

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

**Aplicação das Formas Discretas da Equação de  
Boltzmann à Termo-hidrodinâmica de Misturas**

Tese submetida à

Universidade Federal de Santa Catarina  
para obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica

CARLOS ENRIQUE PICO ORTIZ

Florianópolis, Agosto de 2007.

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

## Aplicação das Formas Discretas da Equação de Boltzmann à Termo-hidrodinâmica de Misturas

**CARLOS ENRIQUE PICO ORTIZ**

Esta tese foi julgada adequada para obtenção do título de

**DOUTOR EM ENGENHARIA**

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA

sendo aprovada em sua forma final.

---

Paulo Cesar Philippi, Dr. Ing. - Orientador

---

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

---

Fernando Cabral, Ph. D. - Coordenador do curso

**BANCA EXAMINADORA**

---

Paulo Cesar Philippi, Dr. Ing. - Presidente

---

Liliane Basso Barichello, Dr. Eng. - Relator

---

Aristeu da Silveira Neto, Dr.

---

Amir Antônio Martins Oliveira Jr., Ph. D.

---

Marcelo Krajnc Alves, Ph. D.

*A mis padres y hermanos*

# Agradecimentos

Aos Professores Paulo Cesar Philippi e Luís Orlando Emerich dos Santos pela orientação, confiança e amizade.

Aos membros da banca examinadora professores Liliane Basso Barichello, Aristeu da Silveira Neto, Amir Antônio Martins Oliveira Jr., Marcelo Krajnc Alves e Paulo Cesar Philippi pela participação e valiosas sugestões.

Aos colegas de trabalho e amigos Eduardo de Carli, Paulo César Facin, Luiz Adolfo Hegele, Diogo Siebert, Rodrigo Surmas, Fabiano Wolf, pelo apoio, colaboração e as interessantes discussões sobre os assuntos desta tese.

A todos os membros do Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas (LMPT) entre os que encontrei grandes amigos.

Aos funcionários e colegas do departamento de Engenharia Mecânica pelo estimulante ambiente de trabalho, pela amizade e colaboração.

A minha família pelo apoio nestes anos longe de casa.

À Angela Victoria pela sua amizade e solidariedade, permanentes e desinteressadas.

Ao apoio financeiro da Agência Nacional do Petróleo (ANP) e da Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP), através do Programa de Recursos Humanos da ANP para o setor de petróleo e gás natural (PRH09-ANP/MME/MCT).

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>vi</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xi</b>
<b>Resumo</b>	<b>xv</b>
<b>Abstract</b>	<b>xvi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos . . . . .	3
1.2 Organização . . . . .	4
<b>2 Método da equação de Boltzmann para gases em rede</b>	<b>6</b>
2.1 Autômatos de gás em rede . . . . .	6
2.2 Modelos para gases simples . . . . .	8
2.2.1 Condições de contorno . . . . .	11
2.3 Modelos termo-hidrodinâmicos . . . . .	12
2.4 Modelos para fluidos multicomponentes . . . . .	14
<b>3 Teoria cinética dos gases</b>	<b>22</b>
3.1 A equação de transporte de Boltzmann . . . . .	22
3.1.1 Propriedades do operador de colisão . . . . .	26
3.2 Equações macroscópicas ou hidrodinâmicas . . . . .	27
3.2.1 Equações macroscópicas para um gás ideal simples . . . . .	28
3.2.2 Equações macroscópicas para uma mistura de gases ideais . . . . .	30
3.3 Equilíbrio e o teorema $H$ . . . . .	33
3.4 Análise multiescala . . . . .	34
3.4.1 Método de Chapman - Enskog para um gás simples . . . . .	35
3.4.2 Método de Chapman - Enskog para uma mistura de gases . . . . .	38
3.5 Modelo de colisão BGK . . . . .	40
3.6 Modelos cinéticos para misturas . . . . .	42

<b>4</b>	<b>Equação de Boltzmann com velocidades discretas</b>	<b>47</b>
4.1	Expansão da equação de Boltzmann em polinômios de Hermite . . . . .	48
4.2	Discretização do espaço de velocidades moleculares . . . . .	51
4.2.1	Quadraturas em redes cartesianas regulares . . . . .	52
4.2.2	Quadraturas não-regulares . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Método LBGK para gases ideais simples</b>	<b>61</b>
5.1	Discretização espacial e temporal . . . . .	62
5.2	Equações hidrodinâmicas e análise de Chapman - Enskog . . . . .	63
5.2.1	Equações de Euler . . . . .	64
5.2.2	Equações de Navier - Stokes . . . . .	65
5.2.3	Erros em aproximações de baixa ordem . . . . .	68
5.3	Verificação e resultados numéricos . . . . .	70
5.3.1	Propagação de ondas de choque . . . . .	70
5.3.2	Difusão de quantidade de movimento . . . . .	74
5.3.3	Transferência de calor . . . . .	78
5.3.4	Discussão . . . . .	79
<b>6</b>	<b>Método LBGK para misturas binárias de gases ideais</b>	<b>83</b>
6.1	Equações hidrodinâmicas e análise de Chapman-Enskog para misturas binárias . . . . .	84
6.1.1	Equações de Euler . . . . .	86
6.1.2	Equações de Navier - Stokes . . . . .	88
6.2	Verificação e resultados numéricos . . . . .	91
6.2.1	Relaxação homogênea . . . . .	91
6.2.2	Indiferenciabilidade de espécies idênticas . . . . .	94
6.2.3	Difusão de massa . . . . .	96
6.2.4	Difusão de quantidade de movimento . . . . .	99
6.2.5	Transferência de calor . . . . .	100
6.2.6	Discussão . . . . .	101
<b>7</b>	<b>Solução da EBVD por diferenças finitas de alta ordem</b>	<b>105</b>
7.1	Discretização espacial e temporal . . . . .	106
7.2	Resultados numéricos e discussão . . . . .	108
<b>8</b>	<b>Conclusões</b>	<b>114</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>117</b>
	<b>Apêndice A</b>	<b>125</b>

# Lista de Figuras

2.1	Etapas de evolução na configuração de uma rede hexagonal num passo de tempo. (a) Estado inicial. (b) Configuração após a propagação. (c) Configuração após a colisão. . . . .	7
3.1	Detalhes de uma colisão binária. . . . .	25
4.1	Rede de segunda ordem $D2Q9$ . . . . .	54
4.2	Redes de terceira ordem $D2V17a$ e $D2V17b$ . . . . .	56
4.3	Rede de quarta ordem $D2V37$ . . . . .	57
4.4	Redes tridimensionais de terceira ordem (a) $D3V41$ e (b) $D3V39$ . . . . .	58
5.1	Diagrama de pressão na propagação de uma onda num tubo de choque após a ruptura da membrana que separa as regiões 1 e 4. . . . .	71
5.2	Resultados da simulação do tubo de choque, com relação inicial de densidades 4 : 1, temperatura inicial homogênea $\theta = 0.0$ e $\nu = 1.0$ , usando o modelo de quarta ordem $D2V37$ . . . . .	73
5.3	Velocidade do som vs. $\theta$ em simulações com modelos de terceira e quarta ordem. $D2V17a$ ( $\square$ ), $D2V37$ (*) e $D3V39$ ( $\triangle$ ). A linha contínua corresponde à expressão analítica. . . . .	73
5.4	Decaimento de um perfil sinusoidal de velocidade. $n = 1.0$ , $\theta = 0.0$ , $\nu = 0.5$ , $t = [0 - 4000]$ , rede $D2Q9$ com $L = 360$ . . . . .	75
5.5	Viscosidade cinemática vs. $\nu$ . $n = 1.0$ , $\theta = 0.0$ , $u_0 = 0.01$ . Modelos $D2Q9$ (+), $D2V17a$ ( $\square$ ) e $D2V37$ (*). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	75
5.6	Viscosidade cinemática vs. $\nu$ . $n = 1.0$ , $\theta = 0.0$ , $u_0 = 0.01$ . Modelos $D3Q19$ (+), $D3V39$ ( $\square$ ). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	76
5.7	Viscosidade cinemática vs. $\theta$ . $n = 1.0$ , $\nu = 1.0$ , $u_0 = 0.01$ . Modelos $D2Q9$ (+), $D2V17a$ ( $\square$ ) e $D2V37$ (*). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	76

5.8	Viscosidade cinemática vs. $\theta$ . $n = 1.0, \nu = 1.0, u_0 = 0.01$ . Modelos $D3Q19$ (+) e $D3V39$ ( $\square$ ). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	77
5.9	Viscosidade cinemática vs. $n$ . $\nu = 1.0, \theta = 1.0, u_0 = 0.01$ . Modelos $D2Q9$ (+), $D2V17a$ ( $\square$ ) e $D2V37$ (*). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	77
5.10	Viscosidade cinemática vs. $n$ . $\nu = 1.0, \theta = 1.0, u_0 = 0.01$ . Modelos $D3Q19$ (+), $D3V39$ ( $\square$ ). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	78
5.11	Evolução do perfil de temperatura. $n = 0.9, \nu = 1.5, \theta_\infty = 0.0$ e $\Delta\theta = 0.01$ . $t = [0, 100, 500, 1000]$ . Modelo $D2V37$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (5.61). . . . .	79
5.12	Difusividade térmica vs. $\nu$ . $n = 1.0, \theta_\infty = 0.25$ e $\Delta\theta = 0.01$ . Modelos $D2V17a$ ( $\circ$ ), $D2V37$ (*) e $D3V39$ ( $\square$ ). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	80
5.13	Difusividade térmica vs. $\theta_\infty$ . $n = 1.0, \nu = 1.0$ e $\Delta\theta = 0.01$ . Modelos $D2V17a$ ( $\circ$ ), $D2V37$ (*) e $D3V39$ ( $\square$ ). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	81
5.14	Difusividade térmica vs. $n$ . $\theta_\infty = 0.0, \nu = 1.0$ e $\Delta\theta = 0.01$ . Modelos $D2V17a$ ( $\circ$ ), $D2V37$ (*) e $D3V39$ ( $\square$ ). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas. . . . .	81
6.1	Relaxação homogênea de temperatura. $\nu_{aa} = 0.7, \nu_{bb} = 0.75, \nu_{ab} = 1.0, n_a = 0.6, n_b = 0.1, \theta_a = -0.3, \theta_b = 0.1, \mu_a/\mu_b = 0.7/0.3$ . Rede $D2V17b$ ( $\triangle$ ), Rede $D3V39$ ( $\nabla$ ). $\nu_{aa} = 0.5, \nu_{bb} = 0.8, \nu_{ab} = 0.20, n_a = 0.8, n_b = 0.2, \theta_a = -0.5, \theta_b = 0.5, \mu_a/\mu_b = 0.8/0.2$ . Rede $D2V17b$ (+), Rede $D3V39$ ( $\circ$ ). As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.60). . . . .	93
6.2	Relaxação homogênea de velocidade. $\nu_{aa} = 0.7, \nu_{bb} = 0.75, \nu_{ab} = 1.0, n_a = 0.5, n_b = 0.5, \theta_a = -0.1, \theta_b = -0.1, \mu_a/\mu_b = 0.7/0.3, u_{ax0} = 0.1, u_{ay0} = 0.01, u_{bx0} = -0.05, u_{by0} = 0.1$ , Rede $D2V17b$ . $\Delta u_x$ (+), $\Delta u_y$ ( $\bullet$ ). As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.57). . . . .	94
6.3	Velocidade da mistura vs. $t$ . $m_a = m_b = 0.5, n_a = n_b = 0.5, \nu_a = \nu_b = \nu_{ab} = 1.0, \theta = 0.0$ , rede $D2V53a$ . . . . .	95
6.4	Densidade da mistura vs. $t$ . $m_a = m_b = 0.5, n_a = n_b = 0.5, \nu_a = \nu_b = \nu_{ab} = 1.0, \theta = 0.0$ , rede $D2V53a$ . . . . .	96
6.5	Energia interna da mistura vs. $t$ . $m_a = m_b = 0.5, n_a = n_b = 0.5, \nu_a = \nu_b = \nu_{ab} = 1.0, \theta = 0.0$ , rede $D2V53a$ . . . . .	97

