pi k T_o} \left[\sum_{n=0}^3 \frac{1}{n!} a_{r_n}^{(n)} \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o) + a_{xx}^{(4)} \psi_{xx}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}_o) + a_{yy}^{(4)} \psi_{yy}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}_o) + a_{xy}^{(4)} \psi_{xy}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}_o) \right] \quad (3.40)$$

onde os coeficientes $a_{\alpha\beta}^{(4)}$ são obtidos integrando-se sobre a distribuição de MB:

$$a_{\alpha\beta}^{(4)} = \frac{k_B T_o}{m} \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_o, t) \psi_{\alpha\beta}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}_o) d\boldsymbol{\xi}_o \quad (3.41)$$

Os pesos são encontrados impondo-se que a norma calculada pela quadratura deve ser igual a norma no contínuo tanto para os polinômios de Hermite até terceira ordem quanto para as três funções $\psi_{\alpha\beta}^{(4)}$. O menor número necessário de velocidades é 25, sendo que duas soluções são encontradas. Na Fig. (6) podem ser visualizados os vetores \mathbf{c}_i para as duas redes.

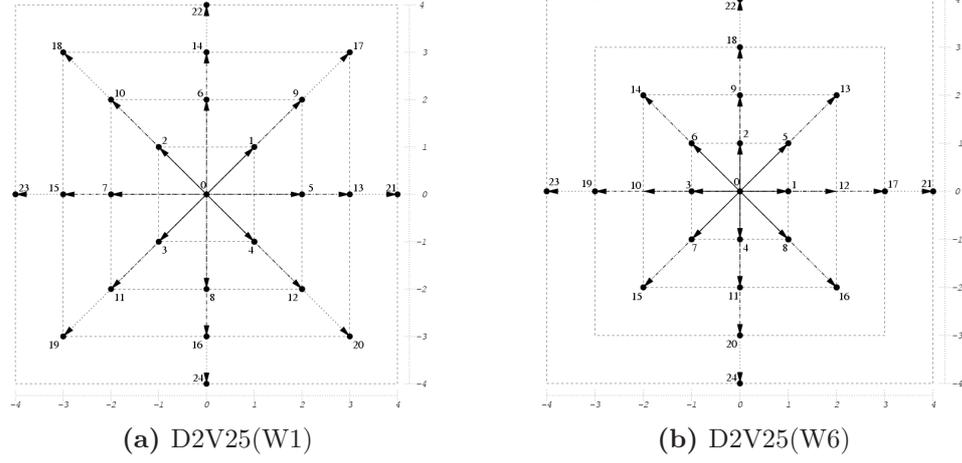


Figura 6: Redes de 25 velocidades para modelo de quarta ordem incompleto.

A distribuição de equilíbrio discreta que é comum as duas rede é dada por:

$$\begin{aligned}
 f_i^{eq,4i} = f_i^{eq,3} + \rho w_i & \left[\frac{a^4}{8} \Theta^2 (c_{i,\alpha} c_{i,\alpha})^2 - a^2 \Theta^2 (c_{i,\alpha} c_{i,\alpha}) + a^2 \Theta (u_\alpha^* u_\alpha^*) - \frac{a^4}{4} (u_\alpha^* u_\alpha^*) (c_{i,\beta} c_{i,\beta}) \Theta \right. \\
 & - \frac{a^4}{4} (u_\alpha^* u_\alpha^*) (c_{i,\beta} c_{i,\beta}) \Theta - \frac{3a^4}{2} \Theta (u_\alpha^* c_{i,\alpha})^2 + \frac{a^6}{4} \Theta (u_\alpha^* c_{i,\alpha})^2 (c_{i,\beta} c_{i,\beta}) + \frac{a^4}{8} (u_\alpha^* u_\alpha^*)^2 \\
 & \left. - \frac{a^6}{4} (u_\alpha^* c_{i,\alpha})^2 (u_\beta^* u_\beta^*) - \frac{a^8}{192} (u_\alpha^* u_\alpha^*)^2 (c_{i,\beta} c_{i,\beta})^2 + \frac{a^8}{24} (u_\alpha^* u_\alpha^*) (c_{i,\beta} c_{i,\beta}) (u_\gamma^* c_{i,\gamma})^2 \right]
 \end{aligned} \quad (3.42)$$

onde os valores dos pesos e o fator de escala obtidos para cada uma das redes podem ser encontrados na Tab. (4).

O caso onde todos momentos de quarta ordem são recuperados resulta em um sistema de 9 equações linearmente dependentes, sendo que a menor rede encontrada em que existe solução para o sistema é a D2V37, encontra na Fig. (7).

A distribuição de equilíbrio discreta de quarta ordem tem a forma:

$$\begin{aligned}
 f_i^{eq,4} = f_i^{eq,3} + \rho w_i & \left[\frac{a^4}{8} (u_\alpha^* u_\alpha^*)^2 + a^2 \Theta (u_\alpha^* u_\alpha^*) + \Theta^2 - \frac{a^6}{4} (u_\beta^* u_\beta^*) (c_{i,\alpha} u_\alpha^*)^2 \right. \\
 & - \frac{3a^4}{2} \Theta (c_{i,\alpha} u_\alpha^*)^2 - a^2 \Theta^2 (c_{i,\alpha} c_{i,\alpha}) - \frac{a^4}{4} \Theta (u_\beta^* u_\beta^*) (c_{i,\alpha} c_{i,\alpha}) \\
 & \left. + \frac{a^8}{24} (c_{i,\alpha} u_\alpha^*)^4 + \frac{a^6}{4} \Theta (c_{i,\alpha} u_\alpha^*)^2 (c_{i,\beta} c_{i,\beta}) + \frac{a^4}{8} \Theta^2 (c_{i,\alpha} c_{i,\alpha})^2 \right]
 \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde os pesos e fator de escala podem ser encontrados na Tab. (5).

Tabela 4: Pesos para as redes do tipo D2V25

i	D2V25(W1)	D2V25(W6)
0	$\frac{2592a^8 - 7380a^6 + 11165a^4 - 7950a^2 + 2148}{2592a^8}$	$\frac{16(6849 - 1135\sqrt{33})}{3(15 - \sqrt{33})^4}$
1-4	$\frac{12a^4 - 13a^2 + 4}{32a^8}$	$\frac{64(2619 - 437\sqrt{33})}{15(15 - \sqrt{33})^4}$
5-8	$\frac{-24a^6 - 89a^4 - 80a^2 + 24}{240a^8}$	$\frac{512(7 - \sqrt{33})}{(15 - \sqrt{33})^4}$
9-12	$\frac{-3a^4 + 10a^2 - 4}{320a^8}$	$\frac{8(159 + 47\sqrt{33})}{15(15 - \sqrt{33})^4}$
13-16	$\frac{144a^6 - 574a^4 + 735a^2 - 264}{11340a^8}$	$\frac{2(17 + \sqrt{33})}{(15 - \sqrt{33})^4}$
17-20	$\frac{4a^4 - 15a^2 + 12}{12960a^8}$	$\frac{64(99 - 13\sqrt{33})}{105(15 - \sqrt{33})^4}$
21-24	$\frac{-12a^6 + 49a^4 - 70a^2 + 36}{13440a^8}$	$\frac{4(-93 + 19\sqrt{33})}{105(15 - \sqrt{33})^4}$
a	$\frac{1}{6} \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{53(1081 - 18\sqrt{52413})^{1/3} + 251 - (1081 - 18\sqrt{52413})^{2/3}}{(1081 - 18\sqrt{52413})^{1/3}} \right)}$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2} (15 - \sqrt{33})}$

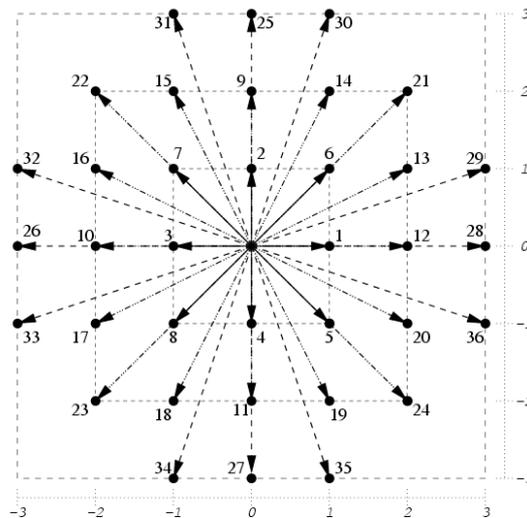


Figura 7: Rede D2V37

Tabela 5: Pesos e fator de escala da rede D2V37 , onde $R = (67 + 36\sqrt{30})^{1/3}$.

i	w_i
0	$\frac{56266R^2 - 7^{2/3}(19991 - 338\sqrt{30})R + 7^{4/3}(14323 + 6238\sqrt{30})}{264600R^2}$
1-4	$\frac{31206R^2 - 7^{2/3}(3201 + 466\sqrt{30})R - 7^{4/3}(2427 - 706\sqrt{30})}{264600R^2}$
5-8	$\frac{29232R^2 + 7^{2/3}(3888 + 265\sqrt{30})R + 7^{4/3}(216 - 1027\sqrt{30})}{529200R^2}$
9-12	$\frac{42R^2 + 7^{2/3}(33 + 2\sqrt{30})R - \sqrt[3]{7}(3 + 62\sqrt{30})}{3600R^2}$
13-20	$\frac{1638R^2 + 7^{2/3}(1647 + 4\sqrt{30})R - 7^{4/3}(891 + 496\sqrt{30})}{264600R^2}$
21-24	$\frac{-126R^2 + 7^{2/3}(1161 + 194\sqrt{30})R + 7^{4/3}(1107 - 242\sqrt{30})}{1058400R^2}$
25-28	$\frac{14R^2 + 7^{2/3}(131 + 10\sqrt{30})R + 7^{4/3}(17 - 34\sqrt{30})}{264600R^2}$
29-36	$\frac{-168R^2 + 7^{2/3}(228 + 71\sqrt{30})R + 7^{4/3}(516 - 29\sqrt{30})}{1058400R^2}$
a	$\frac{1}{6} \sqrt{49 - \frac{17(7)^{2/3}}{R}} + 7^{1/3} R$

4 *Análise de Chapman-Enskog*

Ainda que inspirado na equação de Boltzmann da teoria cinética, o método de Boltzmann para redes tem atualmente como principal objetivo a simulação de fluidos ao nível macroscópico. Deste modo, é imprescindível obter o comportamento macroscópico dos modelos utilizados, ou seja, queremos encontrar as equações diferenciais que regem a evolução das grandezas macroscópicas densidade, quantidade de movimento e energia interna, assim como os respectivos desvios que estas possuem em relação as equações de Navier-Stokes.

Para esta finalidade, será utilizada uma análise multiescala conhecida como análise de Chapman-Enskog (CE). Criada no início do século XX de forma independente por Sydney Chapman e David Enskog, esta análise teve inicialmente o objetivo de encontrar as equações macroscópicas a partir da equação de Boltzmann. Porém, utilizando pequenas modificações, esta análise pode também ser empregada a LBE.

Neste capítulo, uma discussão sobre este procedimento é realizada. Inicialmente, aborda-se alguns passos iniciais que são comuns a todos os modelos sobre os quais a presente análise será aplicada. Após esta discussão introdutória, serão apresentados os resultados de tal análise para as modelos discutidos no capítulo anterior, usando tanto o operador BGK quanto o TRT.

4.1 Procedimento e Definições

A análise multiescala visa compreender a influência dos fenômenos em escala mesoscópica, descritos pela LBE e pela equação de Boltzmann, na dinâmica macroscópica do fluido. Isto é realizado identificando as escalas espaciais e temporais em que cada fenômeno ocorre, o que permite separar, de acordo com a ordem de grandeza, a influência de cada processo no comportamento do fluido.

Porém, quando analisamos a LBE, é inicialmente necessário compreender como a função distribuição varia no tempo e no espaço. Para que isto seja realizado, primeiramente utilizamos a LBE na seguinte forma:

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

Através de uma expansão em série de Taylor da função $f_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta, t + \delta)$ em torno do tempo t e da posição \mathbf{x} :

$$f_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta, t + \delta) = f_i(\mathbf{x}, t) + \delta(\partial_t f_i + \xi_\alpha \partial_\alpha f_i) + \frac{\delta^2}{2}(\partial_t^2 f_i + 2\xi_\alpha \partial_t \partial_\alpha f_i + \xi_\alpha \xi_\beta \partial_\alpha \partial_\beta f_i) + \mathcal{O}(\delta^3), \quad (4.2)$$

e da Eq. (4.1), obtemos uma relação para a variação de f_i :

$$\delta(\partial_t f_i + \xi_\alpha \partial_\alpha f_i) + \frac{\delta^2}{2}(\partial_t^2 f_i + 2\xi_\alpha \partial_t \partial_\alpha f_i + \xi_\alpha \xi_\beta \partial_\alpha \partial_\beta f_i) + \mathcal{O}(\delta^3) = \delta \Omega_i, \quad (4.3)$$

onde podemos observar termos que envolvem derivadas de ordens superiores a um, o que não ocorre na equação de Boltzmann. A existência destes termos esta relacionada com o caráter discreto da equação, sendo conhecido na literatura como comportamento a curtos comprimentos de onda e a altas frequências do sistema, já que estes termos tendem a zero quando diminuimos o espaçamento da rede h e a duração do passo δ .

Dando seqüência a análise, adimensionalizamos a Eq. (4.3) associando a variação temporal de f_i no tempo com uma escala de tempo macroscópica T_c e a variação no espaço a uma escala espacial macroscópica L_c , o que permite escrever as derivadas adimensionais $\partial_\alpha^* = L_c \partial_\alpha$ e $\partial_t^* = T_c \partial_t$. Já para a velocidade molecular $\boldsymbol{\xi}$, associamos um comprimento h e um tempo δ em escala mesoscópica, o que resulta na velocidade adimensional $\mathbf{c}_i = (\delta/h)\boldsymbol{\xi}_i$. É importante notar que usando a definição de $c_{\alpha,i}$ utilizada anteriormente, encontramos a relação:

$$\frac{h}{\delta} = a \sqrt{\frac{k_B T_o}{m}} \quad (4.4)$$

Como nosso objetivo com a análise é entender o comportamento do escoamento em nível macroscópico, é útil definirmos o número de Knudsen como uma relação entre as duas escalas de comprimento:

$$\varepsilon \equiv \frac{h}{L_c} \approx \frac{\delta}{T_c}, \quad (4.5)$$

onde estamos interessados no limite onde $\varepsilon \ll 1$, ou seja, quando o comprimento macroscópico característico é algumas vezes maior que o espaçamento entre sítios adjacentes.

Usando as variáveis adimensionais descritas acima, a definição do número de Knudsen e ignorando termos da ordem de δ^3 , podemos reescrever a expansão na Eq. (4.3) na forma:

$$\varepsilon(\partial_{t^*} f_i + c_{i,\alpha} \partial_{\alpha^*} f_i) + \frac{\varepsilon^2}{2} (\partial_{t^*}^2 f_i + 2c_{i,\alpha} \partial_{t^*} \partial_{\alpha^*} f_i + c_{i,\alpha} c_{i,\beta} \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} f_i) = \Omega_i^*, \quad (4.6)$$

onde definimos a forma adimensional do operador de colisão como $\Omega_i^* \equiv \delta \Omega_i$.

Como estamos interessados em pequenos valores do número de Knudsen podemos expandir a derivada no tempo¹ e a função distribuição f_i como um série de potências de ε :

$$\partial_t = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \partial_n \approx \partial_0 + \varepsilon \partial_1, \quad (4.7)$$

$$f_i = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n f_i^{(n)} \approx f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)}. \quad (4.8)$$

onde os termos de ordem superior a dois são ignorados, pois restringiremos a análise à primeira ordem de Knudsen.

Além da expansão de f_i e da derivada temporal, que é usual na análise de CE, neste trabalho também será utilizada a expansão em Knudsen do operador de colisão:

$$\Omega_i^* = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \Omega_i^{*(n)} \approx \Omega_i^{*(0)} + \varepsilon \Omega_i^{*(1)} \quad (4.9)$$

Esta expansão adicional é utilizada com o objetivo de simplificar os cálculos posteriores para os diferentes tipos de operadores de colisão.

A partir do número de Knudsen, pode-se separar os termos que influenciam a dinâmica macroscópica em diferentes ordens de grandeza. Logo, usando na Eq. (4.6) as expansões da derivada temporal, da função distribuição e do operador colisão, obtêm-se que $\Omega_i^{(0)} = 0$ e que a primeira e segunda ordem de Knudsen seguem, respectivamente, as relações:

$$\partial_0 f_i^{(0)} + \xi_{i,\alpha} \partial_{\alpha} f_i^{(0)} = \varepsilon \Omega_i^{(1)} \quad (4.10)$$

$$\partial_1 f_i^{(0)} + \partial_0 f_i^{(1)} + \xi_{i,\alpha} \partial_{\alpha} f_i^{(1)} + \frac{\delta}{2\varepsilon} \left[\partial_0 \partial_0 f_i^{(0)} + 2\xi_{\alpha,i} \partial_{\alpha} \partial_0 f_i^{(0)} + \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i^{(0)} \right] = \varepsilon \Omega_i^{(2)} \quad (4.11)$$

¹Para que a notação não seja ambígua, faremos uso de índices em letras gregas (α e β) para as derivadas espaciais e de letras latina (n) para as ordens em Knudsen da derivada temporal.

onde as grandezas nas equações anteriores estão novamente na forma dimensional, já que o objetivo da adimensionalização é separar as diferentes ordens de Knudsen. O termo em colchetes na equação anterior pode ser reescrito usando a Eq. (4.10), o que simplifica a equação relativa aos termos de segunda ordem em Knudsen:

$$\partial_1 f_i^{(0)} + \partial_0 f_i^{(1)} + \xi_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{(1)} + \frac{\delta}{2} \left[\partial_0 \Omega_i^{(1)} + \xi_{\alpha,i} \partial_\alpha \Omega_i^{(1)} \right] = \varepsilon \Omega_i^{(2)}. \quad (4.12)$$

Um dos pontos centrais da análise de CE é assumir que a distribuição de ordem zero em Knudsen tenha a mesma forma que a distribuição de equilíbrio, ou seja,

$$f_i^{(0)} = f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}, T) \quad (4.13)$$

Utilizando esta afirmação, juntamente com as Eqs. (4.10) e (4.12), é possível encontrar equações para a evolução da massa, quantidade de movimento e energia interna. Como a análise é utilizada para vários modelos diferentes, não será utilizada, inicialmente, a forma explícita de f_i^{eq} . Primeiramente, fazem-se somente algumas hipóteses sobre o comportamento desta função, o que permitirá obter relações gerais para as equações macroscópicas, como pode ser observado a seguir.