6.6	Difusão de massa em gases mecanicamente idênticos. $t = [0, 10, 50, 100, 200]$ , rede $D2V53a$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.63). . . . .	98
6.7	Decaimento de um perfil sinusoidal de concentração. $t = [180, 360, 540, 720, 900]$ , $\nu_{aa} = 1.0$ , $\nu_{bb} = 0.7$ , $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 1.9$ , $\theta_{aa} = \theta_{ab} = 0.0$ , $n_a = n_b = 0.25$ , $\omega_{a0} = 1.0$ , $u_x = 0.1$ , Rede $D2V53a$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.65). . . . .	99
6.8	Coefficiente de difusão binário vs. $\theta$ . $\nu_{aa} = 1.0$ , $\nu_{bb} = 0.7$ , $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 1.9$ , $n_a = n_b = 0.25$ , $\omega_{a0} = 1.0$ , $u_x = 0.1$ . Rede $D2Q9$ (+), Rede $D2V17a$ (○), Rede $D2V37$ (*), Rede $D2V53a$ (∇), Rede $D3Q19$ (△) e Rede $D3V39$ (□). As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.32). . . . .	100
6.9	Decaimento de um perfil sinusoidal de velocidade. $t = [0, 180, 360, 540, 720, 900]$ , $\nu_{aa} = 1.1$ , $\nu_{bb} = 0.7$ , $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 1.0$ , $\mu_a/\mu_b = 5$ , $n_a = 0.5$ , $n_b = 0.5$ , $\theta_a = -2/3$ , $\theta_b = 2/3$ , $u_{y0} = u_{x0} = 0.1$ , Rede $D3V39$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica. . . . .	101
6.10	Decaimento de um degrau de temperatura. $t = [0 - 1000]$ , $\nu_{aa} = 0.7$ , $\nu_{bb} = 0.5$ , $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 0.9$ , $\mu_a/\mu_b = 1.5$ , $n_a = 0.2$ , $n_b = 0.3$ , $\theta_a = -0.2$ , $\theta_b = 0.2$ , $\Delta\theta = 0.02$ , Rede $D2V37$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica. . . . .	102
6.11	Decaimento de um perfil sinusoidal de temperatura. $t = [0 - 3600]$ , $\nu_{aa} = 1.0$ , $\nu_{bb} = 0.7$ , $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 1.5$ , $\mu_a/\mu_b = 0.7/0.3$ , $n_a = 0.4$ , $n_b = 0.6$ , $\theta_a = \theta_b = 0.0$ , $u_{x0} = 0.05$ , Rede $D2V37$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica. . . . .	103
7.1	Resultados da simulação do tubo de choque, com relação inicial de densidades 10 : 1 após 1000 passos de tempo, temperatura inicial homogênea $\theta = 0.0$ , $\tau = 0.00008$ e $\Delta t = 0.0001$ , usando a rede de quarta ordem $D3V53a$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica das equações de Euler. . . . .	109
7.2	Evolução do perfil de velocidade horizontal num vórtice de Taylor. $t = [50 - 450]$ , $y = 16$ , $\Delta t = 0.1$ , $\Delta x = 1.0$ , $\nu = 1.0$ , $\theta = 0.0$ , $n = 1.0$ , $u_0 = 0.05$ , $K_1 = 4\pi/L_x$ , $K_2 = 2\pi/L_y$ , Rede $D2V7$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica. . . . .	110
7.3	Evolução do perfil de energia interna. $t = [0 - 2000]$ , $\Delta t = 0.1$ , $\Delta x = 1.0$ , $\nu = 2.0$ , $\Delta\varepsilon = 0.01$ , $n = 1.0$ , Rede $D2V20$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica. . . . .	111
7.4	Evolução do perfil de concentração. $t = [0 - 3600]$ , $\Delta t = 0.1$ , $\Delta x = 1.0$ , $\nu_{ab} = 2.0$ , $\Delta\omega_a = 1.0$ , $\theta_a = 0.1$ , $\theta_b = 0.1$ , $u_{x0} = 0.1$ , Rede $D3V13$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica. . . . .	112

---

7.5	Evolução do perfil de energia interna. $t = [0 - 3600]$ , $\Delta t = 0.1$ , $\Delta x = 1.0$ , $\nu_{aa} = 1.0$ , $\nu_{bb} = 1.5$ , $\nu_{ab} = 2.0$ , $\theta_a = -0.9$ , $\theta_b = 0.9$ , $\mu_a/\mu_b = 0.95/0.05$ , $u_{x0} = 0.1$ , Rede <i>D2V19</i> . As linhas contínuas correspondem à solução analítica. . . . .	112
-----	---	-----

# Lista de Tabelas

4.1	Passo e pesos da rede $D2Q9$ . . . . .	55
4.3	Passo e pesos da rede $D2V17a$ . . . . .	55
4.4	Passo e pesos da rede $D2V17b$ . . . . .	56
4.5	Passo e pesos da rede $D3V41$ . . . . .	58
4.6	Passo e pesos da rede $D3V39$ . . . . .	59
5.1	Comparação entre os resultados da simulação apresentada na Fig. (5.2) e a solução teórica ao problema do tubo de choque. . . . .	72

# Lista de Símbolos

## Alfabeto Latino

$\mathbf{a}^{(n)}$	Coefficiente do Tensor de Hermite de ordem ( $n$ )
$b$	Parâmetro de impacto, Cap. 3. Número de velocidades moleculares discretas $\mathbf{c}_i$ , Cap. 4
$\mathbf{c}$	Velocidade molecular
$\mathbf{c}_i$	Velocidade molecular discreta
$c_L$	Passo das redes cartesianas regulares
$c_p$	Calor específico a pressão constante
$c_s$	Velocidade do som
$C$	Número de Courant
$\mathbf{C}$	Velocidade peculiar
$\mathcal{C}_i$	Operador de colisão dos modelos de gás em rede
$d$	Diâmetro da esfera de colisão
$d_{a\alpha}$	Vetor força difusiva da espécie $a$
$D$	Dimensão do espaço euclidiano
$\mathcal{D}$	Coefficiente na equação de advecção-difusão
$\mathcal{D}_{ab}$	Coefficiente de difusão binário
$E$	Densidade de energia
$f$	Função distribuição de partículas
$f^{(M)}$	Função distribuição de Maxwell-Boltzmann

---

$f^a$	Função distribuição da espécie $a$
$f_i$	Função distribuição na equação de Boltzmann com velocidades discretas
$F_{a\alpha}$	Força de corpo por unidade de massa atuando nas partículas da espécie $a$
$\mathbf{g}$	Velocidade relativa numa colisão binária
$\mathbf{G}$	Velocidade do centro de massa numa colisão binária
$\mathcal{H}^{(n)}$	Polinômio tensorial de Hermite de ordem $(n)$
$j_{a\alpha}$	Fluxo mássico difusivo da espécie $a$
$J$	Operador de colisão
$k$	Constante de Boltzmann
$Kn$	Número de Knudsen
$l$	Livre percurso médio
$L$	Comprimento macroscópico característico
$m$	Massa molecular
$m_0$	Massa molecular de referência
$n$	Densidade de número de partículas
$n_i$	Número de ocupação na direção $i$ para os modelos de gás em rede
$N$	Ordem de truncamento da expansão da função distribuição em polinômios de Hermite
$N_i$	Número de ocupação na direção $i$ no LBM
$p$	Pressão termodinâmica
$Pr$	Número de Prandtl
$q_\alpha$	Vetor fluxo de calor
$Re$	Número de Reynolds
$\bar{t}$	Tempo macroscópico característico
$T$	Temperatura
$T_0$	Temperatura de referência

$\mathbf{u}$	Velocidade hidrodinâmica
$\mathbf{u}_a$	Velocidade hidrodinâmica da espécie $a$
$w_i$	Peso da abscissa $\mathbf{c}_i$ na integração por quadratura
$W_i$	Peso da função $f(x, \mathbf{c}_i, t)$ na equação de Boltzmann com velocidades discretas

## Alfabeto Grego

$\alpha$	Difusividade térmica
$\Gamma_a$	Número total de colisões da espécie $a$
$\varepsilon$	Energia interna
$\epsilon$	Ângulo azimutal numa colisão binária. Parâmetro da expansão de Chapman-Enskog
$\eta$	Viscosidade dinâmica
$\theta$	Desvio de energia interna
$\kappa$	Condutividade térmica
$\mu_a$	Massa reduzida das partículas da espécie $a$
$\nu$	Viscosidade cinemática, Cap. 2. Frequência de colisão por número de partículas, Cap. 3
$\nu_{ak}$	Frequência de colisão por número de partículas entre as espécies $a$ e $k$
$\Pi_{\alpha\beta}$	Tensor pressão
$\rho$	Densidade de massa
$\sigma_{ak}$	Seção diferencial de choque entre as espécies $a$ e $k$
$\sigma_{\alpha\beta}$	Tensor taxa de deformação
$\tau$	Tempo médio entre colisões
$\phi$	Propriedade macroscópica genérica
$\Phi$	Potencial intermolecular

---

$\chi$	Ângulo de espalhamento numa colisão binária
$\psi$	Propriedade molecular genérica
$\omega(\mathbf{c})$	Função peso
$\omega_a$	Concentração mássica da espécie $a$
$\Omega_i$	Operador de colisão LBM

## Abreviaturas e acrônimos

BGK	Bathnagar Gross Krook
$DdVb/DdQb$	Redes de $b$ velocidades em $d$ dimensões
EBVD	Equação de Boltzmann com Velocidades Discretas
LBE	<i>Lattice Boltzmann Equation</i>
LBM	<i>Lattice Boltzmann Method</i>
LGCA	<i>Lattice Gas Cellular Automata</i>
MRT	<i>Multiple Relaxation Time</i>

---

# Aplicação das formas discretas da Equação de Boltzmann à termohidrodinâmica de misturas

## Resumo

No presente trabalho é apresentado um procedimento de derivação formal e sistemática de um conjunto de equações diferenciais, no espaço  $(x, t)$ , a partir da equação de transporte de Boltzmann, no espaço  $(x, c, t)$ , cujas equações de transferência representam adequadamente a termohidrodinâmica de um fluido compressível. Para este propósito, a função distribuição de partículas foi expandida numa base do espaço de Hilbert, formada pelos polinômios tensoriais de Hermite, na velocidade molecular  $c$ , cuja função peso pode ser identificada como uma distribuição Maxwelliana global. A ordem de truncamento desta série é aquela requerida para obter as equações de Navier-Stokes-Fourier, através da análise assintótica de Chapman-Enskog. O espaço de velocidades foi discretizado de forma a garantir que os momentos da aproximação à função distribuição sejam representados exatamente através de uma fórmula de integração por quadratura. Soluções para o problema de quadratura em duas e três dimensões, para várias ordens de aproximação, são apresentadas e discutidas, principalmente a relação entre as soluções formadas por redes cartesianas regulares e o método da equação de Boltzmann para gases em rede (LBM). A solução temporal explícita do conjunto de equações diferenciais parciais resultante, nas funções  $f_i(x, t)$ , foi abordada pelo método das diferenças finitas. O método desenvolvido permite o tratamento consistente das equações hidrodinâmicas em misturas de gases com campos de temperatura não-homogêneos e cujos componentes possuem massas moleculares diferentes. O procedimento proposto foi verificado pela implementação de um modelo BGK para gases simples e misturas binárias, com um e três parâmetros de relaxação, respectivamente. Uma análise de Chapman-Enskog dos modelos implementados foi desenvolvida para obter as formas explícitas do fluxo mássico difusivo, o tensor pressão e o fluxo de calor, e os coeficientes de transporte: coeficiente de difusão binário, viscosidade dinâmica e condutividade térmica. Estes resultados foram comparados satisfatoriamente com soluções analíticas da equação de advecção-difusão com diversas condições iniciais.

**Palavras chave:** Método de Boltzmann para gases em rede, Equação de Boltzmann discreta, Teoria cinética de misturas.

---

# Application of the discrete forms of the Boltzmann Equation to the thermo-hydrodynamics of mixtures

## Abstract

In this work is shown a formal and systematic derivation procedure of a set of differential equations, in space  $(x, t)$ , from the Boltzmann transport equation, in space  $(x, c, t)$ , which transfer equations represent properly the thermohydrodynamics of a compressible fluid. For this purpose, the particle distribution function was expanded in a base of the Hilbert space of functions, spanned by the Hermite polynomial tensors of the molecular velocity  $c$ , which weight function can be identified as a global Maxwellian distribution function. The truncation order of this series is the one required to obtain the Navier-Stokes-Fourier equations, through the asymptotic Chapman-Enskog analysis. The velocity space was discretized in order to guarantee that the moments of the approximation to the distribution function can be accurately represented by a quadrature formula. Solutions to the quadrature problem in two and three dimensions, for several approximation orders, were shown and discussed, mainly the relation between the regular cartesian solutions and the Lattice Boltzmann Method (LBM). The solution of the resulting set of partial differential equations of  $f_i(x, t)$  was accomplished by explicit finite difference method. The method allows for a consistent treatment of the hydrodynamics equations of mixtures of gases with non-homogeneous temperature fields and with different molecular mass components. The procedure was verified by the implementation of a BGK model for simple gases and binary mixtures of gases, with one and three relaxation parameters, respectively. A Chapman-Enskog analysis of the implemented models was developed to obtain the explicit forms of the diffusive mass flux, the pressure tensor and the heat flux, and the transport coefficients: binary diffusion coefficient, viscosity and thermal conductivity. These results were compared satisfactorily against analytical solutions of the advection-diffusion equation with several initial conditions.

**Keywords:** Lattice Boltzmann Method, Discrete Boltzmann Equation, Kinetic theory of mixtures.

# Capítulo 1

## Introdução

O estudo do escoamento de fluidos é uma área que atrai grande interesse do ponto de vista científico sendo ainda de considerável importância tecnológica. Na maioria dos fenômenos naturais a complexidade das equações diferenciais que descrevem o escoamento dificulta sua compreensão, mesmo após diversas simplificações. Por outro lado, a abordagem experimental nem sempre é factível devido ao grande número de parâmetros a serem controlados, à dificuldade na medição das variáveis envolvidas e a impossibilidade de reproduzir em laboratório as situações de interesse, seja pela extensão na escala geométrica, como no estudo dos fenômenos atmosféricos, ou pelas condições extremas, como no estudo de fenômenos a altas velocidades.

Um exemplo de fenômeno com alta complexidade física e geométrica é o escoamento em meios porosos, cujo tratamento complica-se ainda mais quando mais de uma fase fluida e/ou componente se encontram presentes, como no caso do escoamento de misturas ou de fluidos imiscíveis, de interesse no controle da dispersão de poluentes e na indústria do petróleo e gás.

Paralelamente às abordagens puramente analíticas e experimentais, a simulação numérica é considerada como um procedimento que proporciona informações muito úteis na construção de uma teoria sólida do escoamento de fluidos em geometrias complexas. Atualmente, quando a tecnologia de computadores permite o processamento rápido de um grande volume de dados, é possível simular, com um mínimo de simplificações físicas e geométricas, e com grande liberdade na escolha dos parâmetros, situações difíceis de serem obtidas e reproduzidas no laboratório.

O método da equação de Boltzmann para gases em rede (LBM), considerado como uma aproximação mesoscópica à mecânica dos fluidos, é uma alternativa às técnicas tradicionais de simulação baseadas na discretização e solução das equações na escala do contínuo<sup>1</sup> (equações de Navier-Stokes-Fourier) ou na solução das equações do movimento simplificadas, para todas as moléculas que constituem o fluido<sup>2</sup>.

---

<sup>1</sup> *Computational Fluid Dynamics* (CFD), Tannehill et al. [1997]

<sup>2</sup> *Molecular Dynamics* (MD), Rapaport [1995]

Diferentemente dos métodos de solução das equações de Navier-Stokes, os métodos baseados na teoria cinética dos gases descrevem o comportamento de um fluido no nível mesoscópico, ou seja, pela evolução da função distribuição de partículas. Esta função determina o número esperado de partículas de fluido presentes numa determinada posição e instante de tempo, com uma dada velocidade molecular. A equação que rege a evolução da função distribuição num gás rarefeito é a equação de Boltzmann que, uma vez resolvida, fornece uma descrição macroscópica do comportamento do gás através dos seus momentos no espaço de velocidades moleculares.

Dependendo da relação entre a escala espacial macroscópica característica de um escoamento  $L$ , estimada localmente em função da propriedade macroscópica genérica  $\phi$ , como

$$L = \frac{|\phi|}{|\nabla\phi|}, \quad (1.1)$$

e o livre percurso médio das partículas  $l$ , ou seja, a distância percorrida por uma molécula entre duas colisões sucessivas, identificam-se vários regimes, caracterizados pelo número de Knudsen, definido como

$$Kn \equiv l/L. \quad (1.2)$$

A equação de Boltzmann é válida na totalidade de números de Knudsen, enquanto as equações de Euler e de Navier-Stokes, derivadas dela através da expansão de Chapman-Enskog, são válidas apenas numa faixa de baixos números de Knudsen [Hirschfelder et al., 1964]. Os escoamentos compreendidos nesta faixa, limitada aproximadamente pelos valores  $Kn < 0.1$ , pertencem ao regime hidrodinâmico. Os escoamentos com número de Knudsen intermediário, nos quais o livre percurso médio é de ordem de grandeza comparável ao comprimento macroscópico característico, pertencem ao regime de transição e os escoamentos a número de Knudsen elevado pertencem ao chamado regime molecular livre. Os métodos apresentados neste trabalho tratam exclusivamente da aplicação da Equação de Boltzmann à solução de problemas dentro do regime hidrodinâmico, ou seja, aquele descrito pelas equações de Navier-Stokes-Fourier.

Comparado com os métodos tradicionais de simulação, o LBM oferece algumas vantagens como: eliminação da solução da equação de Poisson na simulação de escoamentos quase-incompressíveis e facilidade de implementação, particularmente em plataformas paralelas, mesmo quando aplicado a problemas envolvendo geometrias complexas. Também oferece a possibilidade de incorporação direta de modelos para interações na escala mesoscópica (dificilmente acessíveis aos métodos baseados na hipótese do contínuo), que permitem a simulação de escoamentos complexos como misturas, escoamentos bifásicos e de fluidos imiscíveis [Rothman e Zaleski, 1997, Chen e Doolen, 1998, Chopard e Droz, 1998, Succi, 2001].

Devido a estas características especiais, o método foi aplicado com sucesso em proble-

mas como escoamento monofásico e bifásico em meios porosos, determinação da permeabilidade intrínseca e relativa de meios porosos [Gunstensen e Rothman, 1993, van Genabeek e Rothman, 1996, Martys et al., 1999, Pan et al., 2004, Pico et al., 2005, dos Santos et al., 2005a] e problemas envolvendo molhamento de superfícies e fenômenos capilares [Hazlett et al., 1998, dos Santos et al., 2005b]. Contudo, o método falha na tentativa de prever o comportamento de um fluido quando os aspectos térmicos são relevantes. Esta deficiência se deve à instabilidade numérica e a algumas inconsistências no seu procedimento de derivação a partir da teoria cinética. Por esta razão, atualmente suas aplicações se centram na simulação de diversos escoamentos complexos, no limite quase isotérmico e quase incompreensível.

Recentemente, uma ligação formal e sistemática entre o método de Boltzmann para gases em rede e a teoria cinética foi desenvolvida [Philippi et al., 2006]. Esta relação se baseia na aproximação da função distribuição por uma série infinita em polinômios tensoriais de Hermite. A aproximação por polinômios de Hermite permite a representação dos momentos macroscópicos da função distribuição com uma precisão arbitrária, dada pela ordem de truncamento dos termos da série.

A descrição hidrodinâmica (equações de Navier-Stokes-Fourier) precisa da representação exata dos primeiros momentos da função distribuição. Especificamente, no caso do operador de colisão BGK é necessário calcular o momento de quarta ordem da função distribuição de ordem zero numa expansão assintótica em potências do número de Knudsen para, através da análise multiescala de Chapman-Enskog, expressar os fluxos não-convectivos de quantidade de movimento e energia como função das derivadas espaciais dos momentos dos chamados invariantes de colisão: densidade, velocidade hidrodinâmica e energia. A satisfação desta condição estabelece um critério para a discretização do espaço de velocidades, de forma que as integrais que definem tais momentos sejam resolvidas exatamente por um método de quadratura. Este procedimento se aplica igualmente a misturas de gases, com a vantagem de fornecer apenas um conjunto de abscissas como solução ao problema de quadratura, independente da temperatura e da relação de massas moleculares dos constituintes [Pico et al., 2007].

O método de discretização proposto está baseado nestas aproximações e permite contornar as inconsistências presentes nos modelos anteriores, cujo procedimento heurístico de derivação não leva em conta todas as condições necessárias para a total equivalência com a teoria cinética e que, conseqüentemente, tem a sua faixa de aplicação consideravelmente limitada.

## 1.1 Objetivos

O principal foco deste trabalho é estabelecer um vínculo formal entre a teoria cinética dos gases e o sistema de equações diferenciais conhecido como equação de Boltzmann com

velocidades discretas ou equação de Boltzmann discreta.

Com base nesta equação é derivado o método de solução das grandezas hidrodinâmicas, conhecido como método de Boltzmann para gases em rede (LBM), com total consistência no caso de fenômenos envolvendo gradientes elevados de temperatura e densidade.

O segundo dos objetivos é a adaptação dos procedimentos desenvolvidos para a simulação de misturas de gases ideais com massas moleculares diferentes, envolvendo simultaneamente o transporte difusivo de massa, quantidade de movimento e energia. O modelo utilizado para descrever a interação entre moléculas é do tipo BGK, com os parâmetros que reproduzem a transferência de quantidade de movimento e energia entre moléculas com potencial de interação inversamente proporcional à quinta potência da separação entre partículas, conhecidas como moléculas de Maxwell.

O trabalho também orienta-se no sentido de desenvolver um esquema alternativo de discretização com o intuito de eliminar os problemas mais severos do LBM. Estes problemas são: a instabilidade numérica, que aparece como consequência do acoplamento entre a discretização espacial e temporal, e o elevado número de velocidades moleculares necessárias para representar a equação de balanço da energia.

## 1.2 Organização

O trabalho está organizado em 8 capítulos. No capítulo 2 é apresentada uma revisão dos métodos relacionados com a solução numérica da equação de transporte de Boltzmann usando velocidades moleculares discretas. As principais vantagens e limitações dos métodos existentes são apresentadas e discutidas, em particular as que tratam do estudo de escoamentos compressíveis e de fluidos multicomponentes.

No capítulo 3 é apresentado um resumo dos conceitos mais importantes da teoria cinética dos gases, utilizados nos desenvolvimentos posteriores, principalmente o método de análise multiescala de Chapman-Enskog, e uma revisão dos modelos cinéticos para gases simples e misturas binárias.

A aproximação da equação de transporte de Boltzmann por uma projeção no subespaço de Hilbert, gerado pelos polinômios tensoriais de Hermite, e a discretização deste espaço pela solução a um problema de integração por quadratura são discutidos no capítulo 4.

O capítulo 5 resume o desenvolvimento de modelos de Boltzmann para gases em rede baseado na discretização formal da equação de Boltzmann com modelo de colisão BGK, a análise multiescala de Chapman-Enskog e a verificação das equações hidrodinâmicas e os coeficientes de transporte para um gás simples.

A extensão a uma mistura binária de gases ideais usando o modelo de colisão BGK para moléculas de Maxwell é abordada no capítulo 5.

Uma discretização alternativa de equação de Boltzmann com velocidades discretas, baseada no método das diferenças finitas é apresentada e discutida no capítulo 7.

O capítulo 8 apresenta as conclusões e enumera alguns dos possíveis aspectos a serem desenvolvidos futuramente.

Por último, um conjunto das soluções ao problema de quadratura, em duas e três dimensões, e para várias ordens de precisão, é apresentado como apêndice.

# Capítulo 2

## Método da equação de Boltzmann para gases em rede

Este capítulo apresenta uma revisão do método de Boltzmann para gases em rede, sua evolução e as principais variantes utilizadas da simulação de escoamentos complexos. Os modelos de Boltzmann para gases em rede foram desenvolvidos a partir dos autômatos celulares de gás em rede na década de 90 e desde então tem sido aplicados a uma grande variedade de problemas. A revisão se limita a aqueles modelos destinados à simulação de escoamentos onde os efeitos térmicos são relevantes e à simulação de fluidos com vários componentes, sendo que, em alguns deles, cada componente é considerado como um fluido não-ideal, no intuito de simular fluidos imiscíveis. Outros modelos multicomponentes citados aqui se baseiam em modelos cinéticos de misturas ideais. Embora tenham origem na teoria cinética, sua implementação não é completamente consistente, por vários motivos que serão discutidos na seção 2.4.