4.1.1 Equação para Conservação da Massa

Para obter a equação macroscópica para a massa, assume-se que a distribuição de equilíbrio do modelo que iremos analisar obedeça às relações:

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} = \rho \quad (4.14)$$

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} \boldsymbol{\xi}_i = \rho \mathbf{u} \quad (4.15)$$

Como $f_i^{(0)} = f_i^{eq}$, podemos afirmar que para todo $n \geq 1$:

$$\sum_{i=0}^b f_i^{(n)} = 0, \quad (4.16)$$

$$\sum_{i=0}^b f_i^{(n)} \boldsymbol{\xi}_i = 0. \quad (4.17)$$

Para obter as equações macroscópicas mesmo em uma forma geral, é necessário fazer algumas hipóteses sobre o comportamento do operador de colisão. Para a equação da massa, realiza-se a hipótese de que a colisão conserva localmente o número de partículas, o que pode ser descrito pela relação:

$$\sum_{i=0}^b \Omega_i = 0. \quad (4.18)$$

Conseqüentemente, cada termo $\Omega_i^{(n)}$ da expansão em potência do número de Knudsen também deve conservar o número de partículas. A segunda propriedade do operador de colisão que iremos impor, é a conservação local da quantidade de movimento;

$$\sum_{i=0}^b \Omega_i \xi_i = 0, \quad (4.19)$$

o que faz com que todos os termos $\Omega_i^{(n)}$ da expansão também satisfaçam esta relação de conservação.

Utilizando as hipóteses aqui realizadas sobre $f_i^{(0)}$ e sobre o operador de colisão, somamos a Eq. (4.10) sobre todas as direções i , o que resulta em:

$$\partial_0(\rho) + \partial_\alpha(\rho u_\alpha) = 0. \quad (4.20)$$

Fazendo este mesmo processo sobre a Eq. (4.12) obtém-se:

$$\partial_1(\rho) = 0. \quad (4.21)$$

Usando estes resultados e aproximando a evolução temporal da densidade até primeira ordem de Knudsen, ou seja, $\partial_t \rho \approx \partial_0 \rho + \varepsilon \partial_1 \rho$, a equação para conservação da massa fica:

$$\partial_t(\rho) + \partial_\alpha(\rho u_\alpha) = 0. \quad (4.22)$$

Logo, se a distribuição de equilíbrio do modelo analisado obedece as hipóteses realizadas nas Eqs. (4.14) e (4.15) e o operador de colisão conserva o número de partículas e a quantidade de movimento, então a dinâmica macroscópica seguirá a equação da conservação da massa descrita pela equação anterior, a menos de termos de ordem de ε^2 .

4.1.2 Equação para Quantidade de Movimento

Além das hipóteses já realizadas para obter a Eq. (4.22), para derivar a dinâmica macroscópica da quantidade de movimento é necessário impor a seguinte suposição adicional na distribuição de equilíbrio:

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} = \rho u_\alpha u_\beta + \rho e \delta_{\alpha\beta} \quad (4.23)$$

A energia interna “ e ” foi introduzida de modo a obter uma forma mais compacta para a equação. Esta grandeza se relaciona com a temperatura seguindo a equação de estado para um gás ideal em duas dimensões:

$$e = \frac{k_B T}{m}. \quad (4.24)$$

O termo de ordem zero em Knudsen desta equação é obtido multiplicando-se a Eq. (4.10) por $\xi_{i,\beta}$ e somando-se sobre todas as direções, o que fornece:

$$\partial_0(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha(\rho e) = 0. \quad (4.25)$$

Vale notar que fazendo uma aproximação de ordem zero, $\partial_t \approx \partial_0$, resultaria em uma forma idêntica a da equação de Euler, onde a pressão é identificada como $P = \rho e$. Como nosso objetivo são as equações de Navier-Stokes, é necessário levar em conta a contribuição em primeira ordem. Esta é calculada realizando a mesma multiplicação e soma sobre a Eq. (4.12):

$$\partial_1(\rho u_\beta) + \partial_\alpha \left(\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \right) + \frac{\delta}{2} \partial_\alpha \left[\sum_{i=0}^b \xi_{\alpha i} \xi_{\beta i} \Omega_i^{(1)} \right] = 0, \quad (4.26)$$

onde definimos o tensor:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \equiv \sum_{i=0}^b f_i^{(1)} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta}. \quad (4.27)$$

Diferentemente da equação da conservação da massa, neste caso não é possível obter uma equação fechada para a quantidade de movimento, já que o tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ e a soma sobre $\Omega_i^{(1)}$ na Eq. (4.26) dependem de um maior conhecimento a cerca do modelo e do operador de colisão utilizado, sendo necessário o cálculo individual dessas grandezas para cada modelo empregado.

4.1.3 Equação da Energia

A última das equações macroscópicas que desejamos obter é aquela que descreve a evolução da energia interna ou temperatura, já que estas grandezas são diretamente proporcionais. Para que possamos derivar uma forma geral desta equação, é necessário, além das hipóteses utilizadas anteriormente, que a distribuição de equilíbrio obedeça à relação:

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} \xi_{\beta,i} \xi_{\eta,i} \xi_{\alpha,i} = \rho u_{\beta} u_{\eta} u_{\alpha} + \rho e (u_{\alpha} \delta_{\eta\beta} + u_{\beta} \delta_{\alpha\eta} + u_{\eta} \delta_{\alpha\beta}) \quad (4.28)$$

e que a colisão conserve a energia total do sítio:

$$\sum_{i=0}^b \Omega_i \xi_i^2 = 0. \quad (4.29)$$

De maneira análoga ao processo já realizado de obtenção das equações macroscópicas, para determinar uma relação para a dinâmica da energia interna multiplica-se a Eq. (4.10) por $\xi_i^2/2$ e soma-se sobre todas as direções. Isto resulta numa equação para evolução da energia total em ordem zero de Knudsen, porém como estamos interessados somente na evolução da energia interna, podemos usar a Eq. (4.25) multiplicada por u_{β} para subtrair a parte relativa à energia mecânica. Destes cálculos resulta a seguinte contribuição em ordem zero para evolução temporal da energia interna:

$$\partial_0(\rho e) + \partial_{\alpha}(\rho e u_{\alpha}) + \rho e(\partial_{\alpha} u_{\alpha}) = 0. \quad (4.30)$$

Podemos observar através desta equação que, em ordem zero de Knudsen, a variação da energia interna ocorre devido à convecção e ao trabalho da pressão. O que, é de certo modo, intuitivo já que estes processos ocorrem em uma escala de tempo menor que a difusão e a dissipação viscosa.

Para descrever o comportamento em primeira ordem de Knudsen da energia interna, fazemos a mesma soma sobre a Eq. (4.12), usando a Eq. (4.26) para remover a contribuição da energia mecânica:

$$\partial_1(\rho e) + \partial_{\alpha} q_{\alpha}^{(1)} + \Pi_{\alpha,\beta}^{(1)} \partial_{\alpha} u_{\beta} + \frac{\delta}{4} \partial_{\alpha} \left[\sum_i \xi_i^2 \xi_{i,\alpha} \Omega_i^{(1)} \right] - \frac{\delta}{2} u_{\beta} \partial_{\alpha} \left[\sum_{i=0}^b \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \Omega_i^{(1)} \right] = 0 \quad (4.31)$$

onde de modo análogo ao caso do tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$, definimos o vetor:

$$q_\alpha^{(1)} \equiv \frac{1}{2} \sum_{i=0}^b f_i^{(1)} \xi_i^2 \xi_{i,\alpha} - u_\beta \Pi_{\alpha,\beta}^{(1)}. \quad (4.32)$$

Assim como na equação da quantidade de movimento, neste caso é necessário conhecer a forma explícita da distribuição de equilíbrio e do operador de colisão para determinar a equação macroscópica para a energia até a primeira ordem em Knudsen.

4.1.4 Análise do Método Implícito

A equação geral do método implícito de Boltzmann para redes tem a forma:

$$\tilde{f}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \delta, t + \delta) - \tilde{f}(\mathbf{x}, t) = \delta \Omega_i, \quad (4.33)$$

onde $\tilde{f}_i(\mathbf{x}, t)$ se relaciona com a função distribuição discreta através de:

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\delta}{2} \Omega_i. \quad (4.34)$$

Devido a semelhança entre a Eq. (4.33) para o método implícito e a Eq. (4.1) para o método explícito, a expansão de \tilde{f}_i em série de potências do número de Knudsen resulta em:

$$\partial_0 \tilde{f}_i^{(0)} + \xi_{i,\alpha} \partial_\alpha \tilde{f}_i^{(0)} = \varepsilon \Omega_i^{(1)}, \quad (4.35)$$

$$\partial_1 \tilde{f}_i^{(0)} + \partial_0 \tilde{f}_i^{(1)} + \xi_{i,\alpha} \partial_\alpha \tilde{f}_i^{(1)} + \frac{\delta}{2} \left[\partial_0 \Omega_i^{(1)} + \xi_{\alpha,i} \partial_\alpha \Omega_i^{(1)} \right] = \varepsilon \Omega_i^{(2)}. \quad (4.36)$$

Como as grandezas macroscópicas são calculadas através de f_i , é necessário reescrever as equações anteriores em função dessa grandeza através da Eq. (4.34):

$$\partial_0 f_i^{(0)} + \xi_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{(0)} = \varepsilon \Omega_i^{(1)}, \quad (4.37)$$

$$\partial_1 f_i^{(0)} + \partial_0 f_i^{(1)} + \xi_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{(1)} = \varepsilon \Omega_i^{(2)}. \quad (4.38)$$

onde é utilizada a afirmação de que o termo em ordem zero do operador de colisão, $\Omega_i^{(0)}$, é nulo. Nota-se que para ordem zero de Knudsen, o resultado obtido é semelhante ao caso explícito encontrado na Eq. (4.10).

Utilizando as mesmas hipóteses na distribuição de equilíbrio e no operador de colisão que foram aplicadas ao método explícito, conclui-se que existem diferenças entre os métodos nas equações em primeira ordem de Knudsen para a quantidade de movimento e para a energia, pois no caso implícito estas têm a forma:

$$\partial_1(\rho u_\beta) + \partial_\alpha \left(\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \right) = 0 \quad (4.39)$$

$$\partial_1(\rho e) + \partial_\alpha q_\alpha^{(1)} + \Pi_{\alpha,\beta}^{(1)}(\partial_\alpha u_\beta) = 0 \quad (4.40)$$

Um aspecto importante destas equações, se comparadas com as Eqs. (4.26) e (4.31) do método explícito, é a ausência dos termos multiplicados por δ , o que corrobora a afirmação feita no capítulo anterior de que o método explícito tem erros da ordem δ .

4.2 Resultados da Análise Multiescala

As equações macroscópicas obtidas até aqui para quantidade de movimento e energia dependem do cálculo do tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ e do vetor $q_\alpha^{(1)}$. Estes, por sua vez, só podem ser calculados conhecendo-se a forma explícita da distribuição de equilíbrio e do operador de colisão. Deste modo, nas seções seguintes vamos explorar os modelos descritos no capítulo anterior, utilizados em conjunto com os operadores BGK e TRT.

4.2.1 Operador BGK

O operador BGK, que pode ser encontrado na Eq. (2.7), cumprirá as hipóteses de conservação local do número de partículas, de quantidade de movimento e de energia desde que as distribuições de equilíbrio utilizadas obedeçam respectivamente as Eqs. (4.14), (4.15) e (4.23). Estas equações são relações matemáticas que impõe que os momentos de f_i^{eq} até segunda ordem sejam idênticos aos da distribuição de MB. Como todos os modelos aqui estudados são de ordem superior a dois, podemos afirmar que nestes casos o operador BGK cumpre as hipóteses feitas anteriormente.

Os termos da expansão do operador em Knudsen pode ser facilmente obtido utilizando a Eq. (4.8) e resulta em:

$$\Omega_i^{(0)} = 0, \quad \Omega_i^{(n)} = -\frac{f_i^{(n)}}{\tau} \quad n \geq 1. \quad (4.41)$$

Utilizando este resultado na Eq. (4.10), obtemos uma relação para a primeira ordem de

Knudsen da função distribuição:

$$f_i^{(1)} = -\frac{\tau}{\varepsilon} \left[\partial_0 f_i^{(0)} + \xi_{\alpha,i} \partial_\alpha f_i^{(0)} \right]. \quad (4.42)$$

Desta equação é possível obter o tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ e o vetor $q_\alpha^{(1)}$, que são necessários para determinar as equações macroscópicas. É importante notar que, somando diretamente sobre a equação anterior, pode-se determinar as grandezas de interesse lidando somente com momentos da função distribuição de equilíbrio, sendo desnecessário conhecer a forma explícita de $f_i^{(1)}$.

Assumindo o uso do operador de colisão do tipo BGK na Eq. (4.26), que descreve a primeira ordem em Knudsen da quantidade de movimento do fluido, esta assume a seguinte forma:

$$\partial_1(\rho u_\beta) + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \left(\partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}\right) = 0 \quad (4.43)$$

Aplicando o mesmo procedimento à Eq. (4.31) que é relativa a energia:

$$\partial_1(\rho e) + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) \left[\partial_\alpha q_\alpha^{(1)} + (\partial_\alpha u_\beta) \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}\right] = 0 \quad (4.44)$$

É importante notar a diferença entre as Eqs. (4.39), obtidas a partir do método implícito, e as as duas equações anteriores, que resultam do uso do método explícito. Observa-se no segundo caso a presença de um erro da ordem de δ que multiplica os termos difusivos. Logo, como a Eq. (4.42) é válida para os dois casos, a diferença entre os métodos deve ficar resumida aos coeficientes de transporte.

4.2.1.1 Modelo D2V9

O primeiro modelo investigado em conjunto com o operador BGK é o modelo de segunda ordem D2V9. Como a versão atérmica deste modelo foi exaustivamente estudada, pode-se fazer uso dos resultados encontrados da literatura para comparação com as equações macroscópicas aqui obtidas no limite em que $\Theta = 0$.

Das imposições realizadas sobre a distribuição de equilíbrio, este modelo satisfaz todas as hipóteses com exceção do momento de terceira ordem na Eq. (4.28), que neste caso fornece a relação:

$$\sum_i f_i^{eq} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \xi_{i,\eta} = \rho e_0 (u_\alpha \delta_{\eta\beta} + u_\beta \delta_{\alpha\eta} + u_\eta \delta_{\alpha\beta}) \quad (4.45)$$

onde $e_0 \equiv k_B T_o / m$.

Como este momento é necessário para a obtenção da equação da energia em ordem zero, tal equação fica alterada assumindo a seguinte forma:

$$\partial_0(\rho e) + \partial_\alpha(\rho e_0 u_\alpha) - \partial_\alpha \left(\rho \frac{u^2}{2} u_\alpha \right) + \rho e_0 (\partial_\alpha u_\alpha) + \partial_\alpha(\rho e_0 \Theta u_\alpha) = 0. \quad (4.46)$$

Da equação anterior, podemos concluir que o emprego deste modelo para a determinação da dinâmica de um escoamento, resultará em uma solução incorreta para evolução da energia interna do fluido. Isto se deve a presença de termos espúrios, como $\partial_\alpha(\rho u^2 u_\alpha)/2$ e $\partial_\alpha(\rho e_0 \Theta u_\alpha)$, e também devido a existência da energia constante e_0 no lugar da energia interna local “ e ” nos termos relativos à convecção e trabalho da pressão.

Como os requisitos na distribuição de equilíbrio relacionados à derivação da equação da quantidade de movimento são satisfeitos, para finalizar a obtenção desta equação macroscópica resta o calcular o tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$. A partir da definição deste tensor na Eq. (4.27) e da fórmula para $f_i^{(1)}$ na Eq. (4.42) obtém-se:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\frac{\rho e_0 \tau}{\varepsilon} (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) - \frac{\tau}{\varepsilon} [\partial_0(\rho e_0 \Theta) - \partial_\eta(\rho u_\eta u_\alpha u_\beta) - \partial_\beta(\rho e_0 \Theta) u_\alpha - \partial_\alpha(\rho e_0 \Theta) u_\beta] \quad (4.47)$$

Utilizando este tensor juntamente com aproximação $\partial_t \approx \partial_0 + \partial_1$, obtemos então a seguinte equação para a quantidade de movimento no caso explícito:

$$\begin{aligned} & \partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha(\rho e) - \partial_\beta [\mu(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)] + \\ & - (\tau - \delta/2) \partial_\beta [\partial_0(\rho e_0 \Theta) \delta_{\alpha\beta} - \partial_\eta(\rho u_\eta u_\alpha u_\beta) + u_\alpha \partial_\beta(\rho e_0 \Theta) - u_\beta \partial_\alpha(\rho e_0 \Theta)] = 0, \end{aligned} \quad (4.48)$$

onde a viscosidade absoluta μ é dada por:

$$\mu = \rho e_0 \left(\tau - \frac{\delta}{2} \right) \quad (4.49)$$

Podemos notar que o último termo da Eq. (4.48) é na verdade um erro em relação as equações de Navier-Stokes. Outra discrepância é a ausência do termo relacionado ao

segundo coeficiente de viscosidade. Porém, como em escoamentos incompressíveis este termo é nulo, quando este modelo é utilizado para problemas que envolvem pequenas variações na densidade este erro torna-se irrelevante.