### 2.1 Autômatos de gás em rede

Embora o método da equação de Boltzmann para gases em rede seja independente dos autômatos celulares de gás em rede, eles estão ligados historicamente e possuem algumas características em comum. Os modelos de gás em rede (LGCA), um tipo de autômatos celulares, propostos por Frisch et al. [1987] e Wolfram [1986], são considerados os predecessores dos métodos de Boltzmann para gases em rede. Tais modelos se valem do fato de que a dinâmica macroscópica de um sistema de partículas não é sensível aos detalhes da dinâmica microscópica, desde que determinadas grandezas e simetrias sejam conservadas. O modelo LGCA é uma analogia entre a dinâmica de um fluido real e a dinâmica de um sistema fictício de partículas, contidas em pontos de uma rede (sítios), para o qual o tempo e a velocidade são discretos. Desta forma, as partículas podem se movimentar, em passos de tempo discretos, com velocidades cujas orientações restringem

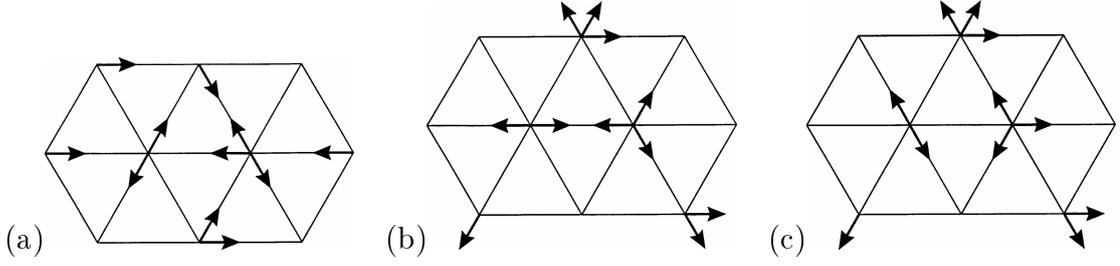


Figura 2.1: Etapas de evolução na configuração de uma rede hexagonal num passo de tempo. (a) Estado inicial. (b) Configuração após a propagação. (c) Configuração após a colisão.

o movimento aos canais que ligam um sítio aos seus vizinhos. Nos sítios, um operador de colisão relaciona, de forma relativamente simples, o estado pré-colisional com os possíveis estados pós-colisionais, que possuem a mesma massa, quantidade de movimento e, em alguns modelos, energia. Por simplicidade o número máximo de partículas presentes numa determinada direção ou canal está restrito, comumente a uma partícula, assim, o estado do sítio pode ser descrito usando-se variáveis booleanas.

O estado de um sítio, na posição  $\mathbf{x}$ , na direção da velocidade  $\mathbf{c}_i$ , é descrito pelo número de ocupação  $n_i \in \{0, 1\}$ . Durante a etapa de colisão o estado do sítio é modificado por um operador  $\mathcal{C}_i(\{n_j\}) \in \{-1, 0, 1\}$  e, posteriormente, o valor do número de ocupação resultante é transferido aos sítios vizinhos. A dinâmica do LGCA se resume ao esquema conhecido como colisão-propagação, representado na Fig. (2.1), e descrito pela equação

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t) + \mathcal{C}_i(\{n_j\}), \quad (i, j = 1, 2, \dots, b), \quad (2.1)$$

onde  $\{n_j\}$  representa o conjunto de números de ocupação em todas as direções e  $b$  indica o número total de velocidades  $\mathbf{c}_i$ .

As grandezas macroscópicas, densidade de massa e de quantidade de movimento, são obtidas como momentos do número de ocupação da seguinte forma

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i^b n_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.2)$$

$$\rho \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_i^b n_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{c}_i. \quad (2.3)$$

Embora seja possível obter uma representação aproximada da energia interna, os modelos LGCA convencionais não possuem o número suficiente de velocidades ou suas regras de colisão não conservam a energia, pelo que são chamados de modelos atérmicos. Além da conservação das grandezas elementares, as redes ou vetores  $\mathbf{c}_i$  devem ser escolhidas de forma a garantir a isotropia do tensor tensão nas equações hidrodinâmicas do modelo.

As equações da continuidade e de Navier-Stokes são derivadas da média de *ensemble* da

equação (2.1) mediante a expansão de Chapman-Enskog, com coeficientes de transporte que dependem dos parâmetros de cada rede. Esta análise é efetuada sobre a média de *ensemble* das equações dos autômatos celulares, conhecida como equação de Boltzmann para gases em rede (LBE). Através de uma análise estatística é possível mostrar que os modelos de gás em rede possuem um teorema  $H$ , i.e., existe uma função, para cada configuração da rede, que nunca cresce com o tempo e cujo valor mínimo é atingido quando o valor médio da configuração de cada sítio é descrito pela distribuição de equilíbrio de Fermi-Dirac.

Apesar das vantagens citadas anteriormente, a dinâmica dos modelos de gás em rede não é completamente equivalente à de um fluido, o que, somado a outros inconvenientes, limita sua aplicação à simulação de escoamentos incompressíveis a baixos números de Reynolds. Algumas características dos LGCAs, não próprias da dinâmica de um fluido, são: carência de invariância galileana, dependência anômala entre a pressão e a velocidade na equação de estado e conservação de grandezas não-físicas (invariantes espúrios). Além destas deficiências, os modelos também apresentam viscosidade elevada e ruído estatístico. Para obter valores significativos das grandezas macroscópicas, a partir dos resultados de uma simulação, é preciso fazer médias temporais ou espaciais, com elevadas demandas de espaço em memória e tempo de computação. Uma revisão mais extensa destes fatores pode ser encontrada em Succi [2001].

## 2.2 Modelos para gases simples

Os primeiros Modelos de Boltzmann para gases em rede surgiram como uma tentativa de resolver o principal defeito dos autômatos celulares; o ruído estatístico. McNamara e Zanetti [1988] propuseram substituir os números de ocupação booleanos pelas médias de *ensemble* correspondentes, assim, a dinâmica do sistema passa a ser descrita pela equação de Boltzmann para gases em rede

$$N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = N_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i, \quad (i = 1, 2, \dots, b), \quad (2.4)$$

onde  $N_i = \langle n_i \rangle$  e  $\Omega_i = \langle \mathcal{C}_i \rangle$  são as médias de *ensemble* do número de ocupação e do operador de colisão, respectivamente. Embora simples, o procedimento elimina o ruído, ao custo da representação exata dos estados, mantendo algumas das características importantes dos LGCAs, como foi demonstrado nas simulações realizadas pelos autores para obter os coeficientes de transporte em redes hexagonais. O método de McNamara e Zanetti herda características dos modelos de gás em rede como a carência de invariância galileana, equação de estado incorreta, viscosidade elevada e a complexidade do operador de colisão. Este último ponto, em particular, transforma o modelo num método pouco viável para a solução de escoamentos em três dimensões, onde o operador de colisão já não

pode ser implementado usando tabelas de colisão ou álgebra booleana, e sim funções de potências de números reais. A contribuição mais importante do trabalho de McNamara e Zanetti foi descobrir o uso da equação de Boltzmann para gases em rede (LBE) como ferramenta de simulação e não exclusivamente de análise teórica.

O seguinte modelo na evolução do método de Boltzmann para gases em rede foi proposto por Higuera e Jimenez [1989]. Estes autores expandiram o operador de colisão em torno do equilíbrio global, com velocidade hidrodinâmica nula, o que leva à equação de Boltzmann com operador de colisão quase linear

$$N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = N_i(\mathbf{x}, t) + A_{ij} (N_j - N_j^{eq}), \quad (2.5)$$

onde

$$A_{ij} = \left( \frac{\partial \Omega_i}{\partial N_j} \right)_{N_j^{eq}}. \quad (2.6)$$

Este operador corresponde à ação de uma matriz de espalhamento, derivada diretamente do operador de colisão LGCA, sobre o desvio local da função distribuição de equilíbrio. O modelo reduz o número de operações de ponto flutuante por passo de tempo e permite o uso da equação de Boltzmann para gases em rede, de forma competitiva, na simulação de escoamentos em duas e três dimensões [Higuera e Succi, 1989, Foti e Succi, 1989]. Embora os problemas de ruído e complexidade tenham sido removidos, os obstáculos restantes só foram contornados após se abandonar a microdinâmica booleana, com colisões múltiplas, como ponto de partida na construção do modelo de colisão.

Tendo em vista que a análise multi-escala da equação de Boltzmann com operador de colisão quase-linear leva à equação de Navier-Stokes, sempre que determinadas restrições sejam obedecidas, Higuera et al. [1989] propuseram utilizar esta equação como um método independente da dinâmica dos modelos de gás em rede e substituir os valores da matriz de espalhamento por parâmetros livres, que garantam uma evolução macroscópica apropriada. Os elementos da matriz de espalhamento estão restritos pelas equações da conservação da massa, quantidade de movimento, isotropia do tensor tensão, equação de estado e invariância galileana. A vantagem desta aproximação é a diminuição da viscosidade, que é proporcional a um dos autovalores da matriz de espalhamento. No artigo original a função distribuição de equilíbrio empregada é a mesma dos modelos anteriores, embora possa ser escrita como um polinômio na velocidade hidrodinâmica, com a mesma forma que a distribuição de equilíbrio dos gases em rede,

$$N_i^{eq} = \rho (A_i + B_i u_\alpha c_{i\alpha} + C_i u_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} + E_i u^2), \quad (2.7)$$

e seus coeficientes determinados a posteriori, de forma a eliminar a carência de invariância galileana e as anomalias na equação de estado. As novas formas do operador de colisão e da função distribuição de equilíbrio desvinculam a LBE da equação obtida na análise dos

autômatos de gás em rede e, portanto, seu teorema  $H$  não é mais aplicável.

A equação de Boltzmann para gases em rede, com operador de colisão quase-linear, pode ser vista como um método de relaxação com múltiplos parâmetros, enquanto só um deles controla a viscosidade. Esta característica foi notada por vários autores [Qian et al., 1992, Chen et al., 1992] que propuseram utilizar a forma mais simples da matriz de espalhamento e relaxar as distribuições através de um único parâmetro;

$$A_{ij} \equiv -\frac{1}{\tau} \delta_{ij}. \quad (2.8)$$

Esta forma de relaxação é análoga à conhecida na teoria cinética dos gases como modelo de Bathnagar, Gross e Krook (BGK). Neste ponto, o método de Boltzmann adquire uma forma simples e econômica em termos de implementação, podendo resolver os inconvenientes citados, ao custo da representação exata dos estados e da existência de um teorema  $H$ . Qian et al. [1992] introduziram uma nomenclatura para as redes, da forma  $DdQb$ , na qual a dimensão espacial é representada por  $d$  e o número de vetores  $\mathbf{c}_i$  por  $b$ , e apresentaram os valores da função distribuição de equilíbrio, Eq. (2.7), como uma função genérica que depende da rede utilizada através de pesos estabelecidos para cada direção.

O modelo com o operador de colisão BGK é atualmente o mais utilizado embora possua limitações devido a que um único parâmetro determina a taxa de transferência de massa, quantidade de movimento e, em alguns modelos, energia. Por outro lado, uma versão da LBE, conhecida como equação de Boltzmann generalizada, foi proposta por d'Humières [1992]. Nesta formulação é aplicada uma transformação que projeta a função  $N_i$  no espaço gerado pelos seus momentos. Neste espaço, o operador de colisão relaxa os momentos da função distribuição com frequências diferentes, o que permite escolher os coeficientes de transporte de forma independente, por esta razão é conhecido como modelo com múltiplos tempos de relaxação (MRT). O uso de múltiplos tempos de relaxação confere ao método maior estabilidade numérica, devido à separação dos modos hidrodinâmicos, e a mesma precisão do modelo LBGK com um incremento no custo computacional relativamente baixo [Lallemand e Luo, 2000].