Para comparação com análises encontradas na literatura, impomos que Θ tenha valor nulo, e conseqüentemente que $e = e_0$, de modo que a Eq. (4.48) fica:

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha(\rho e_0) - \partial_\beta[\mu(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)] + \left(\tau - \frac{\delta}{2}\right) \partial_\beta \partial_\eta(\rho u_\alpha u_\beta u_\eta) = 0 \quad (4.50)$$

Este resultado concorda com o obtido por Qian e Orszag^[16], onde encontramos desvios cúbicos na velocidade macroscópica em relação as equações de Navier-Stokes. Como consequência deste desvio, a solução numérica obtida pela aplicação do modelo de segunda ordem atérmico só é consistente quando temos baixas velocidades para o escoamento, de modo que u^3 seja desprezível. Já no caso do modelo térmico os erros tornam-se desprezíveis somente quando, além das limitações já citadas, a temperatura adimensional Θ esta muito próxima de zero. Logo, como a equação da energia mesmo em ordem zero deste modelo não tem a forma esperada, a utilização do modelo térmico não traz nenhuma vantagem em relação ao caso atérmico, pois ambos estão limitados a problemas onde a temperatura não é uma grandeza de interesse.

Vale observar que, para o método implícito a viscosidade é dada por $\mu = \rho e_0 \tau$, sendo a equação macroscópica para a quantidade de movimento idêntica a Eq (4.48), com exceção da inexistência do fator $\delta/2$ que multiplica o último termo desta equação.

4.2.1.2 Modelo D2V17

O modelo que utiliza a rede D2V17, descrito no capítulo anterior, tem uma distribuição de equilíbrio cujos momentos até terceira ordem são idênticos ao da distribuição de MB. Deste modo, todas as hipóteses realizadas anteriormente sobre f_i^{eq} são satisfeitas e, para completar a descrição do comportamento macroscópico do modelo, resta calcular a forma do tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ e do vetor $q_\alpha^{(1)}$.

O cálculo do tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$, que pode ser encontrado no apêndice C, resulta em:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\frac{\rho e \tau}{\varepsilon} (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) + \frac{\rho e \tau}{\varepsilon} (\partial_\eta u_\eta) \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.51)$$

A derivação deste tensor envolve somente os momentos até terceira ordem de f_i^{eq} , independentemente de sua forma explícita. A partir desta afirmação, conclui-se que a forma de $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$

na equação anterior e, conseqüentemente, a forma resultante da equação da quantidade de movimento será comum a todos os modelos que possuírem os momentos até terceira ordem iguais à distribuição de MB. Utilizando o resultado anterior, obtém-se então a seguinte equação para a quantidade de movimento:

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha(\rho e) - \partial_\beta [\mu (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)] + \partial_\alpha [\lambda (\partial_\beta u_\beta)] = 0 \quad (4.52)$$

Para o método explícito, a viscosidade absoluta (μ) e o segundo coeficiente de viscosidade (λ) são dados por:

$$\lambda = \mu = \rho e \left(\tau - \frac{\delta}{2} \right), \quad (4.53)$$

sendo que no caso implícito inexistente o termo em ordem δ nestes coeficientes de transporte, ou seja, $\lambda = \mu = \rho e \tau$. Conclui-se então que, independente do uso do método implícito ou explícito, o modelo D2V17 descreve a evolução do campo de velocidade \mathbf{u} de acordo com as equações de Navier-Stokes, a menos de termos da ordem de ε^2 .

Para completar a descrição da dinâmica macroscópica, calcula-se então o vetor $q_\alpha^{(1)}$:

$$q_\alpha^{(1)} = -\frac{2\rho e_0 \tau (\partial_\alpha e)}{\varepsilon(\Theta + 1)} + \frac{\tau}{2\varepsilon} \left[\partial_\beta(\rho u^2 u_\alpha u_\beta) + e_0 \partial_\alpha(\rho \Theta u^2) + 6e_0 \partial_\beta(\rho \Theta u_\alpha u_\beta) + \frac{4e_0^2 \Theta^2}{e} \partial_\alpha(\rho e) \right] \quad (4.54)$$

Como este vetor está relacionado ao termo difusivo da equação da energia, espera-se que este seja proporcional ao gradiente de temperatura. Esta proporcionalidade é encontrada somente no primeiro termo da equação, o que indica que os termos restantes resultarão em erros na equação da energia. Logo, usando este resultado juntamente com aquele obtido na Eq. (4.51), podemos escrever a equação macroscópica da energia como:

$$\begin{aligned} & \partial_t(\rho e) + \partial_\alpha(\rho e u_\alpha) - \partial_\alpha[K(\partial_\alpha e)] + \\ & + \rho e(\partial_\alpha u_\alpha) - \mu [\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha] (\partial_\alpha u_\beta) + \lambda(\partial_\alpha u_\alpha)^2 + \mathcal{O}(u^4, \Theta u^2, \Theta^2 \nabla(\rho e)) = 0 \end{aligned} \quad (4.55)$$

onde a condutividade térmica (K) para o método explícito é dada por:

$$K = \frac{2\rho e_0}{(\Theta + 1)} \left(\tau - \frac{\delta}{2} \right), \quad (4.56)$$

sendo para o método implícito $K = 2\rho e_0\tau/(\Theta + 1)$.

Através da Eq. (4.55), pode observa-se que no caso onde as velocidades são baixas ($u \ll a\sqrt{e_0}$) e a variação da energia interna em torno de e_0 é pequena ($\theta \approx 0$) os desvios desta equação em relação as equações da termohidrodinâmica são desprezíveis e a solução numérica do campo de temperatura, obtida através deste modelo de terceira ordem, se aproxima do resultado esperado.

4.2.1.3 Redes D2V25

A distribuição de equilíbrio do modelo D2V25 tem, além de momentos de terceira ordem, momentos de quarta ordem do tipo $\langle \xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta \rangle$ iguais aos da distribuição de MB. Como discutido na seção anterior, a equação para a quantidade de movimento e as viscosidades μ e λ têm resultados idênticos àquele do modelo D2V17, devido a igualdade nos momentos até terceira ordem.

Para determinar a equação da energia do modelo é necessário calcular o vetor $q_\alpha^{(1)}$, o que resulta em:

$$q_\alpha^{(1)} = -\frac{2\rho e\tau}{\varepsilon}(\partial_\alpha e). \quad (4.57)$$

A derivação deste vetor é apresentada no apêndice D, onde podemos observar que a obtenção de $q_\alpha^{(1)}$ envolve somente os momentos da distribuição de equilíbrio até terceira ordem juntamente com momentos de quarta ordem do tipo $\langle \xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta \rangle$. De maneira análoga ao caso do tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ do modelo D2V17, isto nos permite concluir que o resultado na Eq. (4.57) será válido para outros modelos que tenham tais momentos idênticos aos da distribuição de MB.

Dando continuidade a análise, obtém-se então a equação para evolução da energia interna através dos vetores $q_\alpha^{(1)}$ e $\Pi_\alpha^{(1)}$ calculados:

$$\partial_t(\rho e) + \partial_\alpha(\rho e u_\alpha) - \partial_\alpha[K(\partial_\alpha e)] + \rho e(\partial_\alpha u_\alpha) - \mu[\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha]\partial_\alpha u_\beta + \lambda(\partial_\alpha u_\alpha)^2 = 0 \quad (4.58)$$

Esta equação é válida tanto para o caso explícito quanto para o caso implícito, sendo que a diferença entre os métodos reside nos valores dos coeficientes de transporte. Para o método explícito a condutividade térmica segue a relação:

$$K = 2\rho e \left(\tau - \frac{\delta}{2} \right) \quad (4.59)$$

sendo que para o método implícito esta grandeza fica $K = 2\rho e\tau$.

Conclui-se então que, até primeira ordem em Knudsen, o modelo D2V25 tem todas as equações macroscópicas de interesse idênticas as equações de Navier-Stokes. Também podemos notar, como já era esperado da utilização de um operador BGK, que número de Prandtl é constante tendo valor um. Nesta análise não fizemos distinção entre os modelos D2V25(W1) e D2V25(W6), porque do ponto de vista das equações macroscópicas isto não é necessário, já que os momentos requeridos nos cálculos tem formas idênticas para ambos os modelos.

4.2.1.4 Rede D2V37

Utilizando a argumentação de que o cálculo das grandezas $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ e $q_{\alpha}^{(1)}$ envolvem somente os momentos até quarta ordem e não a forma explícita da distribuição de equilíbrio, podemos afirmar que as equações macroscópicas e os coeficientes de transporte para este modelo são idênticos aqueles obtidos para o modelo D2V25.

Conseqüentemente, modelos de ordens ainda maiores, obtidos através do método das abscissas prescritas, terão comportamento macroscópico semelhante quando utilizados com o operador BGK. Isto nos permite concluir que não há vantagem, pelo menos do ponto de vista da física macroscópica descrita pelo modelo, no desenvolvimento de modelos de ordem superior a quatro para uso com o operador BGK.

4.2.2 Operador TRT

O operador de dois tempos de relaxação, encontrado na Eq. (2.14), é empregado com o objetivo de permitir um controle independente da condutividade térmica e da viscosidade. Assim, devido a limitação dos modelos de ordem inferior de obter uma descrição correta para a equação de energia mesmo com o operador BGK, este operador é analisado somente em conjunto com os modelos D2V25 e D2V37.

Para a averiguar a conversão do número de partículas pela colisão, somamos este operador sobre todas as direções, conforme descrito na Eq. (4.18):

$$\sum_{i=0}^b \Omega_i = -\frac{\tau_{\alpha\beta}}{\rho e^2 \tau_2} \sum_{i=0}^b f_i^{eq} (\xi_{i,\alpha} - u_{\alpha})(\xi_{i,\beta} - u_{\beta}) = -\frac{\tau_{\alpha\beta}}{\rho e^2 \tau_2} \rho e \delta_{\alpha\beta} = -\frac{\tau_{\alpha\alpha}}{e \tau_2} = 0 \quad (4.60)$$

Na equação anterior usamos que o tensor tensão viscosa $\tau_{\alpha\beta}$ tem traço nulo, o que é uma conseqüência da conservação da energia. A demonstração da conservação local da quanti-

dade de movimento e da energia, seguem de modo análogo, onde é necessário utilizar que os momentos $\langle \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\eta \rangle$ e $\langle \xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta \rangle$ são idênticos aos obtidos através da função distribuição de MB, o que é verdade para o caso dos modelos D2V25 e D2V37.

Substituindo neste operador a expansão da função distribuição f_i em número de Knudsen obtemos que $\Omega_i^{(0)} = 0$ e que para $n \geq 1$:

$$\Omega_i^{(n)} = -\frac{f_i^{(n)}}{\tau_1} - \frac{f_i^{eq} \Pi_{\alpha\beta}^{(n)}(\xi_{i,\alpha} - u_\alpha)(\xi_{i,\beta} - u_\beta)}{\rho e^2 \tau_2} \quad (4.61)$$

Utilizando a relação obtida para $\Omega_i^{(1)}$ na Eq. (4.10), a seguinte relação para a distribuição em primeira ordem de Knudsen é obtida:

$$f_i^{(1)} = -\frac{\tau_1}{\varepsilon} \left[\partial_0 f_i^{(0)} + \xi_\alpha \partial_\alpha f_i^{(0)} \right] - \frac{\tau_1 \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} f_i^{eq}(\xi_\alpha - u_\alpha)(\xi_\beta - u_\beta)}{\rho e^2 \tau_2} \quad (4.62)$$

Satisfeitas as regras de conservação local para o operador de colisão, podemos utilizar a forma encontrada para $\Omega_i^{(1)}$ nas relações do método explícito para quantidade de movimento, Eq. (4.26), e energia, Eq. (4.31):

$$\partial_1(\rho u_\alpha) + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau_1}\right) \partial_\alpha \left(\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}\right) - \frac{\delta}{2} \partial_\beta \left[\frac{\Pi_{\nu\eta}^{(1)}}{\rho e^2 \tau_2} \sum_{i=0}^b f_i^{eq}(\xi_\nu - u_\nu)(\xi_\eta - u_\eta) \xi_\alpha \xi_\beta \right] = 0, \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned} \partial_1(\rho e) + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau_1}\right) \left(\partial_\alpha q_\alpha^{(1)} + \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \partial_\alpha u_\beta \right) - \frac{\delta}{4} \partial_\alpha \left[\frac{\Pi_{\nu\eta}^{(1)}}{\rho e^2 \tau_2} \sum_{i=0}^b f_i^{eq}(\xi_\nu - u_\nu)(\xi_\eta - u_\eta) \xi^2 \xi_\alpha \right] + \\ + u_\beta \frac{\delta}{2} \partial_\alpha \left[\frac{\Pi_{\nu\eta}^{(1)}}{\rho e^2 \tau_2} \sum_{i=0}^b f_i^{eq}(\xi_\nu - u_\nu)(\xi_\eta - u_\eta) \xi_\alpha \xi_\beta \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.64)$$

Logo, para o método explícito, além da determinação de $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ e $q_\alpha^{(1)}$ é necessário calcular os momentos de f_i^{eq} presentes nas equações anteriores, de modo a se obter o comportamento macroscópico dessas grandezas. Como as relações macroscópicas para o método implícito independem de $\Omega_i^{(1)}$, só é preciso o cálculo de $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ e $q_\alpha^{(1)}$ para determinar a forma final dessas equações.

4.2.2.1 Modelos D2V25

Como é possível notar através da Eq. (4.63), o cálculo da equação da quantidade de movimento requer momentos de quarta ordem da distribuição de equilíbrio do tipo $\langle \xi_\nu \xi_\eta \xi_\alpha \xi_\beta \rangle$. Para a rede D2V25, estes momentos em geral não são idênticos aos da distribuição de MB, sendo necessário calculá-los explicitamente utilizando a Eq (3.42):

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq}(\xi_{i,\nu} - u_\nu)(\xi_{i,\eta} - u_\eta) \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} = \rho e u_\alpha u_\beta \delta_{\nu\eta} + \rho e^2 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\nu\eta} + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\eta} + \delta_{\alpha\eta} \delta_{\nu\beta}) + \mathcal{O}(u^4) \quad (4.65)$$

Substituindo este resultado na Eq. (4.63) obtemos a seguinte forma para a contribuição em primeira ordem para a evolução da quantidade de movimento:

$$\partial_1(\rho u_\alpha) + \left[1 - \frac{\delta(2\tau_1 + \tau_2)}{2\tau_1\tau_2} \right] \partial_\alpha \left(\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \right) = 0, \quad (4.66)$$

onde foram omitidos erros do tipo $u^4 \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$, pois como esperamos que $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \sim \partial_\alpha u_\beta$, este erro fica da ordem de $\partial_\alpha u_\beta u^4$, o que é pequeno nos limites usais do LBM, podendo ser desprezado. O cálculo do tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ é realizado através da Eq. (4.62):

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\frac{\rho e}{\varepsilon} \left(\frac{\tau_1 \tau_2}{2\tau_1 + \tau_2} \right) (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) + \frac{\rho e}{\varepsilon} \left(\frac{\tau_1 \tau_2}{2\tau_1 + \tau_2} \right) (\partial_\eta u_\eta) \delta_{\alpha\beta} \quad (4.67)$$

onde novamente desprezamos termos da ordem de $u^4 \partial_\alpha u_\beta$. Utilizando este tensor obtemos, a menos dos erros desprezados, uma equação para a quantidade de movimento semelhante ao caso BGK, encontrada na Eq. (4.52). Os coeficientes de transporte para esta equação macroscópica dependem de ambos tempos de relaxação, assumindo a seguinte forma para o método explícito:

$$\lambda = \mu = \rho e \left(\frac{\tau_1 \tau_2}{2\tau_1 + \tau_2} - \frac{\delta}{2} \right) \quad (4.68)$$

e $\lambda = \mu = \rho e(\tau_1 \tau_2)/(2\tau_1 + \tau_2)$ para o implícito. Assim, quando $u \ll h/\delta$, os erros mencionados são realmente desprezíveis, o que torna factível o uso do modelo D2V25 com o operador TRT para determinação do campo de velocidades.

De forma análoga, a equação para evolução da energia interna requer, além daqueles obtidos na Eq. (4.65), momentos de quinta ordem de f_i^{eq} , que devem ser calculados explicitamente:

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} \xi_i^2 \xi_\alpha (\xi_{i,\nu} - u_\nu) (\xi_{i,\eta} - u_\eta) = 2\rho e^2 (u_\alpha \delta_{\eta\beta} + u_\beta \delta_{\eta\alpha}) + (6\rho e^2 u_\eta + \rho e u^2 u_\eta) \delta_{\alpha\beta} + \mathcal{O}(u^5, u^3 \Theta, \Theta^2 u), \quad (4.69)$$

Com estas relações é possível simplificar a Eq. (4.64) se desprezarmos erros da ordem de $u^4 \partial_\alpha u_\beta$, $u^3 \Theta \partial_\alpha u_\beta$ e $\Theta^2 u \partial_\alpha u_\beta$:

$$\partial_1(\rho e) + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau_1}\right) (\partial_\alpha q_\alpha^{(1)}) + \left[1 - \frac{\delta(2\tau_1 + \tau_2)}{\tau_1 \tau_2}\right] \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}(\partial_\alpha u_\beta) = 0 \quad (4.70)$$

A última grandeza que resta ser calcula é o vetor $q_\alpha^{(1)}$ que, desprezando os termos mencionados no parágrafo anterior, resulta em:

$$q_\alpha^{(1)} = -2\rho e \tau_1 (\partial_\alpha e). \quad (4.71)$$

Assim, a energia interna obedece uma dinâmica macroscópica idêntica aquela descrita na Eq. (4.58), desde que este modelo seja utilizado nos limites $u \ll h/\delta$ e $\Theta \approx 0$ para que os erros encontrados sejam realmente negligenciáveis. Ao contrário da viscosidade, a condutividade térmica só depende do primeiro tempo de relaxação, sendo:

$$K = 2\rho e \left(\tau_1 - \frac{\delta}{2}\right). \quad (4.72)$$

para o método explícito e $K = 2\rho e \tau_1$ para o método implícito.

4.2.2.2 Modelo D2V37

As equações macroscópicas e os coeficientes de transporte do modelo D2V37 com operador de dois tempos de relaxação são praticamente idênticos aos obtidos para o modelo D2V25. A única diferença entre os dois casos é que no modelo D2V37, não há termos de u^4 no cálculo do momento de quarta ordem na Eq. (4.65) e, conseqüentemente, não haverá erros da ordem $u^4 \partial_\alpha u_\beta$ na equação para a quantidade de movimento. Já os erros provenientes do momento de quinta ordem são idênticos ao modelo D2V25, logo, na equação da energia resultante do uso deste modelo há erros da ordem $u^5 \partial_\alpha u_\beta$, $u^3 \Theta \partial_\alpha u_\beta$ e $u \Theta^2 \partial_\alpha u_\beta$.

5 *Análise de Estabilidade*

Os primeiros métodos de Boltzmann para redes^[7] utilizavam operadores de colisão que correspondiam a médias sobre as colisões dos modelos de gás em rede. Assim como no LGA, um teorema H podia ser obtido para esses métodos, confirmando assim a convergência do sistema para o equilíbrio e garantindo a estabilidade numérica incondicional do método.

O custo computacional do uso de tais operadores motivou propostas que visavam simplificar o operador de colisão utilizado, o que resultou em operadores como o BGK^[9] e o operador a múltiplos tempos de relaxação (MRT)^[4]. Porém, em troca dessa maior eficiência computacional, perde-se a garantia de estabilidade fornecida pelo teorema H. Logo, é necessário analisar como estes modelos se comportam em relação a estabilidade numérica, para que se possa avaliar a viabilidade do uso destes modelos.

Com este objetivo, neste capítulo é realizada uma análise da estabilidade linear dos modelos obtidos a partir do método da quadratura com abscissas prescritas. Inicialmente, é apresentada uma breve discussão do embasamento teórico da análise de estabilidade linear empregada, assim como da metodologia e das simplificações utilizadas. Para concluir este estudo, comparações são realizadas entre a estabilidade dos diferentes modelos utilizando o operador BGK.

5.1 Aspectos teóricos

Primeiramente, para uma abordagem mais simples, utilize-se a LBE com variáveis adimensionais:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i[f]; \quad (5.1)$$

O operador de colisão $\Omega_i[f]$ pode ser interpretado como sendo uma função de b variáveis, onde b é o número de velocidade discretas da rede que estamos querendo analisar, ou seja, $\Omega_i[f] \equiv \Omega_i(f_0, f_1, \dots, f_{b-1})$. É importante notar que, em geral, esta função Ω_i é não

linear, como é o caso do operador BGK. Uma das dificuldades de avaliar a estabilidade do LBM, se encontra no fato de que os métodos para análise não-linear são extremamente restritos^[20]. Em virtude disto, é necessário linearizar a Eq. (5.1) para então aplicar a análise de estabilidade linear de von Neumann^[21].

A questão a ser respondida pela análise é se um sistema, que se encontrava inicialmente em equilíbrio, é perturbado, este retorna ao estado inicial ou diverge indefinidamente. Portanto, ao linearizarmos o operador de colisão, o fazemos em torno de uma distribuição de equilíbrio geral $\bar{f}_i = f_i^{eq}(\bar{\rho}, \bar{\mathbf{u}}^*, \bar{e}^*)$, onde $\bar{\rho}$, $\bar{\mathbf{u}}^*$ e \bar{e} são as grandezas que caracterizam o estado macroscópico do sistema no qual a estabilidade se quer determinar. Denotando as flutuações locais em torno desta distribuição como,

$$\delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \bar{f}_i, \quad (5.2)$$

a expansão em série Taylor do operador em torno de $\bar{f} = (\bar{f}_0, \bar{f}_1, \dots, \bar{f}_{b-1})$ fica:

$$\Omega_i[f] = \Omega_i \Big|_{\bar{f}} + \sum_j \frac{\partial \Omega_i}{\partial f_j} \Big|_{\bar{f}} \delta f_j + \mathcal{O}(\delta f^2). \quad (5.3)$$

Como \bar{f} é um estado de equilíbrio, considera-se que $\Omega_i[\bar{f}] = 0$. Desprezando termos quadráticos na expressão anterior, a seguinte forma linearizada para a Eq. (5.1) é obtida:

$$\delta f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - \delta f_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^b \frac{\partial \Omega_i}{\partial f_j} \Big|_{\bar{f}} \delta f_j(\mathbf{x}, t). \quad (5.4)$$

A partir da definição da matriz:

$$G_{ij} = \delta_{ij} + \frac{\partial \Omega_i}{\partial f_j} \Big|_{\bar{f}}, \quad (5.5)$$

a Eq. (5.4) pode ser reescrita como uma operação matricial:

$$\delta f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_{j=0}^b G_{ij} \delta f_j(\mathbf{x}, t) \quad (5.6)$$

Assim, quando a matriz G_{ij} é aplicada sobre a flutuação local $\delta f_j(\mathbf{x}, t)$ realizamos a evolução temporal dessa grandeza. Porém, enquanto o vetor $\delta f_j(\mathbf{x}, t)$ representa a flutuação para as direções de um mesmo sítio, $\delta f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1)$ representa flutuações em diferentes sítios, o que representa um problema pois não podemos aplicar a matriz G_{ij} mais de uma vez no vetor $\delta f_j(\mathbf{x}, t)$ de modo a obter o valor de δf_i nos tempos $t + 2$, $t + 3$,

etc. Para contornar esta dificuldade realizamos uma transformada de Fourier discreta na forma:

$$\delta f_i(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{r}} \delta f_i(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (5.7)$$

Aplicando então esta transformada sobre a Eq. (5.6) obtém-se uma equação para a evolução da flutuação de um vetor de onda \mathbf{k} :

$$\delta f_i(\mathbf{k}, t+1) = \sum_{j=0}^b e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}_j} G_{ij} \delta f_j(\mathbf{k}, t) \equiv \sum_{j=0}^b L_{ij} \delta f_j(\mathbf{k}, t) \quad (5.8)$$

A relação anterior fornece a forma desejada, pois é possível obter o estado do sistema em um determinado tempo t , descrito pela função $\delta f_i(\mathbf{k}, t)$, aplicando t vezes a matriz L_{ij} na condição inicial $\delta f_i(\mathbf{k}, 0)$. É importante notar que as componentes desta matriz são determinadas pela forma do operador de colisão, pelo vetor de onda \mathbf{k} e pelo conjunto de grandezas macroscópicas $\bar{\rho}$, $\bar{\mathbf{u}}^*$ e \bar{e}^* .

Para entender como a matriz L_{ij} pode fornecer informações sobre a estabilidade, fixe-se um número de onda \mathbf{k} . Sendo $|z_n\rangle$ os autovetores da matriz $\hat{\mathbf{L}}$, a componente de onda \mathbf{k} da condição inicial pode ser reescrita como uma combinação desses vetores, ou seja,

$$|\delta f(\mathbf{k}, 0)\rangle = \sum_1^b a_n |z_n\rangle \quad (5.9)$$

Se z_n é o autovalor associado com o autovetor $|z_n\rangle$, então quando a matriz $\hat{\mathbf{L}}$ é aplicada t vezes sobre o vetor $|\delta f(\mathbf{k}, 0)\rangle$ obtém-se:

$$|\delta f(\mathbf{k}, t)\rangle = \underbrace{\hat{\mathbf{L}} \dots \hat{\mathbf{L}}}_t |\delta f(\mathbf{k}, 0)\rangle = \sum_{n=1}^b a_n (z_n)^t |z_n\rangle \quad (5.10)$$

Pode-se observar a partir da Eq. (5.10), que os autovalores z_n da matriz L_{ij} determinam se as flutuações $\delta f_i(\mathbf{k}, 0)$ serão amortecidas ou divergirão a medida que o sistema evolui, ou seja, no limite $t \rightarrow \infty$. Como z_n é, em geral, um número complexo, o critério comumente utilizado para determinar a estabilidade do sistema é $|z_n| \leq 1$.

Vale ressaltar que a análise de estabilidade linear não garante por si só a convergência do LBM. Esta análise se limita ao caso onde as flutuações em torno de uma distribuição de equilíbrio são pequenas o suficiente para que termos quadráticos não influenciem de modo significativo na evolução da função distribuição. Apesar desta limitação, a análise

de estabilidade linear aqui descrita fornece indicações importantes sobre a viabilidade dos modelos.

5.2 Metodologia

Para que um método numérico possa ser aplicado a problemas reais, é necessário que este seja estável sobre um intervalo considerável das variáveis do sistema que este método tenta descrever. No caso do método de rede de Boltzmann para escoamentos isotérmicos, espera-se, por exemplo, que este suporte altos valores da velocidade local do fluido. Já no caso de escoamentos onde a temperatura é uma das variáveis de interesse, é importante que o método seja estável tanto para valores altos quanto para valores baixos da temperatura.

Portanto, é importante ter um conhecimento preliminar sobre os limites de estabilidade da velocidade, no caso de modelos atérmicos e da temperatura, no caso de modelos térmicos, e a dependência desses limites com os coeficientes de transporte.

Para que se possa encontrar, por exemplo, o limite de estabilidade da velocidade é preciso varrer a variável \mathbf{u} , verificando se para todos os valores de \mathbf{k} os autovalores da matriz:

$$L_{ij} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}_i} \left[\delta_{ij} + \frac{\partial \Omega_i}{\partial f_j} \Big|_{\bar{f}} \right], \quad (5.11)$$

são menores ou iguais a um, até encontrarmos a menor velocidade em que tal critério não é satisfeito.

Em virtude da complexidade em obter, através do uso de ferramentas analíticas, a forma diagonalizada de L_{ij} , opta-se pela utilização de métodos numéricos para realizar esta tarefa. Quando este problema é tratado de forma numérica, algumas dificuldades têm de ser contornadas. Através da Eq. (5.11), pode-se observar que em geral a matriz L_{ij} é complexa e não hermitiana, o que impossibilita o uso de alguns pacotes numéricos amplamente utilizados, como o “*Numerical Recipes*” e o “*Gnu Scientific Library*”, para a diagonalização dessa matriz, sendo necessário o uso do pacote de rotinas para álgebra linear LAPACK++ (*Linear Algebra Package for C++*).

Como numericamente é impossível cobrir todos os valores do vetor \mathbf{k} , ficamos limitados a verificar a estabilidade para um conjunto finito e enumerável de valores deste vetor. Em contrapartida, para que os resultados obtidos se aproximem daqueles que resultariam de uma solução analítica, é preciso examinar a estabilidade para o maior número possível de

valores de \mathbf{k} . Como para cada valor de \mathbf{k} é necessário recalcular e diagonalizar a matriz L_{ij} , examinar a estabilidade para muitos valores de \mathbf{k} torna a análise computacionalmente inviável.

De maneira a contornar esta dificuldade, primeiramente é analisada a dependência do maior autovalor da matriz L_{ij} com a orientação do vetor número de onda. Na Fig. (8) observa-se a dependência do maior autovalor com a orientação do vetor \mathbf{u} , numa rede D2Q9 com operador BGK de segunda ordem. Cada curva é calculada com uma orientação diferente do vetor número de onda, onde observa-se que, para cada caso, o maior autovalor atinge uma máximo quando \mathbf{u} e \mathbf{k} estão paralelos. Resultados semelhantes também foram encontrados para o modelo D2V17. A partir desta investigação, restringe-se a análise ao caso onde estes dois vetores são paralelos, diminuindo assim o número de cálculos necessários para a determinação da região de estabilidade.

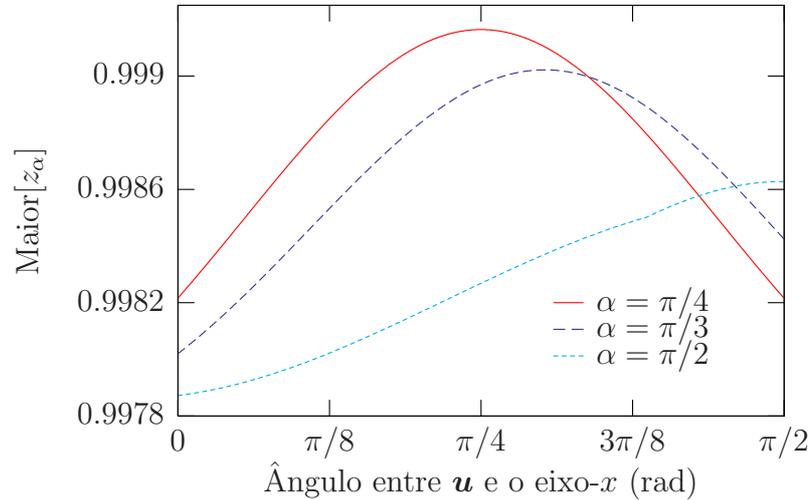


Figura 8: Dependência do maior autovalor com a orientação da velocidade onde α é o ângulo que o vetor \mathbf{k} faz com o eixo x .

Vale ressaltar que trabalhos anteriores de análise de estabilidade aplicada ao LBM [21, 22], também utilizam esta suposição. Em particular, o trabalho pioneiro nesta área de Sterling e Chen^[21], além de utilizar \mathbf{u} e \mathbf{k} como paralelos ainda impõe que \mathbf{u} seja paralelo ao eixo x . Porém, esta suposição afeta de modo relevante os limites de estabilidade obtidos. Tal resultado pode ser constatado através da Fig. (9), onde o limite de estabilidade para o modelo atérmico D2Q9 é obtido para três orientações distintas de \mathbf{u} , onde θ é o ângulo que este vetor faz com o eixo x . Pode-se concluir que o caso onde \mathbf{u} é paralelo ao eixo x , ou seja, $\theta = 0$, não é o mais instável. Portanto, a suposição realizada por estes autores leva a um valor superestimado da velocidade limite em relação ao que seria encontrado variando-se o ângulo θ , o que demonstra a importância da consideração de diversos valores desse ângulo na análise.

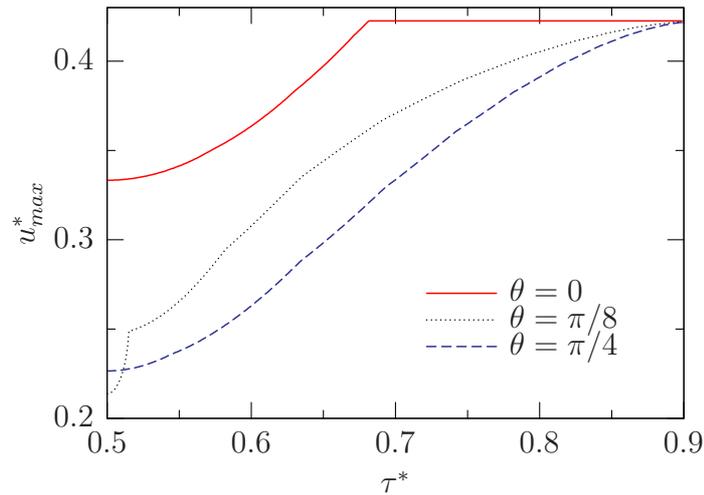


Figura 9: Curva da velocidade máxima estável no modelo D2Q9 para diferentes valores do ângulo entre \mathbf{u} e o eixo x .

Pelos motivos citados acima, neste trabalho, ao investigar a estabilidade de um estado macroscópico vários valores do módulo de \mathbf{k} e do ângulo θ são empregados. Os valores utilizados para o módulo de \mathbf{k} estão contidos na região de 0 a 3.1, em virtude da periodicidade da matriz L_{ij} em intervalos de π , e distanciados de intervalos de Δk . Como a matriz L_{ij} é periódica na variável θ com período de $\pi/4$, escolhe-se valores deste ângulo entre 0 e $\pi/4$ em intervalos de $\Delta\theta$. Os valores de Δk e $\Delta\theta$ diferem de acordo com o problema estudado.

5.3 Resultados

Neste trabalho, o objetivo da análise de estabilidade é, primeiramente, investigar se o aumento na ordem dos modelos, ou seja incorporando mais momentos iguais aos da distribuição de MB de acordo com o método das quadraturas com abscissas prescritas, acarreta uma melhora significativa na estabilidade. Isto será investigado utilizando primeiramente, modificações do modelo D2V9 e usando a versão atérmica dos modelos de mais alta ordem. Posteriormente, é realizada uma comparação da estabilidade entre os diferentes modelos térmicos.