Embora o método LBGK tenha evoluído dos modelos de gás em rede, como foi visto até aqui, é possível derivá-lo completamente a partir da equação de transporte de Boltzmann com modelo de colisão BGK

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f = \frac{f^{(M)} - f}{\tau}, \quad (2.9)$$

como foi proposto por He e Luo [1997a] e Abe [1997]. Considerando baixos números de Mach é possível representar a distribuição de Maxwell-Boltzmann  $f^{(M)}$  em potências da velocidade hidrodinâmica, até segunda ordem, na forma

$$f^{(M)} \approx n \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{D/2} \exp \left( -\frac{m}{2kT} \mathbf{c}^2 \right) \left( 1 + \frac{m}{kT} (\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}) + \frac{m^2}{2(kT)^2} (\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{m}{2kT} u^2 \right). \quad (2.10)$$

A equação de Boltzmann, discretizada usando um método de primeira ordem, que resulta na forma da LBE, e avaliada num conjunto de velocidades moleculares  $\mathbf{c}_i$ , satisfaz as equações macroscópicas para escoamento incompressível

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (2.12)$$

com a pressão  $p \propto \rho$  e a viscosidade cinemática  $\nu \propto (\tau - 1/2)$ , se as soluções das distribuições  $f_i = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i, t)$  obedecem as equações

$$\sum_i^b w_i f_i^{(M)} c_{i\alpha} \cdots c_{i\lambda} = \int_{-\infty}^{\infty} f^{(M)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) c_\alpha \cdots c_\lambda d\mathbf{c}, \quad (2.13)$$

para momentos de  $c_\alpha \cdots c_\lambda$  até quinta ordem.

Para obter os valores dos pesos, He e Luo [1997a] empregaram uma quadratura de Gauss-Hermite, cujas soluções coincidem com as redes apresentadas por Qian et al. [1992].

O método de discretização apresentado por He e Luo [1997a] e Abe [1997] estabelece um vínculo formal, e independente, entre o LBM e a teoria cinética dos gases. Embora esta formulação não seja completamente consistente, por assumir que a temperatura permanece constante em todos os casos, esta derivação elimina parte do caráter heurístico atribuído à equação de Boltzmann para gases em rede.

### 2.2.1 Condições de contorno

Em geral, os modelos LGCA e LBM atraem muita atenção devido à aparente facilidade com que as condições de contorno são implementadas mesmo em geometrias tão complexas como os meios porosos.

Vários tipos de condições de contorno têm sido propostos (Chen e Doolen, 1998), a mais comum e simples delas é a condição de reflexão a  $180^\circ$  (ou *bounce-back*). As distribuições que *entram* a um sítio localizado na fronteira com o sólido são as mesmas que *saem* no passo de tempo seguinte. A massa e a quantidade de movimento são mantidas e a velocidade média normal no sítio é zero, já que cada fração de partículas entrando no sítio, com uma determinada velocidade, sai dele na direção oposta. Esta condição gera uma velocidade de escorregamento e é de primeira ordem em termos de precisão numérica, enquanto que o método tem precisão de segunda ordem (Ziegler, 1993 e He et al., 1997).

Para corrigir a precisão foram propostos os métodos de reflexão modificado (He et al., 1997) e de reflexão na metade da distância entre sítios (*halfway bounce-back*, Cornubert et al., 1991). No primeiro deles as distribuições desconhecidas, vindas do interior do sólido, são iguais às suas opostas, vindas do fluido, e uma colisão do mesmo tipo que nos sítios com fluido é aplicada na fronteira. A segunda alternativa pode ser implementada facilmente invertendo o sentido da velocidade durante a propagação para as distribuições que apontam para a fronteira sólida. Assim, pode-se considerar que a colisão com o sólido acontece na metade da separação entre sítios, no instante  $t + 1/2$ . Embora esteja provado que esta condição restaura a segunda ordem de precisão do método em geometrias simples e alinhadas com as direções da rede, sua precisão em configurações arbitrárias é desconhecida.

Na literatura existem outras estratégias para lidar com fronteiras sólidas, como a de Skordos [1993], que propôs incluir gradientes da velocidade macroscópica na distribuição de equilíbrio nas fronteiras, a de Chen et al. [1996], que propôs usar esquemas simples de extrapolação dos campos no interior do fluido e, a de Maier et al. [1996], que sugeriu modificar a reflexão de partículas para anular a quantidade de movimento líquida tangente à parede e preservar a normal. Todos estes algoritmos buscam obter os valores desconhecidos das distribuições, nas direções que apontam para fora da superfície sólida, para fronteiras que não cortam as ligações entre sítios. Porém, a relativa complexidade dos métodos para obtê-las, em comparação com a condição de reflexão, diminui a eficiência do método em configurações nas quais a relação entre sítios em contato com a fronteira sólida e os sítios interiores é elevada.

Em escoamentos com fronteiras mais complexas (curvas e desalinhadas com as direções da rede) é preciso empregar aproximações, como a representação das fronteiras por séries de degraus, com a conseqüente perda de precisão ou, usar métodos de interpolação (Chen et al., 1996, Filippova e Haenel, 1998 e Mei et al., 1999).

Todos os modelos de condição de contorno hidrodinâmica mencionados estão restritos às redes que comunicam um sítio apenas com seus primeiros vizinhos e, em geral, são difíceis de formular e implementar em redes com múltiplas velocidades.

## 2.3 Modelos termo-hidrodinâmicos

Existem dois tipos principais de modelos para a simulação de escoamentos com efeitos térmicos. O primeiro deles explora apenas marginalmente a relação da LBE com a teoria cinética dos gases e trata de representar os efeitos da temperatura pelo transporte de um escalar passivo, pela evolução de uma distribuição com efeitos análogos aos da energia interna [He et al., 1998], ou pelo uso de técnicas híbridas, nas quais as equações da continuidade e de balanço da quantidade de movimento são resolvidas pelo método de Boltzmann para gases em rede, e a equação de balanço da energia por um método numérico

diferente [Lallemand e Luo, 2003].

No segundo tipo de modelos térmicos, a energia interna é representada como um momento de alta ordem da função distribuição. Para este propósito é necessário incluir termos de ordem superior na velocidade molecular dentro da função distribuição de equilíbrio. Alguns dos modelos mais importantes baseiam-se na equação LBGK, como é o caso do modelo proposto por Alexander et al. [1993]. Estes autores utilizaram uma rede bidimensional, composta pela sobreposição de duas redes hexagonais, para incorporar os efeitos térmicos e conseguir representar a energia interna como um momento de segunda ordem da forma

$$\rho\varepsilon = \sum_i^b \frac{1}{2} N_i |\mathbf{c}_i - \mathbf{u}|^2. \quad (2.14)$$

A equação de Boltzmann empregada satisfaz a conservação da energia e incorpora termos de terceira ordem na velocidade  $\mathbf{c}_i$  dentro da função distribuição de equilíbrio. A análise multiescala indica que o modelo reproduz as equações de Navier-Stokes para escoamentos compressíveis, como foi verificado pela simulação dos escoamentos de Poiseuille e de Couette com paredes a diferentes temperaturas. O modelo apresenta duas limitações importantes; por causa do operador de colisão utilizado, o número de Prandtl é fixo e, apresenta instabilidades numéricas quando as diferenças de temperatura se encontram fora de uma pequena faixa de valores. Chen et al. [1994] estenderam o modelo pela adição de velocidades moleculares, mas mantendo a derivação heurística da distribuição de equilíbrio, através do ajuste dos coeficientes, de acordo com o requerido pela análise de Chapman-Enskog. O truncamento da expansão da função distribuição de equilíbrio em potências mais elevadas da velocidade macroscópica permitiu a eliminação de erros de terceira ordem nas equações de balanço da quantidade de movimento e da energia, presentes nos modelos anteriores. Modelos similares, no âmbito da solução da equação de Boltzmann discreta por diferenças finitas, foram propostos por Watari e Tsutahara [2006], com distribuições de equilíbrio com formas escolhidas heurísticamente e ajustadas a posteriori, de acordo com os resultados da análise multiescala.

Uma abordagem similar, com o operador de colisão linearizado, e a determinação das condições necessárias para a representação da termo-hidrodinâmica pelos modelos da equação de Boltzmann para gases em rede foram apresentados por McNamara e Alder [1993]. As soluções aproximadas obtidas por estes autores apresentam fortes problemas de estabilidade.

Mais recentemente, Shan et al. [2006] e Philippi et al. [2006] propuseram um método formal de obtenção de uma aproximação da função distribuição de equilíbrio pela expansão da função distribuição em polinômios de Hermite. A partir deste ponto o LBM adquire consistência total com a teoria cinética dos gases. O formalismo apresentado por estes autores será discutido em detalhe no capítulo 4, e utilizado em todos os desenvolvimentos deste trabalho.

## 2.4 Modelos para fluidos multicomponentes

Existem vários modelos LBE para a simulação de fluidos multicomponentes, que podem ser classificados em dois grupos principais: modelos para gases com comportamento de fluido não-ideal, mesmo na ausência de outro componente, baseados em forças de interação ou na energia livre, e modelos para fluidos que se comportam como gases ideais quando se encontram puros, inspirados na teoria cinética. São apresentados aqui apenas os trabalhos mais relevantes em cada caso em ordem cronológica aproximada.

O primeiro dos modelos para escoamento de fluidos multicomponentes, proposto por Gunstensen et al. [1991], está baseado no modelo de Rothman e Keller [1988], desenvolvido no âmbito dos autômatos de gás em rede. Posteriormente Holme e Rothman [1992] aplicaram um operador de colisão similar para diminuir o valor do coeficiente de difusão de uma mistura binária.

Para representar a configuração de um sítio é preciso distinguir o tipo de fluido e por isto são usadas duas distribuições para partículas ditas azuis e vermelhas. Os dois fluidos, com cores diferentes ( $k = b$  azul ou  $k = r$  vermelho), seguem a equação de Boltzmann para gases em rede

$$N_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = N_i^k(\mathbf{x}, t) - \Omega_i^k(\mathbf{x}, t), \quad (2.15)$$

onde  $N_i^k(\mathbf{x}, t)$  é a distribuição do fluido  $k$  na direção  $i$ . A densidade local do fluido  $k$  é calculada usando  $\rho_k = \sum_i N_i^k$  e, a densidade total e velocidade local por  $\rho = \sum_k \sum_i N_i^k$  e  $\rho \mathbf{u} = \sum_k \sum_i \mathbf{c}_i N_i^k$ .

O processo de colisão está dividido em três etapas. A primeira parte é igual a uma colisão LBGK e envolve só valores locais das partículas com  $k$ -ésima cor, com as distribuições de equilíbrio usuais e um tempo de relaxação próprio de cada cor

$$(\Omega_i^k)^1 = -\frac{1}{\tau_k} \left( N_i^k - N_i^{k(eq)} \right). \quad (2.16)$$

A segunda etapa do operador de colisão é utilizada para *criar* a tensão interfacial. Após o cálculo do gradiente de cor local

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \sum_i^b \mathbf{c}_i \sum_j^b (N_j^r(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) - N_j^b(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t)), \quad (2.17)$$

uma perturbação é acrescentada na direção  $i$ , da forma

$$(\Omega_i^k)^2 = A |\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)| \left( \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{f})^2}{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i)(\mathbf{f} \cdot \mathbf{f})} - \frac{1}{2} \right), \quad (2.18)$$

onde  $A$  é um parâmetro ajustável, proporcional à tensão interfacial. Na seguinte etapa

é feita a *re-coloração* das partículas de forma tal que partículas da mesma cor tendam a aglomerar-se, assim o modelo força os fluidos a serem imiscíveis. O procedimento de *re-coloração* consiste em atribuir às distribuições valores tais que a difusão de um componente no outro seja mínima, alinhando o fluxo de partículas vermelhas com o gradiente de cor

$$\max \left[ \mathbf{f} \cdot \sum_i^b \mathbf{c}_i N_i'''^r \right], \quad (2.19)$$

enquanto que a massa das partículas vermelhas e a massa total são conservadas

$$\rho_r = \sum_i^b N_i''^r = \sum_i^b N_i'''^r, \quad N_i''^r + N_i''^b = N_i'''^r + N_i'''^b. \quad (2.20)$$

Nas fases puras as distribuições satisfazem as equações de Navier-Stokes com uma equação de estado de gás ideal e viscosidade na forma da Eq. (2.12), com o tempo de relaxação correspondente a cada fase.