5.3.1 Modelos Atérmicos

O estudo da estabilidade de modelos atérmicos foca-se primeiramente em uma comparação de vários modelos que utilizam a rede D2Q9. Como abordado no capítulo 3, o modelo D2V9 caracteriza-se por ter os mesmos momentos que a distribuição de MB até

segunda ordem. Entretanto, através do método de quadratura com abscissas prescritas conclui-se que também é possível a incorporação de alguns polinômios de Hermite de terceira ordem nessa distribuição, mantendo ainda todos os momentos de ordens menores. Isto é possível pois utilizando os pesos w_i e o fator de escala obtidos para o modelo D2V9, nota-se que as seguintes relações são satisfeitas:

$$\sum_{i=0}^b w_i [\mathcal{H}_{xy}^{(3)}(a\mathbf{c}_i)]^2 = \frac{1}{2\pi} \int e^{-\xi_o^2/2} [\mathcal{H}_{xy}^{(3)}(\xi_o)]^2 d\xi_o, \quad (5.12)$$

$$\sum_{i=0}^b w_i [\mathcal{H}_{yyx}^{(3)}(a\mathbf{c}_i)]^2 = \frac{1}{2\pi} \int e^{-\xi_o^2/2} [\mathcal{H}_{yyx}^{(3)}(\xi_o)]^2 d\xi_o, \quad (5.13)$$

o que garante que os termos relativos a estes polinômios podem ser adicionados na distribuição de equilíbrio sem afetar os momentos de segunda ordem. Considerando estes termos e impondo que $\Theta = 0$, a distribuição de equilíbrio resultante fica:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + a^2 c_{i,\alpha} u_\alpha^* + \frac{a^4}{2} (c_{i,\alpha} u_\alpha^*)^2 - \frac{a^2}{2} (u_\alpha^* u_\alpha^*) + \frac{1}{2} a_{xy}^{(3)} \mathcal{H}_{xy}^{(3)}(a\mathbf{c}_i) + \frac{1}{2} a_{yyx}^{(3)} \mathcal{H}_{yyx}^{(3)}(a\mathbf{c}_i) \right] \quad (5.14)$$

Conseqüentemente, esta distribuição tem alguns momentos de terceira ordem iguais a função distribuição de MB. Do ponto de vista da física macroscópica do fluido, esta modificação não traz vantagens significativas, já que erros da ordem de u^3 permanecerão na equação da conservação da quantidade de movimento. Por outro lado, esta distribuição com elementos de terceira ordem fornece um meio particularmente interessante de avaliar a influência de termos de ordem superior na estabilidade.

Outro modelo importante que usa a rede D2Q9 é o operador a múltiplos tempos de relaxação (MRT). Desenvolvido por Lallemand e Luo^[22] com o objetivo de aumentar a estabilidade em relação ao operador BGK, principalmente a baixos valores do tempo de relaxação, este modelo é amplamente utilizado na área e fornece uma boa referência para a questão da estabilidade.

Na Fig. (10) encontram-se as velocidades máximas que exibem comportamento estável para os três modelos. Os resultados para o operador BGK, com distribuição de segunda ordem, e para o MRT concordam com os encontrados na Ref. [22]. Através deste gráfico é possível notar que, conforme esperado, o operador MRT possui limites de estabilidade superiores ao do BGK com distribuição até segunda ordem, sendo que o limite do primeiro caso decai de forma lenta quando τ se aproxima do valor 1/2. Nota-se também que o operador BGK com distribuição de terceira ordem tem velocidades máximas superiores

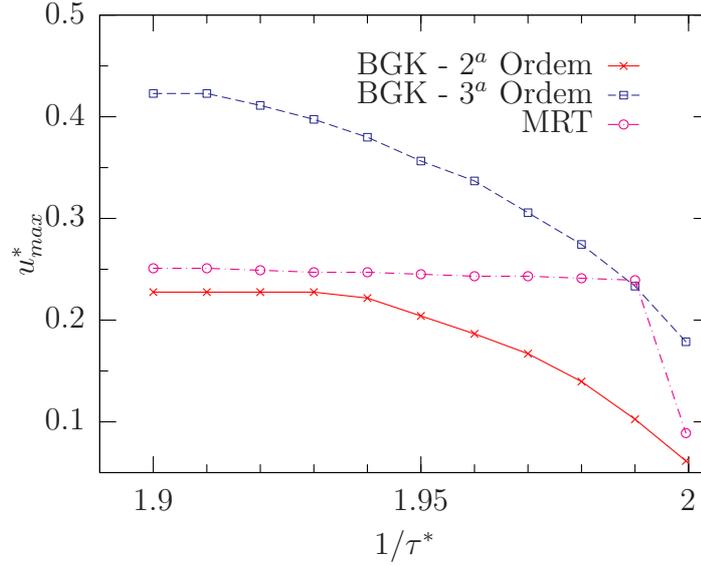


Figura 10: Limites de estabilidade na velocidade macroscópica para diferentes modelos atérmicos que utilizam a rede D2Q9.

em relação aos dos dois outros modelos para grande parte do intervalo de $1/\tau$ contido no gráfico. Conclui-se então que no limite de baixos valores do tempo de relaxação, o modelo com alguns momentos de terceira ordem tem uma estabilidade maior que o modelo D2Q9 padrão e até mesmo maior que o MRT, o que fornece um indício de que uma melhor representação da distribuição de equilíbrio afeta positivamente a estabilidade do modelo.

Para a obter mais indícios sobre a relação entre estabilidade e a ordem de descrição da distribuição de equilíbrio do modelo, realiza-se uma comparação entre os modelos D2V9, D2V17 e D2V37 atérmicos. Estes modelos foram escolhidos pois suas distribuições de equilíbrio possuem, respectivamente, momentos até segunda, terceira e quarta ordens idênticos aos da distribuição de MB.

Observando que a viscosidade absoluta adimensional tem a seguinte forma,

$$\mu^* = \frac{\delta}{h^2} \mu = \frac{\rho(\Theta + 1)}{a^2} \left(\tau^* - \frac{1}{2} \right) \quad (5.15)$$

notamos que, em virtude da presença do fator de escala a , para um mesmo valor de τ^* temos viscosidades diferentes em cada modelo. Como o objetivo final é a simulação da dinâmica macroscópica, utiliza-se μ^* e não o tempo de relaxação adimensional para comparar estes modelos.

Através do gráfico na Fig. (11), observa-se que os modelos com ordens maiores na distribuição de equilíbrio apresentam realmente uma estabilidade maior para um dado

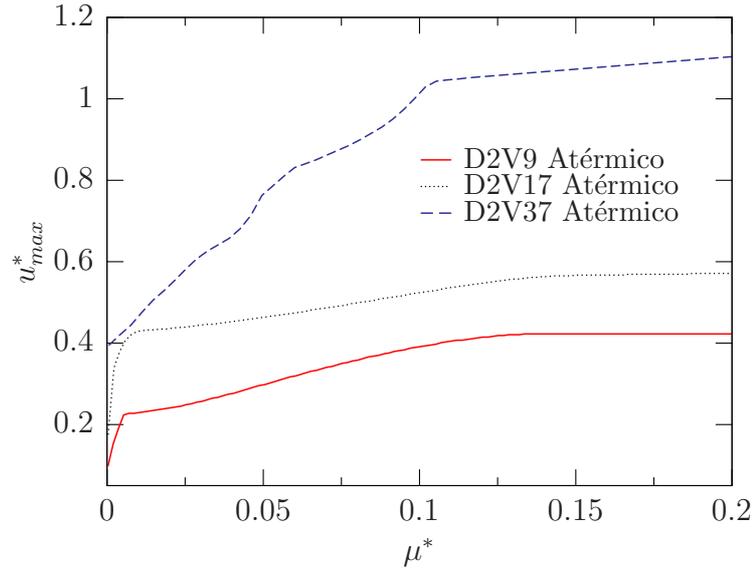


Figura 11: Comparação do limite de estabilidade na velocidade para diferentes valores da viscosidade absoluta.

valor da viscosidade, o que reforça a afirmação feita anteriormente. Particularmente, o modelo D2V37 mostrou ter limites muito superiores aos outros dois modelos, principalmente quando $\mu^* > 0.1$, sendo que mesmo para valores da viscosidade muito próximos de zero este modelo apresenta valores da velocidade máxima próximos a 0.4. Porém, o custo computacional resultante da utilização de uma rede de trinta e sete velocidades não compensa o ganho na estabilidade.

5.3.2 Modelos térmicos

Como discutido anteriormente, uma das grandes dificuldades encontradas pelos primeiros modelos térmicos para LBM^[13-15] foi a presença de instabilidades, que tornaram estes modelos praticamente inviáveis. Portanto, a análise de estabilidade dos modelos propostos por Philippi et al.^[5] se torna um ponto crucial, para que se possa demonstrar que tal dificuldade é superada por esses modelos.

Através da análise de CE, foi possível mostrar que a equação de balanço da energia interna não é corretamente descrita no modelo D2Q9. Também foi possível obter que o modelo D2V17, apesar de conter uma dinâmica para a temperatura que se aproxima daquela descrita pelas equações da termohidrodinâmica, contém erros da ordem $\Theta^2 \partial_\alpha(\rho e)$. Conseqüentemente, a física macroscópica descrita pelo modelo limita o método a permanecer na região $\Theta \approx 0$.

Por estes motivos, a análise de estabilidade só é realizada para os modelos D2V25

e D2V37, pois estes modelos descrevem a evolução do campo de temperatura corretamente. Na Fig. (12) é possível visualizar o resultado desta análise. Como é esperado, há um decréscimo tanto da temperatura máxima quanto da temperatura mínima quando aumenta-se a velocidade macroscópica.

Podemos constatar que todos os modelos apresentam um comportamento estável mesmo para valores baixos da viscosidade, sendo que o modelo D2V37 se demonstrou mais estável na maioria dos casos. O modelo D2V25(W6) mostrou um comportamento melhor que o modelo D2V25(W1), e bastante semelhante ao D2V37 à valores da viscosidade. Do ponto de vista prático isto é interessante, já que um menor número de velocidades resulta em um menor custo computacional.

Apesar de não constar na Fig. (12), um estudo da estabilidade do modelo de Chen, Ohashi e Akiyama^[15] também foi realizado, onde só foram encontrados valores para Θ_{max} e Θ_{min} diferentes de zero quando $\nu^*/(\Theta + 1) \approx 0.2$, mesmo no caso de velocidade macroscópica nula. Se comparados com este resultado, os modelos D2V25 e D2V37 conseguem ótimos limites de estabilidade na temperatura, tanto com velocidade nula quanto com velocidades relativamente altas, ou seja, $u \approx 0.4$.

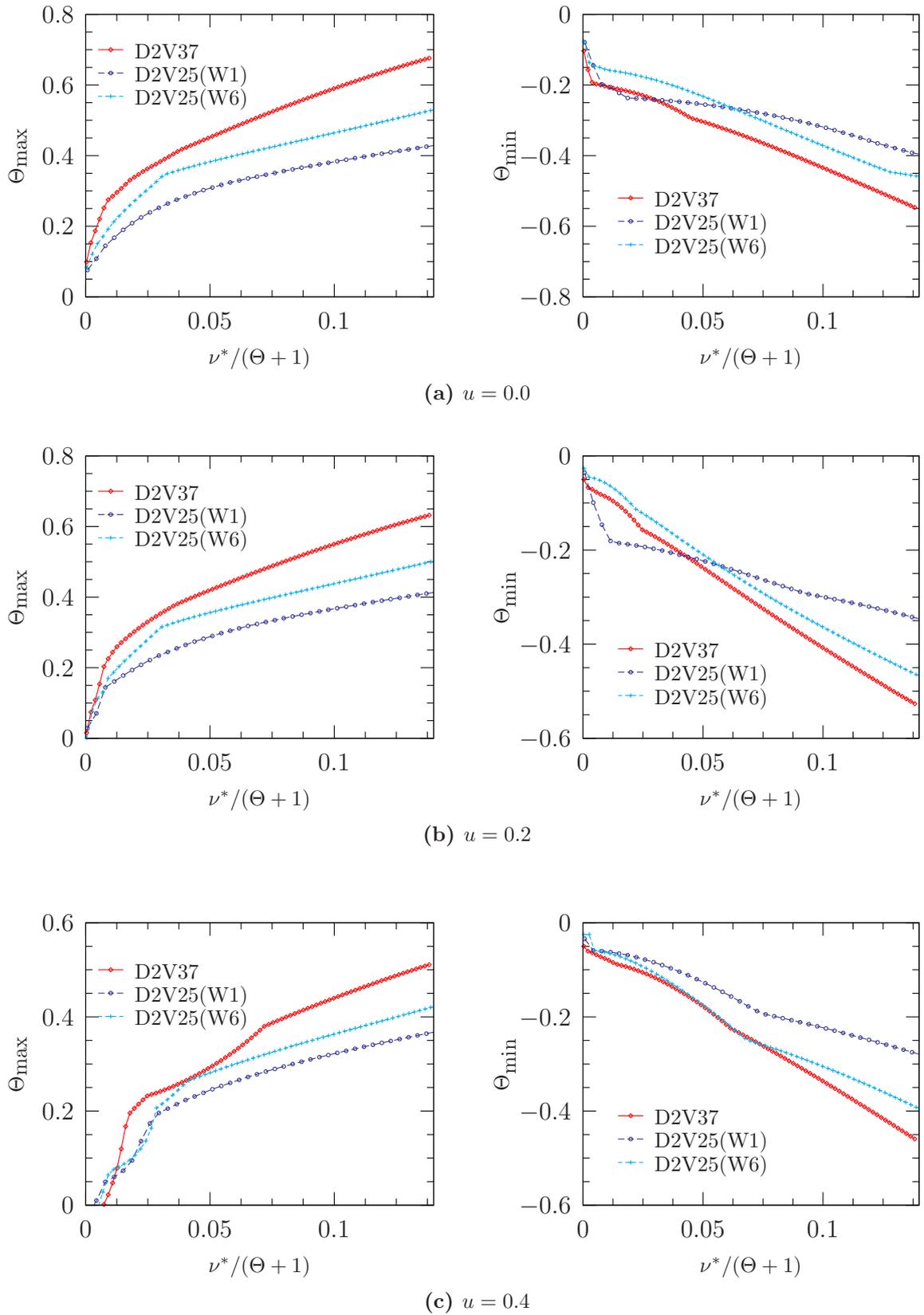


Figura 12: Temperaturas máximas e mínimas dos modelos térmicos D2V25 e D2V37 para qual o modelo é numericamente estável.

6 *Simulações*

Com objetivo de corroborar os resultados obtidos na análise de CE, neste capítulo são efetuadas comparações entre resultados obtidos através da solução numérica de problemas hidrodinâmicos, utilizando os modelos estudados neste trabalho, com as respectivas soluções analíticas. O problema escolhido foi o da difusão de quantidade de movimento e de energia. Esta escolha se deve a alguns fatores: a) como a semelhança entre as equações diferenciais que regem a dinâmica dos dois problemas, b) a dependência do regime transiente com a viscosidade, no caso da difusão da quantidade de movimento, e da condutividade térmica, c) o baixo custo computacional já que os problemas em questão são unidimensionais e d) o uso de condições de contorno periódicas. Também foram realizadas medições da velocidade do som, com o objetivo de averiguar o comportamento da equação de estado nos modelos aqui discutidos. Vale notar que as simulações realizadas utilizam somente a equação explícita para evolução da função distribuição discreta, em razão de não existir diferenças significativas na utilização do método implícito.

6.1 Difusão da quantidade de Movimento

O problema da difusão de quantidade de movimento consiste em um fluido que ocupa um meio bidimensional, semi-infinito na direção x e infinito na direção y . O fluido encontra-se inicialmente em repouso e a parede, que se encontra na posição $x = 0$, se move com uma velocidade u_0 na direção y . Supõe-se que a pressão permaneça constante durante o escoamento e impõe-se que não existam forças externas de maneira que a transferência de quantidade de movimento ocorrerá somente em virtude da tensão viscosa.

Pela simetria do problema, conclui-se que a solução deve independer da variável y e que a velocidade do fluido na direção x será nula. Para que uma solução analítica para o problema em questão seja obtida, utiliza-se a equação de Navier-Stokes para a quantidade de movimento, idêntica à obtida na Eq. (4.52), juntamente com as conclusões acima, o que resulta na seguinte equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \quad (6.1)$$

onde $\nu \equiv \mu/\rho$ é a viscosidade cinemática.

Para simplificar a comparação dos resultados, a equação anterior é reescrita usando-se variáveis adimensionais de posição, $x^* = x/h$, e tempo $t^* = t/\delta$, o que resulta em

$$\frac{\partial u_y^*}{\partial t^*} = \nu^* \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial x^{*2}} \quad u_y^*(x^*, 0) = 0 \quad u_y^*(0, t^*) = u_0^* \quad \lim_{x^* \rightarrow \infty} \frac{\partial u_y^*}{\partial x^*} = 0 \quad (6.2)$$

onde a viscosidade cinemática adimensional é dada por $\nu^* = \delta\nu/h^2$

A solução da equação diferencial acima pode ser encontrada através da aplicação da transformada de Laplace e resulta em:

$$u_y^*(x^*, t^*) = u_0^* \operatorname{erfc} \left(\frac{x^*}{2\sqrt{\nu^* t^*}} \right). \quad (6.3)$$

Para efetuar esta simulação, é necessário contornar a inexistência, até o presente momento, de condições de contorno adequadas para modelos térmicos. A maior parte dessa dificuldade encontra-se nas velocidades moleculares com alto valor em módulo, ou seja, que “saltam” vários sítios durante uma propagação, e na imposição de condições macroscópicas de contorno, como a condição de não escorregamento.

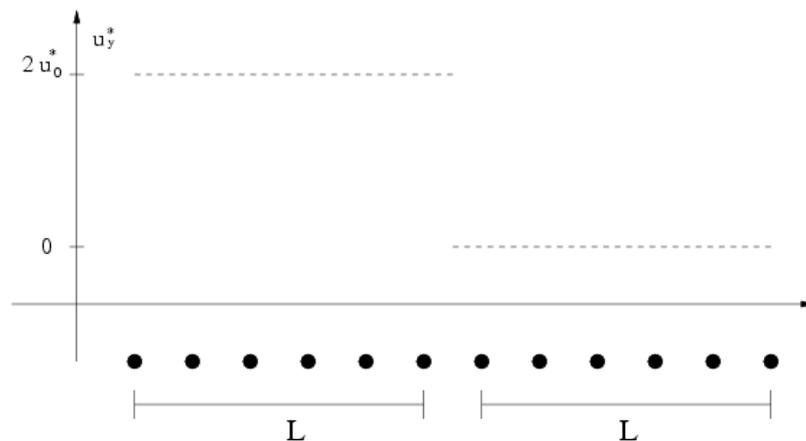


Figura 13: Ilustração da condição inicial utilizada para simulação do problema da difusão.

A estratégia adotada, com o intuito de contornar esta dificuldade, é utilizar um domínio com comprimento de $2L$ sítios na direção x e um sítio na direção y , conjuntamente com condições de contorno periódicas nas extremidades e uma condição inicial

de velocidade na direção y igual a $2u_0$ para os primeiros L sítios e velocidade nula nos L sítios restantes, conforme ilustrado na Fig. (13). Em razão da simetria do problema, o centro do domínio, que fica entre o sítio L e $L + 1$, permanece com a velocidade u_0 durante toda a simulação, conforme desejado. Assim, define-se neste ponto a posição $x^* = 0$, ficando o primeiro sítio a direita, o sítio $L + 1$, na posição $x^* = 0.5$. Se L for grande o suficiente, o contorno não influenciará a dinâmica no centro e podemos utilizar a solução analítica aqui obtida para a região positiva de x^* próxima à $x^* = 0$.

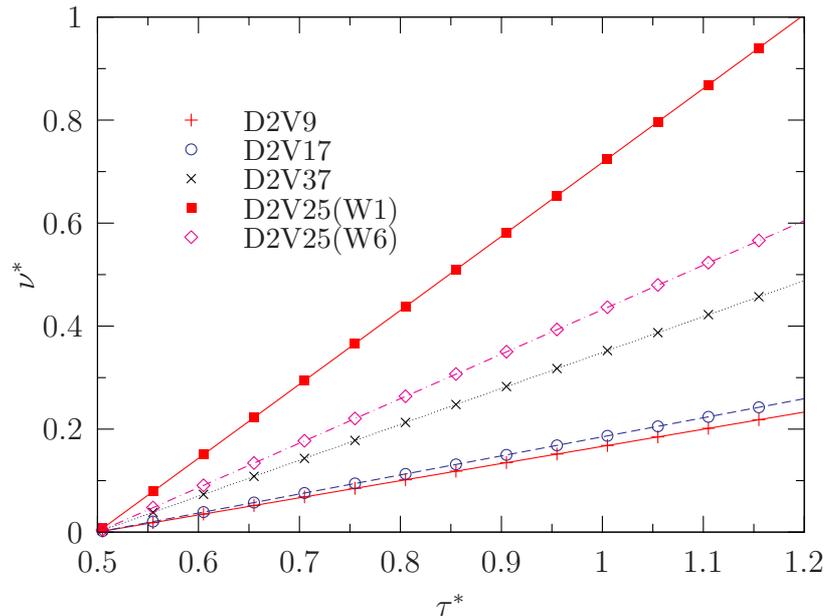


Figura 14: Dependência da viscosidade cinemática com o tempo de relaxação para o caso BGK com temperatura $\Theta = 0$, sendo as previsões teóricas representadas por linhas.

A solução na Eq. (6.3) é então utilizada para ajustar a curva obtida numericamente, sendo ν^* e u_0^* os parâmetros ajustáveis da curva. A Fig. (14) mostra o valor obtido para a viscosidade cinemática à temperatura $\Theta = 0$, quando utilizamos o operador BGK com diferentes valores do tempo de relaxação. As linhas representam as previsões analíticas da relação entre viscosidade e tempo de relaxação fornecidas pela Eq. (4.49) para a rede D2V9 e pela Eq. (4.53) para as demais redes. As curvas possuem inclinações diferentes pois a energia interna adimensional à temperatura $\Theta = 0$ é dada por $(\Theta + 1)/a^2$, sendo que o fator de escala varia de acordo com a rede. Os resultados estão em acordo com a análise de CE, com um erro relativo da ordem de 0,03%, mostrando que todos os modelos são capazes de determinar o campo de velocidades de forma satisfatória.

O gráfico da Fig. (15) mostra medidas numéricas da viscosidade para diferentes va-

lores da temperatura, utilizando tempo de relaxação $\tau^* = 0.8$. Os resultados novamente concordam com as relações obtidas através da análise multiescala, onde a viscosidade varia linearmente com a temperatura. A viscosidade da rede D2V9, apesar de não constar neste gráfico, também foi averiguada sendo esta, como previsto analiticamente, independente da temperatura. Observa-se também que não há medidas da viscosidade na rede D2V17 para temperaturas menores que $\Theta = -0.3$, isto ocorre porque, para valores inferiores da temperatura, o modelo apresenta instabilidade numérica.

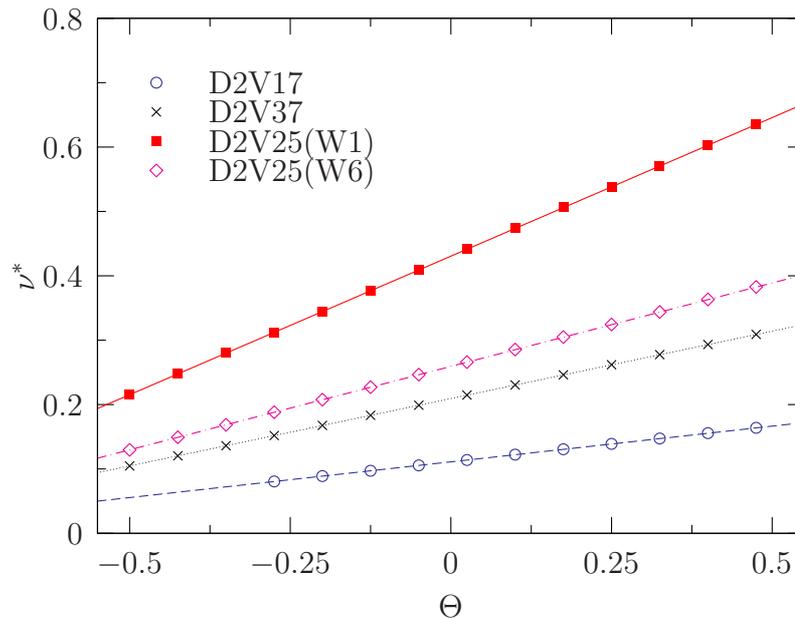


Figura 15: Dependência da viscosidade cinemática com a temperatura para o caso BGK, onde as linhas representam as previsões teóricas.

Para utilização do operador TRT em simulações, é preciso levar em conta que os tempos de relaxação utilizados devem ser escolhidos de maneira que a viscosidade e a condutividade térmica tenham valores positivos. Usando estas imposições, encontra-se que $\tau_1^* > 1/2$ e que o segundo tempo de relaxação pode ter valores positivos e negativos, sendo que os valores positivos devem obedecer a desigualdade $\tau_2^* > \frac{\tau_1^*}{\tau_1^* - 1/2}$ e os negativos ficam restritos a região $\tau_2^* < -2\tau_1^*$.

O gráficos em (16a) e (16b) mostram valores da viscosidade obtidos para a rede D2V25(W1) no caso do operador TRT nas regiões negativas e positivas do segundo tempo de relaxação, respectivamente. Vários valores de τ_1^* são utilizados, para que se possa averiguar a dependência da viscosidade com ambos tempos de relaxação, onde observa-se que os resultados concordam com a previsão teórica, mostradas como linhas no gráfico. Quando τ_2^* aproxima-se do limite da região negativa, ou seja, $\tau_2 \approx -2\tau_1$, a viscosidade aumenta rapidamente. Já no outro extremo, a viscosidade tende a zero perto do limite

positivo em τ_2^* . Tal comportamento é importante pois permite a variação o número de Prandtl sobre um intervalo grande de valores. Resultados para os modelos D2V25(W6) e D2V37 são encontrados nas Figs. (17) e (18), onde observa-se, assim como no modelo D2V25(W1), uma boa concordância com os valores da viscosidade obtidos através da análise de CE.

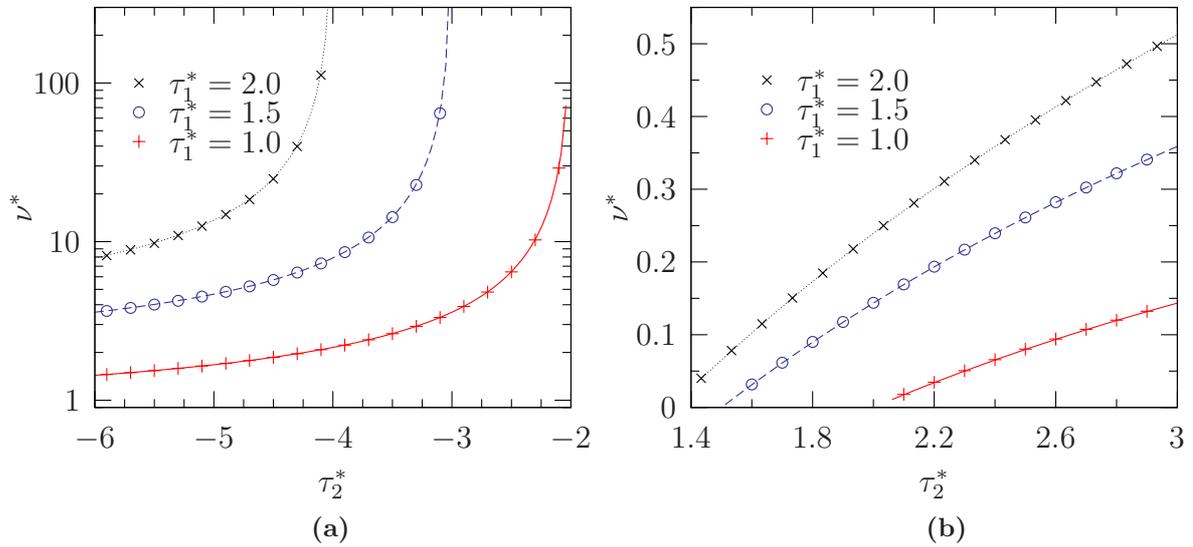


Figura 16: Viscosidade com operador TRT usando o modelo D2V25(W1). A figura mostra as regiões (a) negativa e (b) positiva dos valores do segundo o tempo de relaxação.

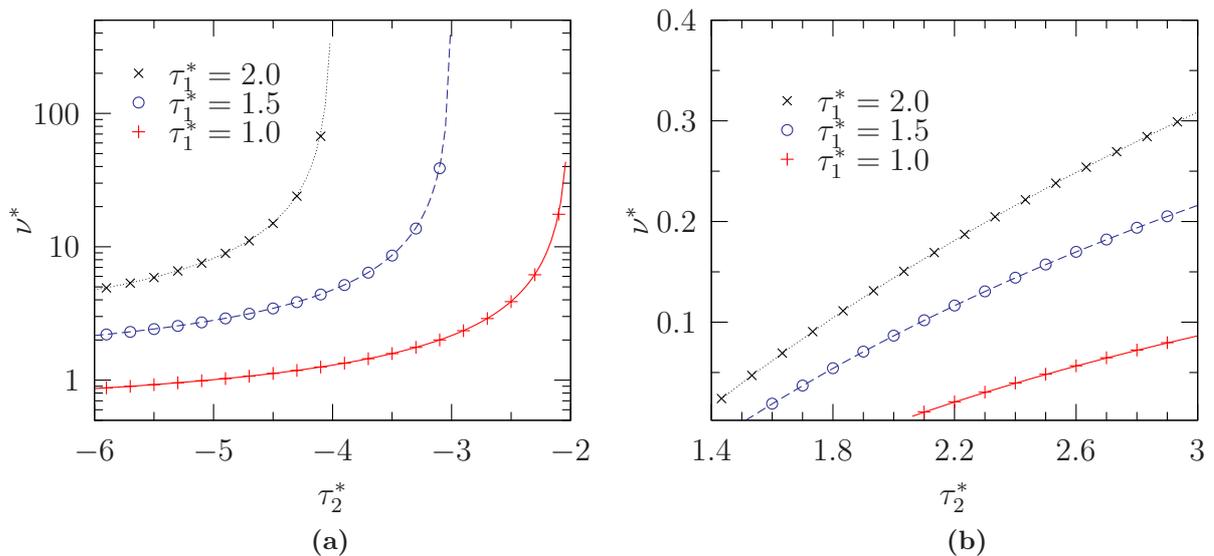


Figura 17: Viscosidade com operador TRT usando o modelo D2V25(W6). A figura mostra as regiões (a) negativa e (b) positiva dos valores do segundo o tempo de relaxação.

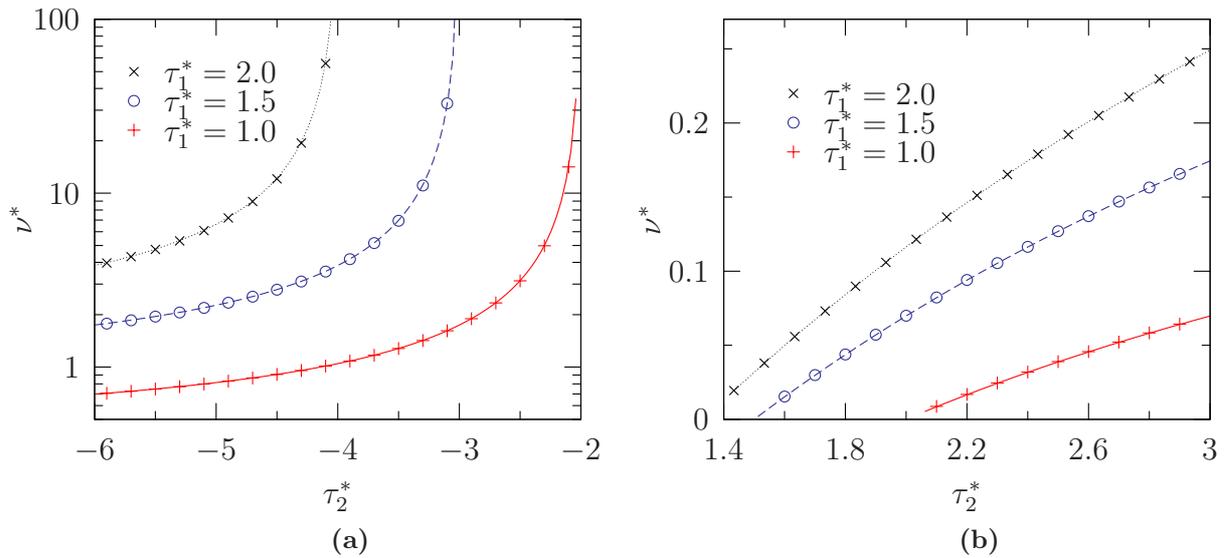


Figura 18: Viscosidade com operador TRT usando o modelo D2V37. A figura mostra as regiões (a) negativa e (b) positiva dos valores do segundo o tempo de relaxação.

6.2 Difusão da energia

Um caso análogo ao problema anterior é o da difusão de energia, que consiste em um fluido inicialmente em repouso à temperatura $\Theta = \Theta_\infty$ que ocupa um meio bidimensional semi-infinito, onde a parede em $x = 0$ se encontra à temperatura $\Theta_0 + \Theta_\infty$.

Assim como na difusão de quantidade de movimento, utiliza-se argumentos de simetria para concluir que a solução independe da coordenada y . Além desta constatação, algumas considerações são necessárias para que se possa obter uma solução analítica para este problema. A mais importante delas é considerar a pressão constante em todo o fluido durante o escoamento. Como a pressão depende da densidade e da energia interna, para que isto corra, é necessário que juntamente com a difusão de energia exista uma difusão de massa que equilibre a pressão em todos os pontos. Como a velocidade do fluido referente a esta difusão é baixa, pode-se desprezar o termo da dissipação viscosa. Usando estas considerações na Eq. (4.55) para evolução da energia interna:

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla e \right) = K \nabla^2 e - \rho e \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (6.4)$$

O último termo do lado direito da equação anterior pode ser reescrito utilizando a afirmação de que a pressão é constante:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} e + \rho \frac{\partial e}{\partial t} = -\rho e \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla e \right) = 0. \quad (6.5)$$

A partir desta relação e desprezando o termo convectivo devido a baixa velocidade do escoamento obtém-se:

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \frac{K}{2\rho} \frac{\partial^2 e}{\partial x^2} \quad (6.6)$$

Emprega-se então variáveis adimensionais, de maneira semelhante ao realizado na equação da difusão de quantidade de movimento, juntamente com a relação $e = e_0(\Theta + 1)$ para reescrever a equação anterior como:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t^*} = \frac{K^*}{2\rho} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^{*2}} \quad \Theta(x^*, 0) = \Theta_\infty \quad \Theta(0, t^*) = \Theta_0 + \Theta_\infty \quad \lim_{x^* \rightarrow \infty} \frac{\partial \Theta}{\partial x^*} = 0 \quad (6.7)$$

onde $K^* = \delta K/h^2$. Isto demonstra que ambos processos de difusão são regidos pela mesma equação diferencial parcial, com condições de contorno e iniciais análogas. Conseqüentemente, a solução para este problema fica:

$$\Theta(x^*, t^*) = \Theta_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{x^*}{\sqrt{2K^*t^*/\rho}} \right) + \Theta_\infty. \quad (6.8)$$

Para simular tal problema é utilizada a mesma estratégia adotada na difusão de quantidade de movimento, fazendo um salto inicial na temperatura e definindo a posição $x^* = 0$ no centro do domínio. Como a pressão deve ser constante, é necessário que haja um salto inicial na densidade para que o produto ρe não varie no domínio. O valor do salto inicial é escolhido de maneira que $\Theta_0 \ll 1$, o que faz com que a variação necessária na densidade não seja muito grande para que ρ na Eq. (6.8) possa ser considerado constante e de maneira que a condutividade térmica, que depende da temperatura, também permaneça constante.