Embora o método tenha sido aprimorado por Grunau et al. [1993], com a inclusão de outros parâmetros e a correção do tempo de relaxação, como função da concentração na proximidade da interface, para permitir o tratamento de fluidos com viscosidades diferentes e massas diferentes, o modelo é menos eficiente que seus concorrentes, devido à consulta aos sítios vizinhos durante o cálculo do gradiente de cor e, principalmente, ao processo de otimização na etapa de *re-coloração*. Além disso, a forma heurística com que é tratada a pseudo-interação entre espécies dificulta sua análise teórica e quantitativa.

Flekkoy [1993] propôs um modelo para misturas binárias com duas populações,  $R_i$  e  $B_i$ , cuja evolução é governada pela equação LBGK nas variáveis

$$N_i = R_i + B_i, \quad (2.21)$$

$$\Delta_i = R_i - B_i. \quad (2.22)$$

A escolha destas variáveis permite desacoplar o transporte de massa total da difusão de massa entre componentes. Desta forma a análise de Chapman-Enskog das equações permite obter a equação de continuidade e de balanço da quantidade de movimento para a mistura e uma equação de advecção-difusão para a diferença de densidades. Os coeficientes de transporte, viscosidade da mistura e coeficiente de difusão, são independentes e função dos parâmetros de relaxação  $\lambda_\nu$  e  $\lambda_D$ , usados nas equações LBGK de  $N_i$  e  $\Delta_i$ , respectivamente. Este modelo é relativamente simples, mas apresenta várias limitações. Por ter apenas dois parâmetros de relaxação independentes não é possível ajustar as viscosidades dos componentes separadamente e a mistura tem viscosidade constante. Além disso, a análise de Chapman-Enskog mostra que a equação de advecção-difusão possui um termo não-físico, proporcional ao quadrado da velocidade hidrodinâmica.

O primeiro e mais importante dos modelos para fluidos não-ideais foi proposto por Shan e Chen [1993]. Este modelo usa uma regra de interação de longa distância para simular fluidos não-ideais e suas misturas. Por esta razão os operadores de colisão não conservam a quantidade de movimento local. O modelo de Shan e Chen admite a existência de um número  $S$  de espécies diferentes, rotuladas pelo índice  $k$ , cada uma com massa molecular  $m_k$ , cuja densidade  $\rho_k$  e velocidade local  $\mathbf{u}_k$  estão dadas por

$$\rho_k = m_k \sum_i^b N_i^k, \quad (2.23)$$

$$\rho_k \mathbf{u}_k = m_k \sum_i^b N_i^k \mathbf{c}_i. \quad (2.24)$$

As distribuições de cada componente evoluem de acordo com a equação de Boltzmann para gases em rede com um operador de colisão BGK que modela as interações com os  $S$  tipos de partícula

$$N_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = N_i^k(\mathbf{x}, t) - \Omega_i^k(\mathbf{x}, t), \quad (2.25)$$

com

$$\Omega_i^k = -\frac{1}{\tau_k} \left( N_i^k - N_i^{k(eq)} \right). \quad (2.26)$$

As interações de longa distância são introduzidas pela definição de um potencial de interação com a forma

$$V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_k \sum_{\bar{k}} G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}) \psi_{\bar{k}}(\mathbf{x}'), \quad (2.27)$$

onde  $G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  é uma função de Green, que satisfaz a relação  $G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = G_{\bar{k}k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , e  $\psi_k(\rho_k(\mathbf{x}))$  é a função *massa efetiva*, escolhida de forma a permitir a transição de fases de cada componente e/ou a separação de fases de componentes diferentes. A quantidade de movimento acrescentada a cada componente devida à interação de longo alcance entre as moléculas de todos os componentes, em todas as direções, é dada por

$$\frac{d\mathbf{p}_k}{dt} = -\psi_k(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{x}'} \sum_{\bar{k}} G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi_{\bar{k}}(\mathbf{x}') (\mathbf{x}' - \mathbf{x}). \quad (2.28)$$

As distribuições de equilíbrio  $N_i^{k(eq)}(\rho_k, \mathbf{u}_k^{eq})$  são então calculadas de acordo com a Eq. (2.7), com a velocidade  $\mathbf{u}_k^{eq}$  obtida pela relação

$$\rho_k \mathbf{u}_k^{eq} = \rho_k \mathbf{u} + \tau_k \frac{d\mathbf{p}_k}{dt} + \tau_k \mathbf{F}_{ks} + \tau_k \mathbf{g}, \quad (2.29)$$

onde  $\mathbf{g}$  é a força de corpo,  $\mathbf{F}_{ks}$  é a força de interação entre o componente  $k$  e o sólido e a

velocidade  $\mathbf{u}$  é calculada como

$$\mathbf{u} = \frac{\sum_k \frac{\rho_k \mathbf{u}_k}{\tau_k}}{\sum_k \frac{\rho_k}{\tau_k}}. \quad (2.30)$$

Do anterior pode-se concluir que a quantidade de movimento não é conservada localmente durante a colisão, porém, devido à simetria da matriz  $G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , a quantidade de movimento total é mantida.

O modelo para a interação dos componentes com o sólido foi proposto por Martys e Chen [1996]. Com a densidade como função massa específica, a força de interação entre o fluido  $k$  e o sólido é

$$\mathbf{F}_{ks} = -\rho_k \sum_i^b G_{ks} s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) \mathbf{c}_i, \quad (2.31)$$

onde  $s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)$  é nulo se o sítio apontado pelo vetor  $\mathbf{c}_i$  é fluido, ou 1 se é sólido. O parâmetro  $G_{ks}$  é usado para ajustar a intensidade da interação entre o componente  $k$  e o sólido, e assim determinar a molhabilidade da superfície pelo componente  $k$ .

As equações de continuidade e de Navier-Stokes para este modelo são obtidas através da análise de Chapman-Enskog, com a equação de estado de um gás não-ideal e a viscosidade cinemática da forma

$$\nu \propto \left( \sum_k \frac{\rho_k}{\rho} \tau_k - \frac{1}{2} \right). \quad (2.32)$$

A análise multiescala deste modelo, quando aplicado a misturas, foi desenvolvida por Shan e Doolen [1995] e Shan e Doolen [1996]. As equações de continuidade e os coeficientes de difusão foram determinados como funções dos tempos de relaxação e a intensidade de interação entre componentes. Mesmo sendo o mais conhecido e utilizado dos modelos para fluidos multicomponentes, o modelo com potencial de interação possui algumas inconsistências que limitam sua aplicação. Como resultado da Eq. (2.29), e da conservação da quantidade de movimento local, na ausência de forças de interação, todos os componentes são relaxados a uma distribuição de equilíbrio local com velocidade dependente dos tempos de relaxação. Esta característica tem como consequência que o coeficiente de difusão binário não possa ser ajustado independentemente do valor da viscosidade dos componentes.

O primeiro modelo de Boltzmann baseado na energia livre foi proposto por Swift et al. [1995] para simular um sistema com duas fases de um único componente, e depois estendido à simulação de sistemas binários por Swift et al. [1996]. Sua motivação foi eliminar a inconsistência termodinâmica dos modelos anteriores. Um modelo isotérmico termodinamicamente consistente é aquele que, partindo de uma teoria de não-equilíbrio, recupera a teoria termodinâmica correta para um estado de equilíbrio, ou seja, incorpora corretamente as grandezas termodinâmicas: energia livre, potencial químico, etc. O modelo de

Swift et al. está inspirado na teoria de transição de fase em ligas binárias de Cahn-Hilliard (Rowlinson e Widom, 2002).

Num sistema binário as funções de distribuição  $f_i$  e  $g_i$  são escolhidas de forma que

$$n = \sum_i^b f_i, \quad n\mathbf{u} = \sum_i^b f_i \mathbf{c}_i, \quad (2.33)$$

$$\Delta n = \sum_i^b g_i, \quad (2.34)$$

onde  $\mathbf{u}$  é a velocidade media,  $n = n_1 + n_2$  é a densidade total do fluido, e  $\Delta n = n_1 - n_2$  é a diferença de densidade entre componentes. Estas distribuições evoluem de acordo com equações LBGK com tempos de relaxação diferentes

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_1} (f_i - f_i^0), \quad (2.35)$$

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_2} (g_i - g_i^0), \quad (2.36)$$

cujas distribuições de equilíbrio  $f_i^0$  e  $g_i^0$  satisfazem as restrições

$$\sum_i^b f_i^0 = n, \quad \sum_i^b f_i^0 \mathbf{c}_i = n\mathbf{u}, \quad (2.37)$$

$$\sum_i^b g_i^0 = \Delta n. \quad (2.38)$$

Além disto, os momentos superiores de  $f_i^0$  e  $g_i^0$  são escolhidos para que as equações macroscópicas resultantes descrevam corretamente a dinâmica de uma mistura binária

$$\sum_i^b f_i^0 c_{i\alpha} c_{i\beta} = \Pi_{\alpha\beta} + nu_\alpha u_\beta, \quad (2.39)$$

$$\sum_i^b g_i^0 c_{i\alpha} = \Delta n u_\alpha, \quad (2.40)$$

$$\sum_i^b g_i^0 c_{i\alpha} c_{i\beta} = \Gamma \Delta \mu \delta_{\alpha\beta} + \Delta n u_\alpha u_\beta, \quad (2.41)$$

onde  $\Pi_{\alpha\beta}$  é o tensor pressão, e  $\Gamma$  e  $\Delta \mu$  são a mobilidade e a diferença de potencial químico, respectivamente.

A análise multi-escala das Eqs. (2.35) e (2.36) fornece as equações de continuidade e de Navier-Stokes da mistura e uma equação de advecção-difusão para a diferença de densidades. Seguindo a descrição de não-equilíbrio de Cahn-Hilliard, as funções  $\Pi_{\alpha\beta}$  e

$\Delta\mu$  são calculadas a partir da energia livre de equilíbrio, como funções da intensidade da interação e um parâmetro relacionado com a temperatura. Finalmente, é possível escrever explicitamente as distribuições de equilíbrio como

$$f_i^0 = A + Bu_\alpha c_{i\alpha} + Cu^2 + Du_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} + G_{\alpha\beta} c_{i\alpha} c_{i\beta}, \quad i > 0, \quad (2.42)$$

$$f_0^0 = A_0 + C_0 u^2, \quad (2.43)$$

$$g_i^0 = H + Ku_\alpha c_{i\alpha} + Ju^2 + Qu_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta}, \quad i > 0, \quad (2.44)$$

$$g_0^0 = H_0 + J_0 u^2. \quad (2.45)$$

As constantes nas distribuições  $f_i^0$  e  $g_i^0$  são determinadas através da definição da densidade e quantidade de movimento e das Eqs. (2.39), (2.40) e (2.41).

Para incluir o efeito da interação entre as fases e o sólido é possível introduzir um potencial químico externo  $\mu_{ex}$  nos sítios sólidos. Os gradientes deste potencial químico criam uma força

$$F_\alpha \propto -\rho \partial_\alpha \mu_{ex}, \quad (2.46)$$

que pode ser incluída como um termo fonte na equação LBGK. Modificando o valor de  $\mu_{ex}$  para cada fase pode-se controlar a afinidade do sólido pelas fases e obter diferentes ângulos de contato estáticos.

O termo correspondente à tensão viscosa na equação de Navier-Stokes contém gradientes da densidade e portanto o modelo carece de invariância galileana. Este efeito é minimizado consideravelmente nas simulações de misturas binárias, para as quais a densidade total é aproximadamente constante em todo o domínio. Além disso, a escolha das distribuições  $f_i$  e  $g_i$  dificulta o ajuste das viscosidades de cada componente. Por estas razões, atualmente o método é pouco utilizado.

Um modelo para fluidos bicomponentes, com três parâmetros de relaxação, foi proposto por Facin et al. [2004] e estendido ao tratamento de fluidos imiscíveis por Santos et al. [2003]. O modelo está baseado em duas idéias: a decomposição do operador de colisão em duas parcelas, correspondentes a colisões entre partículas da mesma espécie e partículas de espécies diferentes e, no caso de fluidos imiscíveis, a incorporação de uma força anti-difusiva na direção do vetor gradiente de concentração.