Para o operador BGK, foram medidas as condutividades térmicas dos modelos D2V17, D2V25(W1), D2V25(W6) e D2V37. O gráfico na Fig. (19) apresenta simulações realizadas com o intuito de averiguar a dependência da condutividade térmica com o tempo de relaxação, quando a difusão acontece à temperatura $\Theta_\infty = 0$. Os resultados obtidos concordam com a relação encontrada na Eq. (4.56) para a rede D2V17 e na Eq. (4.59) para as demais redes.

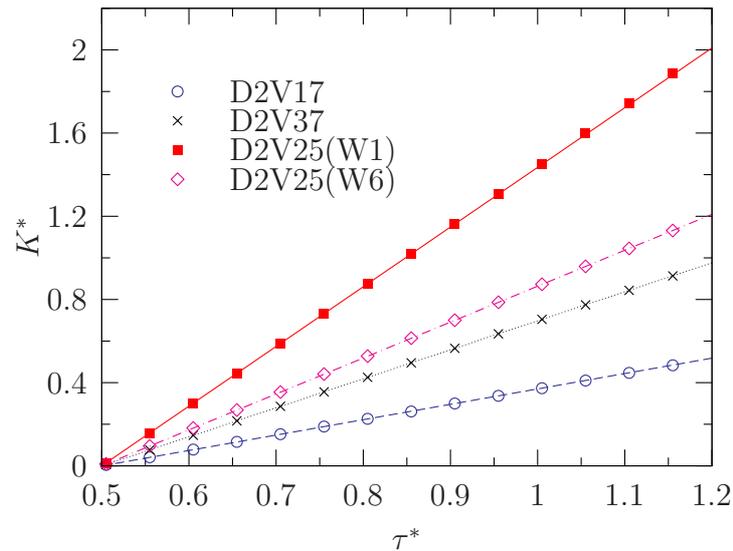


Figura 19: Condutividade térmica para os modelos utilizados com operador BGK para diferentes valores do tempo de relaxação.

A dependência com a temperatura é abordada no gráfico da Fig. (20) onde há também uma boa concordância com os valores previstos. Nesta figura é importante notar o comportamento diferenciado da condutividade térmica para a rede D2V17, que diminui com o aumento da temperatura, conforme previsto pela Eq. (4.56). Este comportamento se deve ao fato deste modelo não ter os momentos de quarta ordem da distribuição de equilíbrio idênticos os da distribuição de MB, o que faz com que erros surjam na equação da energia e alterem a forma da condutividade que seria encontrada para um modelo que tivesse as formas corretas destes momentos, conforme a Eq. (4.59). Observa-se que foi possível obter valores corretos de K^* para os modelos D2V17 mesmo para altas temperaturas. Isto acontece porque os erros em Θ , encontrados na Eq. (4.55), são multiplicados ou pela velocidade, que neste problema é praticamente nula, ou pelo gradiente de pressão, que também é nulo pois a pressão é constante, o que faz com que os erros não influenciem no processo de difusão.

O resultado da averiguação da condutividade térmica para os modelos D2V25(W1), D2V25(W6) e D2V37 com operador TRT, é mostrado, respectivamente, nas Figs. (21), (22) e (23). Nestes gráficos observa-se que a variação de K^* com a temperatura e com o primeiro tempo de relaxação, concorda com o resultado esperado a partir da análise de CE encontrado na Eq. (4.72). Outra constatação importante, obtida através das simulações de ambos os problemas de difusão com o operador TRT, é a robustez, em relação à estabilidade, da LBE com este operador a baixas viscosidades.

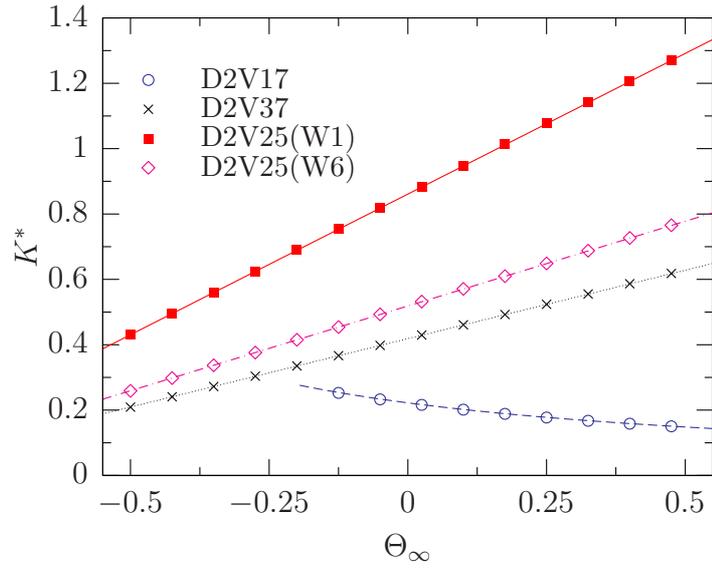


Figura 20: Condutividade térmica com operador BGK para diferentes valores da temperatura.

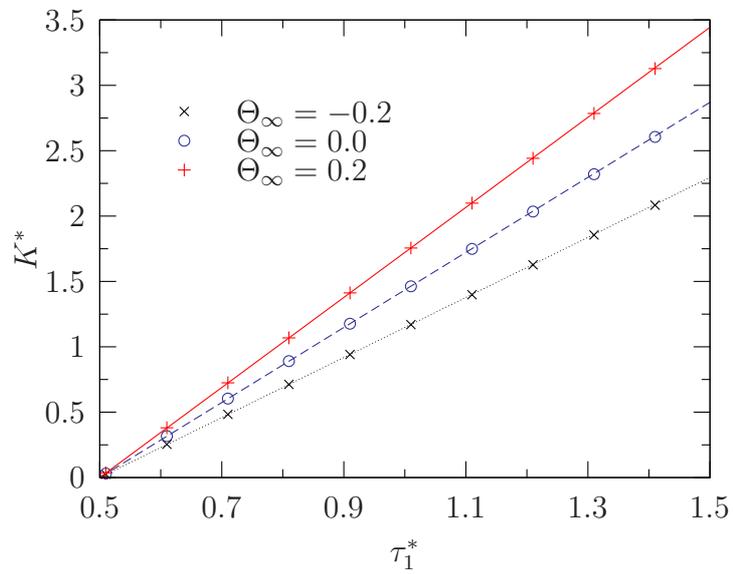


Figura 21: Medida da condutividade térmica para o modelo D2V25(W1).

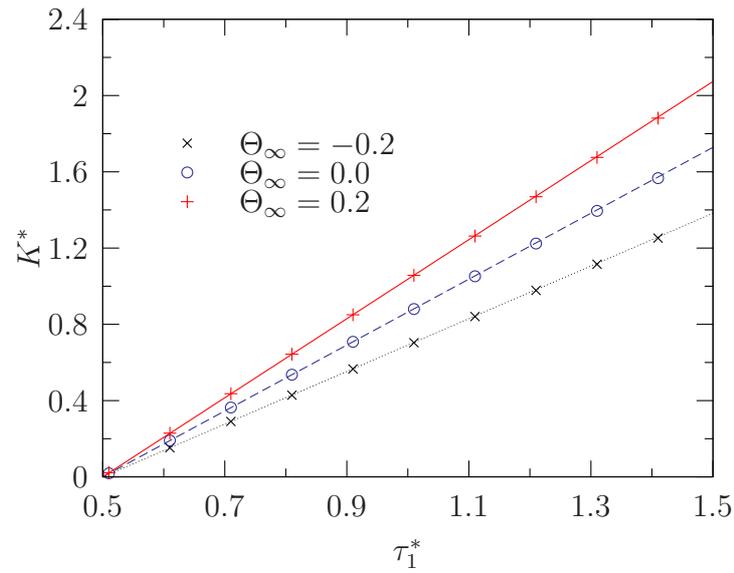


Figura 22: Medida da condutividade térmica para o modelo D2V25(W6).

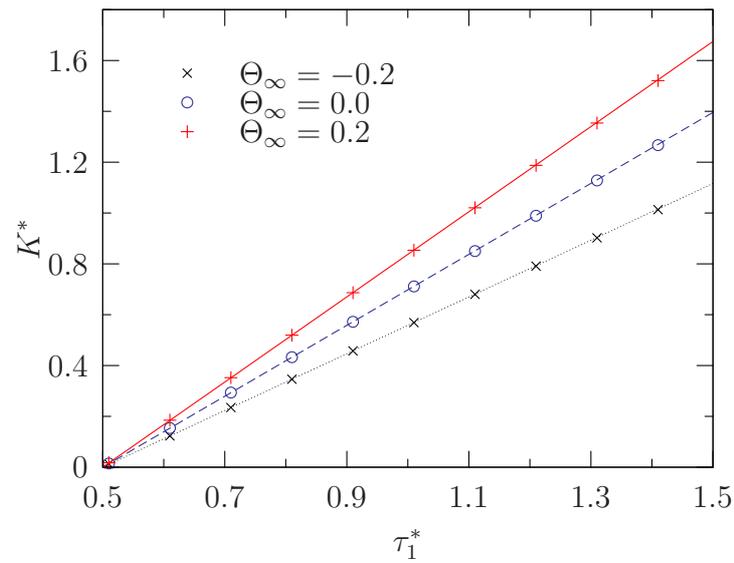


Figura 23: Medida da condutividade térmica para o modelo D2V37.

6.3 Velocidade do Som

Para completar a averiguação do comportamento macroscópico dos modelos, realiza-se uma medição numérica da velocidade do som através da propagação de uma onda de pressão. Tal medição é interessante pois a velocidade do som, c_s , se relaciona com a pressão através da relação termodinâmica:

$$c_s^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s \quad (6.9)$$

onde s é a entropia por unidade de massa.

Como a pressão nos modelos aqui estudados é dada por $P = \rho e$, pode-se facilmente calcular a velocidade do som a partir da relação anterior:

$$c_s^2 = \left(\frac{\partial \rho e}{\partial \rho} \right)_s = e + \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_s = 2e, \quad (6.10)$$

onde foi feito uso da relação fundamental na forma:

$$de = Tds + \frac{P}{\rho^2} d\rho = \left(\frac{\partial e}{\partial s} \right)_\rho ds + \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_s d\rho. \quad (6.11)$$

Quando a viscosidade pode ser considerada desprezível e as variações na pressão e densidade podem ser consideradas como uma pequena perturbação, obtém-se que a evolução da pressão que obedece a equação da onda^[23]. A solução para esta equação consiste em duas ondas, sendo que uma se propaga para a direita e outra para a esquerda, com a forma do perfil inicial porém com metade de sua amplitude.

Para encontrar a velocidade do som no meio, foi utilizado um perfil inicial na pressão com uma forma gaussiana localizado no centro domínio. Como em LBM atingir viscosidade nula é impossível devido a instabilidade numérica, efeitos dissipativos ocorrem durante a propagação da onda. Porém ainda é possível a determinação da velocidade do som a partir do centro da onda, $\langle x \rangle$, calculado por:

$$\langle x \rangle = \left(\sum_{x>0} x [P(x) - P_0] \right) / \left(\sum_{x>0} [P(x) - P_0] \right) \quad (6.12)$$

onde $P_0 = \lim_{x \rightarrow \infty} P(x)$ é a pressão normal do fluido.

Na Fig. (24), podemos visualizar que os resultados destas medida concordam, para todos os modelos, com aqueles obtidos a partir da Eq. (6.10) e representados por linhas nesta figura. Como previsto através da equação de estado, observa-se um aumento da velocidade do som no meio com a temperatura. Nota-se também que para o tempo de relaxação utilizado, $\tau^* = 1$, foi possível obter resultados com temperaturas variando de $\Theta = -0.5$ até $\Theta = 0.5$, sem a presença de instabilidades para todos os modelos estudados.

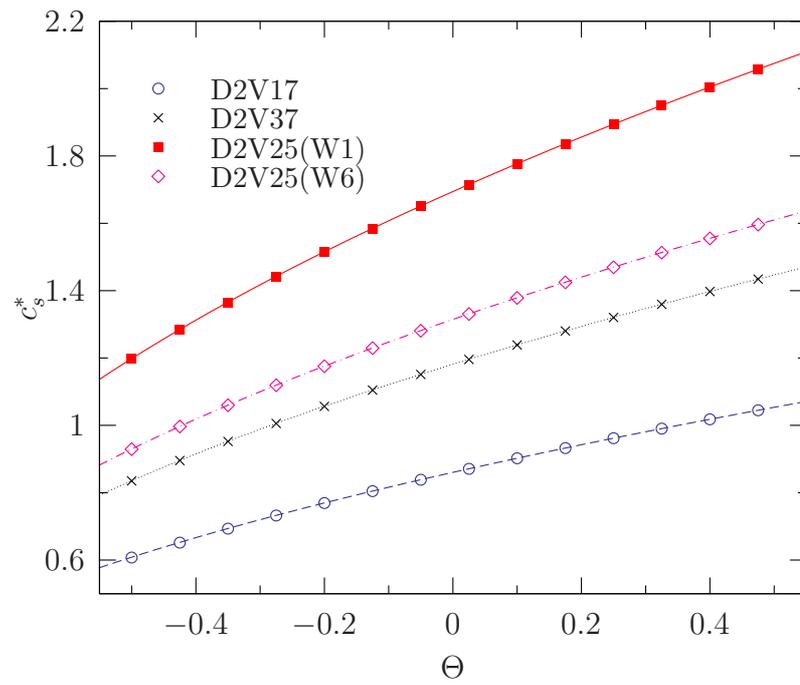


Figura 24: Medida da velocidade do som para os vários modelos estudados.

7 Conclusão

Através da análise multiescala realizada neste trabalho, mostrou-se que o método explícito possui erros nas equações macroscópicas da ordem de δ , porém, no caso dos operadores de colisão estudados, estes erros podem ser incorporados aos coeficientes de transporte. Tendo em vista este resultado, não há vantagem significativa no uso do método implícito, já que os dois métodos diferem basicamente na maneira como os coeficientes de transporte se relacionam com os tempos de relaxação.

Quanto aos modelos obtidos pelas abscissas prescritas, pode-se observar que o modelo D2V9 está restrito a problemas isotérmicos e que o modelo D2V17 até pode ser utilizado para casos não isotérmicos porém, devido ao erro encontrado nas equações macroscópicas, sua aplicação fica restrita para baixas velocidades e para temperaturas muito próximas à $\Theta = 0$.

Já os modelos D2V25 e D2V37 mostraram-se capazes de simular problemas térmicos de maneira satisfatória exibindo equações macroscópicas consistentes, tanto utilizando o operador BGK quanto o operador TRT, e um ótimo comportamento em relação à estabilidade numérica. A análise de CE demonstrou que utilizando estes modelos em conjunto com o operador TRT, é possível variar a viscosidade e condutividade térmica de maneira independente.

Dentre estes três modelos, o D2V25(W6) provou ser bastante útil para determinação dos campos de velocidade e temperatura em problemas práticos. Tal conclusão se deve ao menor custo computacional necessário, já que este possui doze velocidades discretas a menos que a rede D2V37, e por apresentar limites de estabilidade mais próximos aos deste modelo de trinta e sete velocidades do que a rede D2V25(W1).

Logo, unindo-se o modelo D2V25(W6) ao operador de colisão de dois tempos de relaxação é possível, com um menor número de velocidades e com um bom comportamento da estabilidade numérica, simular problemas térmicos para um grande intervalo do número de Prandtl.

A análise de estabilidade também forneceu indícios de que um aumento na ordem

de descrição da distribuição de equilíbrio em relação à distribuição de MB, utilizando o métodos das abscissas prescritas, resulta em melhores limites de estabilidade, no caso do operador BGK.

Sugere-se, como possíveis trabalhos futuros, o estudo da análise de estabilidade dos modelos D2V25 e D2V37 com operador do tipo TRT, devido aos bons resultados obtidos da análise multiescala e das simulações, e a elaboração de condições de contorno de temperatura e fluxo de calor prescritos sem efeitos de escorregamento para estes modelos.

Referências

- 1 QIAN, Y. H.; D'HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P. Lattice bgk models for navier-stokes equation. *Europhysics Letters*, v. 17, n. 6, p. 479–484, jan. 1992.
- 2 SHAN, X. Simulation of rayleigh-bénard convection using a lattice boltzmann method. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 55, n. 3, p. 2780–2788, Mar 1997.
- 3 EGGELS, J. G. M.; SOMERS, J. A. Numerical simulation of free convective flow using the lattice-boltzmann scheme. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 16, n. 5, p. 357–364, out. 1995.
- 4 LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Theory of the lattice boltzmann method: Acoustic and thermal properties in two and three dimensions. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 68, n. 3, p. 036706, 2003.
- 5 PHILIPPI, P. C. et al. From the continuous to the lattice boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 73, n. 5, p. 056702, May 2006.
- 6 FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 56, n. 14, p. 1505–1508, Apr 1986.
- 7 MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 61, n. 20, p. 2332–2335, Nov 1988.
- 8 HIGUERA, F.; ZANETTI, G. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *Europhysics Letters*, v. 9, n. 663, 1989.
- 9 CHEN, S. et al. Lattice boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 67, n. 27, p. 3776–3779, Dec 1991.
- 10 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*, American Physical Society, v. 94, n. 3, p. 511–525, May 1954.
- 11 HE, X.; LUO, L.-S. Theory of the lattice boltzmann method: From the boltzmann equation to the lattice boltzmann equation. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 56, n. 6, p. 6811–6817, Dec 1997.
- 12 HARRIS, S. *An Introduction to the Theory of the Boltzmann Equation*. [S.l.]: Dover Publications, 2004. ISBN 0-486-43831-7.
- 13 MCNAMARA, G.; ALDER, B. Analisis of the lattice boltzmann treatment of hydrodynamics. *Physica A*, v. 194, p. 218–228, March 1993.

- 14 ALEXANDER, F. J.; CHEN, S.; STERLING, J. D. Lattice boltzmann thermohydrodynamics. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 47, n. 4, p. 2249–2252, Apr 1993.
- 15 CHEN, Y.; OHASHI, H.; AKIYAMA, M. Thermal lattice bhatnagar-gross-krook model without nonlinear deviations in macrodynamic equations. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 50, n. 4, p. 2776–2783, Oct 1994.
- 16 QIAN, Y. H.; ORSZAG, S. A. Lattice bgk models for the naviers stokes equation: Nonlinear deviation in compressible regimes. *Europhysics Letters*, v. 21, n. 3, p. 255–259, jan. 1993.
- 17 HE, X.; CHEN, S.; DOOLEN, G. D. A novel thermal model for the lattice boltzmann method in incompressible limit. *Journal of Computational Physics*, v. 146, n. CP986057, p. 282–300, October 1998.
- 18 SHAN, X.; HE, X. Discretization of the velocity space in the solution of the boltzmann equation. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 80, n. 1, p. 65–68, Jan 1998.
- 19 PHILIPPI, P. C. et al. From the boltzmann to the lattice-boltzmann equation: beyond bgk collision models. *International Journal of Modern Physics C*, 2007.
- 20 WOLF-GRADOW, D. A. Stability analysis of lattice boltzmann methods. In: _____. *Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann methods: An Introduction*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2000. cap. 5.6.
- 21 STERLING, J. D.; CHEN, S. Stability analysis of lattice boltzmann methods. *Journal of Computational Physics*, v. 123, n. 0016, p. 196–206, January 1996.
- 22 LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Theory of the lattice boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 61, n. 6, p. 6546–6562, Jun 2000.
- 23 LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. M. Sound waves. In: _____. *Fluid Mechanics*. 2nd. ed. [S.l.]: Elsevier, 2005. v. 6, cap. 8, p. 251–254.

APÊNDICE A – Polinômios de Hermite

De modo a introduzir os polinômios tensoriais de Hermite, inicialmente define-se a função peso:

$$\omega(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r^2/2}}{(2\pi)^{D/2}}. \quad (\text{A.1})$$

A partir desta função peso, segue a definição dos tensores polinomiais de Hermite utilizada neste trabalho:

$$\mathcal{H}^{(m)}(\mathbf{r}) \equiv \frac{(-1)^n}{\omega(\mathbf{r})} \nabla^{(n)}[\omega(\mathbf{r})] = \frac{(-1)^n}{\omega(\mathbf{r})} \underbrace{\nabla \nabla \dots \nabla}_{n \text{ vezes}}[\omega(\mathbf{r})] \quad (\text{A.2})$$

Desse modo um elemento qualquer do tensor polinomial de Hermite de ordem n é dado por:

$$\mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m}^{(m)}(\mathbf{r}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\mathbf{r})} \frac{\partial^m[\omega(\mathbf{r})]}{\partial x_{\alpha_1} \partial x_{\alpha_2} \dots \partial x_{\alpha_m}} \quad (\text{A.3})$$

Através da equação anterior, nota-se que os polinômios tensoriais de Hermite são simétricos por troca de índices. Pode-se demonstrar que estes polinômios são ortogonais sobre o produto interno:

$$\int \omega(\mathbf{r}) \mathcal{H}_{s_m}^{(m)}(\mathbf{r}) \mathcal{H}_{l_n}^{(n)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{mn} \delta_{l_n s_m} (n_1! n_2! n_3! \dots n_D!) \quad (\text{A.4})$$

onde δ é o delta de Kronicker, sendo que $\delta_{l_n s_m}$ é 0 caso não exista nenhuma permutação de índices em que os dois conjunto de índices sejam idênticos e 1 caso exista. As fatoriais no lado direito dizem respeito ao número de repetições de uma coordenada no conjunto de índices l_n , por exemplo, n_1 é o numero de vezes que a coordenada x_1 aparece em l_n .

Se uma função $f(\mathbf{r})$ é contínua e de quadrado integrável podemos expandi-la como:

$$f(\mathbf{r}) = \omega(\mathbf{r}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{s_n}^{(n)} \mathcal{H}_{s_n}^{(n)}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.5})$$

onde se impõe que os coeficientes $a_{s_n}^{(n)}$ também sejam simétricos por troca de índices. Desse modo os coeficientes da expansão são dados por:

$$a_{s_n}^{(n)} = \int f(\mathbf{r}) \mathcal{H}_{s_n}^{(n)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{A.6})$$

Os polinômios de Hermite para as primeiras ordens têm a seguinte forma:

$$\mathcal{H}^{(0)}(\mathbf{r}) = 0, \quad (\text{A.7})$$

$$\mathcal{H}_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}) = r_\alpha, \quad (\text{A.8})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{r}) = r_\alpha r_\beta - \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma}^{(3)}(\mathbf{r}) = r_\alpha r_\beta r_\gamma - (r_\gamma \delta_{\alpha\beta} + r_\alpha \delta_{\gamma\beta} + r_\beta \delta_{\alpha\gamma}). \quad (\text{A.10})$$

APÊNDICE B - Operador TRT

Nesta seção foca-se na derivação do operador de dois tempos de relaxação para o caso bidimensional. Este é obtido através de uma série de aproximações do operador linearizado de Boltzmann, que atua sobre a parte de não equilíbrio da função distribuição, ϕ , que definimos como:

$$\phi f^{eq} \equiv f - f^{eq} \quad (\text{B.1})$$

Nesta dedução será utilizada uma forma expandida da função ϕ em polinômios tensoriais de Hermite:

$$\phi = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} b_{r_m}^{(m)} \mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\mathbf{c}^*) \quad (\text{B.2})$$

onde $\mathbf{c}^* \equiv \frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}}{\sqrt{e}}$ é a velocidade relativa das moléculas em relação ao fluido conhecida como velocidade peculiar. Pode-se calcular os termos $b_{r_m}^{(m)}$ utilizando a Eq. (B.1) e a ortogonalidade dos polinômios tensoriais de Hermite:

$$b_{r_m}^{(m)} = \frac{1}{\rho} \int (f - f^{eq}) \mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\mathbf{c}^*) d\mathbf{c} \quad (\text{B.3})$$

Como $\mathcal{H}^{(0)}(\mathbf{c}^*) = 0$ e $\mathcal{H}_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{c}^*) = c_{\alpha}^*$, tem-se que o primeiro termo não nulo da expansão será o de segunda ordem:

$$b_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{1}{\rho} \int (f - f^{eq}) (c_{\alpha}^* c_{\beta}^* - \delta_{\alpha\beta}) d\mathbf{c} = \frac{1}{\rho} \int f c_{\alpha}^* c_{\beta}^* d\mathbf{c} - \frac{1}{\rho} \int f^{eq} c_{\alpha}^* c_{\beta}^* d\mathbf{c} \quad (\text{B.4})$$

$$= \frac{P_{\alpha\beta}}{\rho e} - \frac{p \delta_{\alpha\beta}}{\rho e} = \frac{T_{\alpha\beta} - p \delta_{\alpha\beta}}{p} \equiv \frac{\tau_{\alpha\beta}}{p} \quad (\text{B.5})$$

onde $P_{\alpha\beta}$ é o tensor pressão, $p = \rho e$ é a pressão termodinâmica e $\tau_{\alpha\beta}$ é o tensor tensão viscosa.

Como mencionado anteriormente, utiliza-se como ponto de partida o operador de colisão linearizado de Boltzmann que tem a seguinte forma:

$$\Omega[f] = f^{eq} \mathcal{L}[\phi] \quad (\text{B.6})$$

Aqui não será realizado o uso da forma explícita de \mathcal{L} , mas sim de algumas suposições sobre a atuação deste operador. Fazendo uso da forma expandida de ϕ na Eq. (B.2)

$$\mathcal{L}[\phi] = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} b_{r_m}^{(m)} \mathcal{L} [\mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\mathbf{c}^*)] \quad (\text{B.7})$$

Supõe-se então que a atuação de \mathcal{L} sobre o polinômio de Hermite $\mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\mathbf{c})$ possa ser escrito como uma combinação de polinômios de Hermite de ordem m , ou seja;

$$\mathcal{L} [\mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\mathbf{c})] = \gamma_{r_m, s_m}^{(2m)} \mathcal{H}_{s_m}^{(m)}(\mathbf{c}), \quad (\text{B.8})$$

de modo que o operador possa ser escrito como:

$$\mathcal{L}[\phi] = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} b_{r_m}^{(m)} \gamma_{r_m, s_m}^{(2m)} \mathcal{H}_{s_m}^{(m)}(\mathbf{c}), \quad (\text{B.9})$$

Usando uma simplificação conhecida como procedimento de Gross-Jackson, considera-se $\gamma_{r_m, s_m}^{(2m)}$ como um tensor esférico para ordens acima de um dado valor N . Com esta aproximação o operador linearizado assume a forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[\phi] &= \sum_{m=0}^N b_{r_m}^{(m)} \gamma_{r_m, s_m}^{(2m)} \mathcal{H}_{s_m}^{(m)}(\mathbf{c}) - \gamma_{N+1} \sum_{m=N+1}^{\infty} b_{r_m}^{(m)} \mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\mathbf{c}) \\ &= \sum_{m=0}^N b_{r_m}^{(m)} [\gamma_{r_m, s_m}^{(2m)} + \gamma_{N+1} \delta_{r_m, s_m}^{(2m)}] \mathcal{H}_{s_m}^{(m)}(\mathbf{c}) - \gamma_{N+1} \phi \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

onde o tensor $\delta_{r_m, s_m}^{(2m)}$ é o tensor identidade de ordem $2m$. Escolhendo N , determinamos a ordem de aproximação, já que o efeito das ordens superiores à N são condensados no fator γ_{N+1} . Fazendo $N = 0$ ou $N = 1$ obtemos o operador BGK, já que $b^{(0)}$ e $b_{\alpha}^{(1)}$ são nulos. Como o interesse é a obtenção de um operador de dois tempos de relaxação, escolhe-se $N = 2$ e considerando o tensor de quarta ordem entre colchetes na Eq. (B.10) como um tensor isotrópico, ou seja,

$$\gamma_{\alpha\beta\gamma\eta}^{(4)} + \gamma_3 \delta_{\alpha\beta\nu\eta}^{(4)} = -\frac{1}{\tau_2} [\delta_{\alpha\beta}\delta_{\nu\eta} + \delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\eta} + \delta_{\alpha\eta}\delta_{\nu\eta}], \quad (\text{B.11})$$

obtém-se a seguinte forma final para o operador de colisão:

$$\begin{aligned} \Omega[f] &= -f^{eq} \left[\frac{\tau_{\alpha\beta}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\nu\eta} + \delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\eta} + \delta_{\alpha\eta}\delta_{\nu\eta})(c_\nu^* c_\eta^* - \delta_{\nu\eta})}{2\rho e \tau_2} + \frac{\phi}{\tau_1} \right] \\ &= -\frac{f - f^{eq}}{\tau_1} - \frac{f^{eq} \tau_{\alpha\beta} (\xi_\alpha - u_\alpha)(\xi_\beta - u_\beta)}{\rho e^2 \tau_2} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

onde γ_3 é relacionado com o inverso do primeiro tempo de relaxação τ_1 e supõe-se que o tensor tensão viscosa tenha traço nulo, ou seja, $\tau_{\alpha\alpha} = 0$.

APÊNDICE C – Cálculo do tensor $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$

O cálculo aqui descrito é restrito aos modelos que possuem momentos da distribuição de equilíbrio até terceira ordem idênticos aos da distribuição de Maxwell-Boltzmann, ou seja,

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} = \rho \quad (C.1)$$

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} \xi_i = \rho \mathbf{u} \quad (C.2)$$

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} = \rho u_\alpha u_\beta + \rho e \delta_{\alpha\beta} \quad (C.3)$$

$$\sum_{i=0}^b f_i \xi_{\beta,i} \xi_{\eta,i} \xi_{\alpha,i} = \rho u_\beta u_\eta u_\alpha + \rho e (u_\alpha \delta_{\eta\beta} + u_\beta \delta_{\alpha\eta} + u_\eta \delta_{\alpha\beta}) \quad (C.4)$$

Utilizando a definição de $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ na Eq. (4.27) e a relação de $f_i^{(1)}$ na Eq. (4.10):

$$-\frac{\varepsilon}{\tau} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \partial_0 \left(\sum_{i=0}^b f_i^{eq} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \right) + \partial_\eta \left(\sum_{i=0}^b f_i^{eq} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \xi_{i,\eta} \right) \quad (C.5)$$

Substituindo as relações para os momentos de segunda e terceira ordem conforme as Eqs. (C.3) e Eqs. (C.4):

$$\begin{aligned} -\frac{\varepsilon}{\tau} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = & \partial_0(\rho u_\alpha) u_\beta + \rho u_\alpha (\partial_0 u_\beta) + \partial_\eta(\rho u_\alpha u_\eta) u_\beta + \rho u_\alpha u_\eta (\partial_\eta u_\beta) + \rho e (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) + \\ & + u_\beta \partial_\alpha(\rho e) + u_\alpha \partial_\beta(\rho e) + [\partial_0(\rho e) + \partial_\eta(\rho e u_\eta)] \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (C.6)$$

Rearranjando os termos da equação anterior pode-se escrever:

$$-\frac{\varepsilon}{\tau}\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = u_\beta[\partial_0(\rho u_\alpha) + \partial_\eta(\rho u_\alpha u_\eta) + \partial_\alpha(\rho e)] + u_\alpha[\rho(\partial_0 u_\beta) + \rho u_\eta(\partial_\eta u_\beta) + \partial_\beta(\rho e)] + \rho e(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) - \rho e(\partial_\eta u_\eta)\delta_{\alpha\beta}. \quad (\text{C.7})$$

Como foi assumido que a distribuição de equilíbrio tem momentos idênticos as distribuição de MB até terceira ordem, a seguinte relação é satisfeita:

$$\partial_0(\rho u_\alpha) + \partial_\eta(\rho u_\alpha u_\eta) + \partial_\alpha(\rho e) = \rho(\partial_0 u_\beta) + \rho u_\eta(\partial_\eta u_\beta) + \partial_\beta(\rho e) = 0, \quad (\text{C.8})$$

o que faz com que o primeiro e o segundo termo da Eq. (C.7) se anulem. Desse modo o tensor assume a forma final:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\frac{\rho e \tau}{\varepsilon}(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) + \frac{\rho e \tau}{\varepsilon}(\partial_\eta u_\eta)\delta_{\alpha\beta}.$$

APÊNDICE D – Cálculo do vetor $q_\alpha^{(1)}$

Assim como no cálculo do tensor $\Pi^{(1)}$ assume-se que os momentos $\langle \xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta \rangle$ sejam iguais aos da distribuição de MB:

$$\sum_{i=0}^b f_i \xi^2 \xi_{\alpha,i} \xi_{\beta,i} = \rho u^2 u_\alpha u_\beta + \rho e u^2 \delta_{\alpha\beta} + 6\rho e u_\alpha u_\beta + 4\rho e^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{D.1})$$

além dos momentos até terceira, conforme descrito pelas Eqs. (C.1), (C.2), (C.3) e (C.4). Utilizando a definição de $q_\alpha^{(1)}$ encontrada na Eq. (4.32) e a relação para $f_i^{(1)}$ na Eq. (4.10):

$$\begin{aligned} -\frac{\varepsilon}{\tau} \left[q_\alpha^{(1)} + u_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \right] &= -\frac{\varepsilon}{\tau} \sum_{i=0}^b \frac{f_i^{(1)} \xi_i^2 \xi_{i,\alpha}}{2} = \partial_0 \left(\sum_{i=0}^b \frac{\xi_i^2 \xi_{i,\alpha}}{2} \right) + \partial_\beta \left(\sum_{i=0}^b \frac{\xi_i^2 \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta}}{2} \right) \\ &= 2\partial_0(\rho e u_\alpha) + \frac{1}{2}\partial_0(\rho u^2 u_\alpha) + \frac{1}{2}\partial_\beta(\rho u^2 u_\alpha u_\beta) \\ &\quad + \frac{1}{2}\partial_\alpha(\rho e u^2) + 3\partial_\beta(\rho e u_\alpha u_\beta) + 2\partial_\alpha(\rho e^2) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Reorganizando os termos da equação anterior:

$$\begin{aligned} -\frac{\varepsilon}{\tau} \left[q_\alpha^{(1)} + u_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \right] &= \left[2e + \frac{u^2}{2} \right] [\partial_0(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha(\rho e)] \\ &\quad + 2u_\alpha [\rho(\partial_0 e) + \rho u_\beta \partial_\beta e] + u_\alpha u_\beta [\rho \partial_0 u_\beta + \rho u_\eta (\partial_\eta u_\beta) + \partial_\beta(\rho e)] \\ &\quad + \rho e (\partial_\beta u_\alpha u_\beta) + 2\rho e (\partial_\alpha e) + \rho e u_\beta (\partial_\alpha u_\beta) \\ &= \rho e (\partial_\beta u_\alpha u_\beta) + 2\rho e (\partial_\alpha e) + \rho e u_\beta (\partial_\alpha u_\beta) - 2\rho e u_\alpha (\partial_\beta u_\beta) \\ &= 2\rho e (\partial_\alpha e) + \rho e u_\beta (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \partial_\beta u_\beta) = 2\rho e (\partial_\alpha e) - \frac{\varepsilon}{\tau} u_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Da equação anterior obtém-se então que:

$$q_\alpha^{(1)} = -\frac{2\rho e \tau}{\varepsilon} (\partial_\alpha e) \quad (\text{D.4})$$