A equação de Boltzmann BGK para as partículas  $r$ , de um sistema de dois componentes ( $r$  e  $b$ ), é a seguinte

$$N_i^r(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) - N_i^r(\mathbf{x}, t) = \Omega_i^{rr} + \Omega_i^{rb}, \quad (2.47)$$

com

$$\Omega_i^{rr} + \Omega_i^{rb} = -\frac{\omega^r}{\tau^r} \left( N_i^r - N_i^{r(eq)}(\rho^r, \mathbf{u}^r) \right) - \frac{\omega^b}{\tau^m} \left( N_i^r - N_i^{r(eq)}(\rho^r, v^b) \right), \quad (2.48)$$

onde  $\omega^k$  é a concentração da espécie  $k$ ,  $\tau^k$  e  $\tau^m$  são os parâmetros de relaxação das colisões entre partículas da mesma espécie e partículas diferentes, respectivamente, e  $v^k$  é a velocidade da espécie  $b$ , modificada pelo termo anti-difusivo. Este termo está relacionado com o gradiente de concentração através do vetor unitário

$$\hat{\mathbf{u}}^m = \begin{cases} \frac{\mathbf{u}^m}{|\mathbf{u}^m|} & \mathbf{u}^m \neq 0 \\ 0 & \mathbf{u}^m = 0 \end{cases}, \quad (2.49)$$

$$\mathbf{u}^m = \sum_i^b \omega^r(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) \mathbf{c}_i, \quad (2.50)$$

utilizado para modificar as velocidades  $\mathbf{u}^r$  e  $\mathbf{u}^b$  conservando a quantidade de movimento da seguinte forma:

$$v^b = \mathbf{u}^b - A\hat{\mathbf{u}}^m, \quad (2.51)$$

$$v^r = \mathbf{u}^r + A\hat{\mathbf{u}}^m. \quad (2.52)$$

Nas duas expressões anteriores  $A$  é o fator que regula a tensão interfacial. Com isso, o operador  $\Omega_i^{rb}$  na Eq. (2.47), e analogamente o operador  $\Omega_i^{br}$ , tem como efeito orientar o fluxo de partículas do tipo  $k$  na direção oposta ao seu fluxo difusivo enquanto satisfaz, localmente, a conservação da massa e da quantidade de movimento total

$$\sum_i^b \Omega_i^{rr} + \Omega_i^{rb} = 0, \quad \sum_i^b \Omega_i^{bb} + \Omega_i^{br} = 0, \quad (2.53)$$

$$\sum_i^b (\Omega_i^{rr} + \Omega_i^{rb} + \Omega_i^{bb} + \Omega_i^{br}) \mathbf{c}_i = 0. \quad (2.54)$$

Utilizando uma expansão de Chapman-Enskog no interior da região de transição, assumindo o fator de interação  $A$  pequeno o suficiente para considerar que produz apenas pequenos desvios em relação ao equilíbrio e que a espessura da interface é larga o suficiente, Santos et al. determinaram as equações de balanço de massa e quantidade de movimento para fluidos completamente miscíveis e imiscíveis. Outros resultados apresentados pelos autores são a dedução analítica dos coeficientes de difusão, a viscosidade, a tensão interfacial e a largura da interface.

A interação entre as espécies  $r$  e  $b$  e interfaces sólidas pode ser incluída no modelo assumindo que os sítios sólidos possuem uma propriedade análoga à concentração, que determina a afinidade do sólido por cada espécie e permite a variação do ângulo de contato estático. Outra vantagem deste modelo é a existência de três parâmetros de relaxação independentes, o que possibilita ajustar independentemente o coeficiente de difusão e as viscosidades dos componentes de forma simples.

Os modelos apresentados até aqui foram desenvolvidos diretamente no contexto da

equação de Boltzmann para gases em rede, com pouca ou nenhuma relação com os modelos existentes na teoria cinética dos gases. Após a derivação formal da LBE proposta por He e Luo [1997b], vários autores incorporaram os modelos de colisão baseados em teorias físicas consolidadas.

Luo e Girimaji [2003] desenvolveram um modelo baseado na teoria proposta por Sirovich [1962] para misturas binárias de gases com potencial de interação de Maxwell. Neste modelo as colisões entre partículas da mesma espécie são tratadas com um termo BGK, com parâmetro de relaxação constante, e as colisões entre partículas de espécies diferentes com uma linearização do operador BGK em torno da velocidade local da mistura. Esta escolha introduz erros de primeira ordem na diferença de velocidades dos componentes nas equações de continuidade por espécie, mas mantém a conservação da massa total. Na implementação proposta por estes autores os efeitos térmicos não são considerados e os termos da linearização proporcionais às diferenças de temperatura são excluídos. Por esta razão, a velocidade do som dos componentes é a mesma, independente da relação de suas massas. Para corrigir esta deficiência e simular misturas de partículas diferentes usando o mesmo conjunto de velocidades moleculares, McCracken e Abraham [2005] propuseram um método de realocação das distribuições após a etapa de propagação.

Um modelo similar, com operador de colisão linearizado, foi proposto por Xu [2005]. Nas linearizações do operador de colisão entre espécies diferentes, usadas por este autor, são adotadas como velocidade hidrodinâmica de referência a velocidade do componente com média espacial da concentração maior e como temperatura de referência a do componente com a média espacial da temperatura maior. As distribuições utilizadas neste modelo foram obtidas pelo ajuste das constantes numa expansão de alta ordem na velocidade molecular, necessárias para obter as equações de Euler e Navier-Stokes, em redes sobrepostas do tipo  $D2Q9$ , iguais para cada componente.

Recentemente Asinari [2005] propôs um modelo baseado na teoria de Hamel [1965] e Morse [1964]. Embora inspirado num modelo para dois fluidos, com dois operadores de colisão BGK, utiliza a velocidade da mistura como parâmetro nas distribuições Maxwellianas dos operadores de colisão entre partículas de espécies diferentes e desconsidera os efeitos térmicos e a relação entre as massas moleculares dos componentes. Por esta razão possui as mesmas inconsistências que os modelos propostos por Luo e Girimaji e Xu.

Em resumo, atualmente não existe uma formulação completamente consistente de um modelo cinético para fluidos multicomponentes no âmbito do método da equação de Boltzmann para gases em rede, que permita a descrição da transferência simultânea de quantidade de movimento, calor e massa.

# Capítulo 3

## Teoria cinética dos gases

Este capítulo expõe alguns dos conceitos fundamentais da teoria cinética dos gases, que serão empregados no desenvolvimento dos modelos LBGK para gases simples e misturas. Deduz-se primeiramente a equação de transporte de Boltzmann. A seguir são apresentadas as simetrias e propriedades do operador de colisão e as equações de transferência e balanço de massa, quantidade de movimento e energia. A análise multiescala de Chapman-Enskog, utilizada para obter a solução da equação de Boltzmann e as expressões para os coeficientes de transporte, é descrita na seção seguinte, numa forma resumida. Os detalhes se encontram nas referências Chapman e Cowling [1970] e Ferziger e Kaper [1972]. A expansão de Chapman-Enskog é utilizada, numa forma simplificada, na derivação das equações hidrodinâmicas a partir da equação de Boltzmann para gases em rede, nos capítulos 5 e 6. No final são apresentados os modelos cinéticos de tipo BGK, para o tratamento de gases simples e misturas, junto com uma discussão sobre suas variantes e características mais importantes.

### 3.1 A equação de transporte de Boltzmann

Na teoria cinética dos gases a descrição do comportamento de um fluido é abordada em termos de variáveis estatísticas. Considere-se um gás composto por moléculas, possivelmente de espécies diferentes, ocupando um volume  $V$  no espaço de  $D$  dimensões. O estado deste gás pode ser descrito pela posição e velocidade de todas as moléculas ou, estatisticamente, pela função distribuição de partículas ou simplesmente função distribuição  $f^a$ , definida tal que  $f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{c}$  é o número esperado de moléculas do tipo  $a$ , no tempo  $t$ , contidas no volume  $d\mathbf{x}$  em torno de  $\mathbf{x}$ , com velocidades moleculares entre  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ .

Assumindo que as moléculas deste gás não possuem estrutura, se movimentam independentemente umas das outras e seu movimento livre é interrompido apenas brevemente por colisões com outras partículas, pode se dizer que este gás é diluído ou rarefeito se a energia potencial entre suas moléculas, devida a forças intermoleculares de curto alcance (que só agem no instante da colisão) é muito pequena comparada com sua energia cinética.

Na ausência de colisões, as moléculas do tipo  $a$ , contidas num elemento de volume no espaço de fase  $d\mathbf{x}d\mathbf{c}$ , em torno de  $(\mathbf{x}, \mathbf{c})$ , sujeitas a uma força externa por unidade de massa  $\mathbf{F}_a$ , estarão, após um instante  $dt$ , no elemento de volume  $d\mathbf{x}'d\mathbf{c}'$ , em torno de  $(\mathbf{x} + \mathbf{c}dt, \mathbf{c} + \mathbf{F}_a dt)$ . O efeito das colisões ocorridas no intervalo  $dt$  é a mudança líquida na função distribuição, ou seja o balanço entre o número de partículas que entram e saem do volume  $d\mathbf{x}d\mathbf{c}$  por causa das colisões, representado por  $\left(\frac{\partial f^a}{\partial t}\right)_{col} d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt$ . Após expandir o balanço de número de partículas em séries de Taylor e tomando só os termos de primeira ordem em  $dt$ , tem-se [Chapman e Cowling, 1970]

$$\frac{\partial f^a}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f^a + \mathbf{F}_a \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f^a = \left(\frac{\partial f^a}{\partial t}\right)_{col}. \quad (3.1)$$

O lado direito da Eq. (3.1) foi determinado originalmente por Boltzmann usando as seguintes hipóteses:

- No gás rarefeito só são consideradas as colisões entre duas partículas.
- Os efeitos da força externa  $\mathbf{F}_a$  na colisão são desprezíveis.
- Num intervalo de tempo  $\tau^*$  muito maior que o tempo de colisão  $\tau_c$  e muito pequeno em comparação ao tempo médio entre duas colisões  $\tau$ , a função distribuição não muda apreciavelmente e pode ser considerada constante ao longo de uma distância da ordem do diâmetro das moléculas.
- Não existe correlação entre as velocidades das partículas antes da colisão (*Hipótese do Caos Molecular*).

De acordo com a sua definição, o termo  $\left(\frac{\partial f^a}{\partial t}\right)_{col} d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt$  pode ser dividido em duas partes;  $\Upsilon_{ak}^+ d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt$ , que representa o número esperado de colisões com partículas de tipo  $k$  para as quais o estado final da partícula  $a$  se encontra dentro do elemento de volume  $d\mathbf{x}d\mathbf{c}$  em torno de  $(\mathbf{x}, \mathbf{c})$  e,  $\Upsilon_{ak}^- d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt$ , que representa o número esperado de colisões com partículas de tipo  $k$  para as quais o estado inicial da partícula  $a$  se encontra no elemento de volume  $d\mathbf{x}d\mathbf{c}$  em torno de  $(\mathbf{x}, \mathbf{c})$ . Assim,

$$\left(\frac{\partial f^a}{\partial t}\right)_{col} d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt = \sum_k (\Upsilon_{ak}^+ - \Upsilon_{ak}^-) d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt. \quad (3.2)$$

A forma explícita dos termos  $\Upsilon_{ak}^+$  e  $\Upsilon_{ak}^-$  pode ser obtida examinando as características de uma colisão binária entre partículas de espécies  $a$  e  $k$  [Chapman e Cowling, 1970, Ferziger e Kaper, 1972, Kremer, 2005].

Assumindo que o efeito do potencial de interação entre as moléculas só é apreciável numa determinada distância, além da qual  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{c}_1$  são as velocidades moleculares das

espécies  $a$  e  $k$  antes da colisão, respectivamente, e que  $\mathbf{c}'$  e  $\mathbf{c}'_1$  correspondem as velocidades destas partículas após a colisão, pode-se mostrar, usando a lei de conservação da quantidade de movimento, que a velocidade do centro de massa

$$\mathbf{G} = \mu_a \mathbf{c} + \mu_k \mathbf{c}_1, \quad (3.3)$$

onde  $\mu_a = \frac{m_a}{m_a + m_k}$  é a massa reduzida da espécie  $a$ , permanece constante.

De forma similar, é possível mostrar, usando a lei da conservação da energia, que o módulo da velocidade relativa,  $\mathbf{g} = \mathbf{c} - \mathbf{c}_1$ , é o mesmo antes e depois da colisão, ou seja  $g = g'$ .

Do anterior se conclui que a colisão muda apenas a orientação da velocidade relativa, numa direção que depende do potencial de interação entre as moléculas. Esta direção está determinada pelos ângulos de espalhamento  $\chi$  e azimutal  $\epsilon$ .

As velocidades pós-colisionais podem ser escritas como função da velocidade relativa e do vetor unitário  $\boldsymbol{\alpha}$ , na direção da diferença de velocidades relativas  $\mathbf{g}' - \mathbf{g}$ , da forma

$$\mathbf{c}' = \mathbf{c} + \boldsymbol{\alpha} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{g}), \quad (3.4a)$$

$$\mathbf{c}'_1 = \mathbf{c}_1 - \boldsymbol{\alpha} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{g}). \quad (3.4b)$$

Estas expressões estabelecem uma transformação linear entre as velocidades pré e pós-colisionais, com Jacobiano unitário, para cada combinação de parâmetros  $\mathbf{G}$ ,  $\mathbf{g}$ ,  $\chi$  e  $\epsilon$  [Ferziger e Kaper, 1972, Kremer, 2005].

Considerando a partícula de tipo  $a$  como fixa na origem de um sistema de coordenadas, o número esperado de moléculas de tipo  $k$  contidas dentro de um cilindro de colisão, representado na Fig. (3.1), é  $f^k(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, t) g b d b d \epsilon d \mathbf{c}_1 d t$ , onde  $b$  é o parâmetro de impacto, ou seja a distância entre um eixo paralelo a  $\mathbf{g}$  que passa pela origem e a assíntota da trajetória.

Admitindo que não existe correlação entre as velocidades das moléculas dos tipos  $a$  e  $k$ , antes da colisão, o número esperado de colisões é dado por

$$f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) f^k(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, t) g b d b d \epsilon d \mathbf{c}_1 d \mathbf{c} d \mathbf{x} d t. \quad (3.5)$$

Para calcular o número de moléculas que adquirem a velocidade  $\mathbf{c}$  após o tempo  $d t$ , considera-se a colisão inversa ou restitutiva, ou seja aquela cujas velocidades iniciais são  $\mathbf{c}'$  e  $\mathbf{c}'_1$  e cujas velocidades finais são  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{c}_1$ . Se admitimos que neste caso tampouco existem correlações entre as velocidades das partículas, o número esperado de colisões que tem como estado final uma partícula de tipo  $a$ , no elemento de volume  $d \mathbf{c} d \mathbf{x}$  em torno de  $(\mathbf{x}, \mathbf{c})$ , é dado por

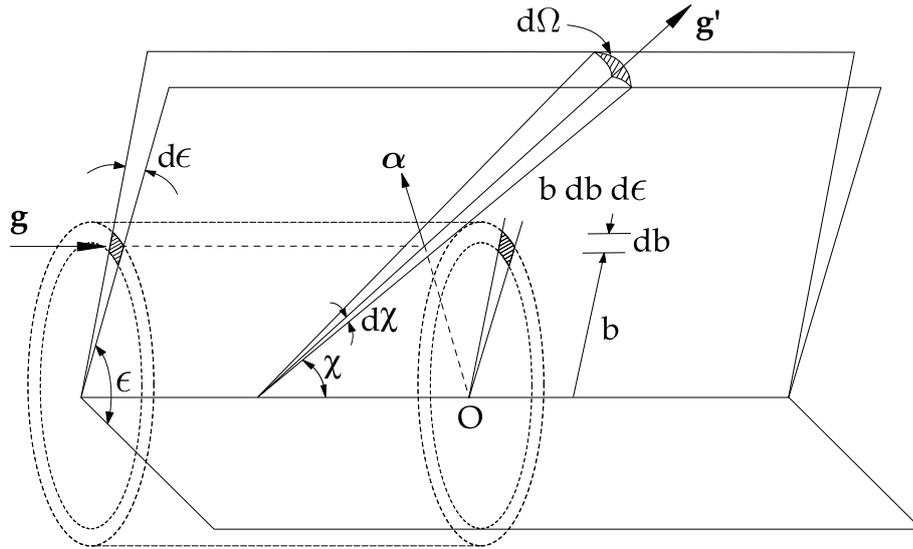


Figura 3.1: Detalhes de uma colisão binária.

$$f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}', t) f^k(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1', t) g b d b d \epsilon d \mathbf{c}_1 d \mathbf{c} d \mathbf{x} d t. \quad (3.6)$$

Na equação anterior foi utilizado o fato do Jacobiano da transformação das velocidades pré e pós colisionais ser unitário, por tanto  $d\mathbf{c}d\mathbf{c}_1 = d\mathbf{c}'d\mathbf{c}_1'$ . O valor da taxa de mudança na função distribuição é obtido após integrar em todas as possíveis velocidades da partícula incidente, ângulos azimutais e parâmetros de impacto. A equação resultante é a equação de transporte de Boltzmann para misturas de gases rarefeitos<sup>1</sup>,

$$\frac{\partial f^a}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f^a + \mathbf{F}_a \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f^a = \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^d (f'^a f'^k - f^a f^k) g b d b d \epsilon d \mathbf{c}_1, \quad (3.7)$$

tendo como caso particular a equação de Boltzmann para um gás simples

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^d (f' f'_1 - f f_1) g b d b d \epsilon d \mathbf{c}_1, \quad (3.8)$$

onde a identificação do tipo de molécula foi omitida e o subíndice 1 se usa para distinguir as propriedades da molécula incidente. Estas equações se encontram escritas, freqüentemente, em função da seção diferencial de choque  $\sigma_{ak}$ , que relaciona o fluxo de moléculas incidentes com o número de moléculas espalhadas na direção do elemento diferencial de ângulo sólido  $d\Omega$ . Desta forma, as equações (3.7) e (3.8) podem ser expressadas alterna-

<sup>1</sup>Por comodidade foram usadas as seguintes abreviações  $f^a = f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ ,  $f'^a = f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}', t)$ ,  $f^k = f^k(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, t)$  e  $f'^k = f^k(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1', t)$

tivamente como

$$\frac{\partial f^a}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f^a + \mathbf{F}_a \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f^a = \sum_k \int \int \int (f'^a f'^k - f^a f^k) g \sigma_{ak} d\Omega d\mathbf{c}_1, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f = \int \int \int (f' f'_1 - f f_1) g \sigma d\Omega d\mathbf{c}_1. \quad (3.10)$$

### 3.1.1 Propriedades do operador de colisão

Nesta seção são apresentadas as simetrias do operador de colisão que serão usadas na derivação das equações macroscópicas e na prova do teorema *H*. Considerando que  $\psi_a = \psi_a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$  seja uma propriedade definida para cada componente da mistura, a taxa de variação da propriedade  $\psi_a$ , devida às colisões, é obtida multiplicando o operador de colisão  $J^a = \sum_k J^{ak}$  por  $\psi_a$  e integrando em todas as possíveis velocidades da molécula da espécie  $a$ ,

$$\sum_k \int J(f^a, f^k) \psi_a d\mathbf{c} = \sum_k \int (f'^a f'^k - f^a f^k) g b \psi_a db d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (3.11)$$

Nesta expressão é possível trocar as variáveis pré-colisionais pelas pós-colisionais e vice-versa sem mudar o valor das integrais, já que, pelas propriedades da colisão binária, os diferenciais nas duas integrais são equivalentes. Assim,

$$\sum_k \int J(f^a, f^k) \psi_a d\mathbf{c} = \sum_k \int (f^a f^k - f'^a f'^k) g b \psi'_a db d\epsilon d\mathbf{c}'_1 d\mathbf{c}'. \quad (3.12)$$

Somando as expressões equivalentes, Eqs. (3.11) e (3.12), e promediando, tem-se

$$\sum_k \int J(f^a, f^k) \psi_a d\mathbf{c} = \frac{1}{2} \sum_k \int (f'^a f'^k - f^a f^k) g b (\psi_a - \psi'_a) db d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (3.13)$$

A taxa de variação total da propriedade  $\psi$ , devida às colisões, é a soma das taxas de variação das propriedades  $\psi_a$  de todas as espécies da mistura. Usando a Eq. (3.13) esta taxa de variação é dada por

$$\sum_{a,k} \int J(f^a, f^k) \psi_a d\mathbf{c} = \frac{1}{2} \sum_{a,k} \int (f'^a f'^k - f^a f^k) g b (\psi_a - \psi'_a) db d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}, \quad (3.14)$$

onde a troca das propriedades da espécie  $a$  pelas da espécie  $k$  e vice-versa não mudam o valor da expressão, por serem estes índices livres. Assim,

$$\sum_{a,k} \int J(f^a, f^k) \psi_a \, d\mathbf{c} = \frac{1}{2} \sum_{a,k} \int (f'^a f'^k - f^a f^k) g b (\psi_k - \psi'_k) \, db d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c} \quad (3.15)$$

e, somando as duas expressões anteriores e promediando,

$$\sum_{a,k} \int J(f^a, f^k) \psi_a \, d\mathbf{c} = \frac{1}{4} \sum_{a,k} \int (f'^a f'^k - f^a f^k) g b (\psi_a + \psi_k - \psi'_a - \psi'_k) \, db d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (3.16)$$

Isolando o termo  $J^{aa}$ , que representa as colisões entre partículas do mesmo tipo, no operador de colisão na Eq. (3.13) e transformando as velocidades  $\mathbf{c}_1 \rightarrow \mathbf{c}$  e  $\mathbf{c}'_1 \rightarrow \mathbf{c}'$ , ou seja, trocando a identidade das moléculas alvo e incidente, o que não muda o valor da integral, tem-se

$$\int J^{aa} \psi_a \, d\mathbf{c} = \frac{1}{2} \int (f'_1 f'^a - f^a f^a) g b (\psi_{a1} - \psi'_{a1}) \, db d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}, \quad (3.17)$$

$$\int J^{aa} \psi_a \, d\mathbf{c} = \frac{1}{4} \int (f'^a f'^a - f^a f^a) g b (\psi_a + \psi_{a1} - \psi'_a - \psi'_{a1}) \, db d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (3.18)$$

As equações (3.16) e (3.18) são nulas, independentemente dos valores das distribuições  $f^a$  e  $f^k$ , quando a relação

$$\psi_a + \psi_k = \psi'_a + \psi'_k \quad (3.19)$$

é válida para todas as colisões.

As funções que satisfazem a Eq. (3.19) para todas as combinações de moléculas  $a$  e  $k$  são os chamados invariantes de colisão  $\psi_a = \{m_a, m_a \mathbf{c}, \frac{1}{2} m_a c^2\}$  e suas combinações lineares.

## 3.2 Equações macroscópicas ou hidrodinâmicas

Para conhecer as equações de transporte das grandezas macroscópicas, que dependem apenas da posição e do tempo, é necessário realizar uma integração em todo o domínio de velocidades moleculares. Se a equação de transporte de Boltzmann, Eq. (3.7), é multiplicada por uma grandeza  $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ , que representa uma propriedade microscópica definida para cada espécie, e integrada em todo o espaço de velocidades  $\mathbf{c}$ , obtém-se após alguns arranjos a equação de transferência para  $\psi$ ,

$$\frac{\partial \Psi_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\Psi_a u_{a\alpha} + \Phi_{a\alpha}) = Supr_a + Prod_a, \quad (3.20)$$

onde  $\Psi_a$  é a densidade da grandeza transportada,  $\Phi_{a\alpha}$  sua densidade de fluxo na direção  $\alpha$ ,  $Supr_a$  a densidade de suprimento devido à força externa e  $Prod_a$  o termo de produção<sup>2</sup>;

$$\Psi_a = \int \psi f^a \, d\mathbf{c}, \quad (3.21)$$

$$\Phi_{a\alpha} = \int \psi C_{a\alpha} f^a \, d\mathbf{c}, \quad (3.22)$$

$$Supr_a = \int F_{a\alpha} \frac{\partial \psi}{\partial c_\alpha} f^a \, d\mathbf{c}, \quad (3.23)$$

$$Prod_a = \int \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + c_\alpha \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} \right) f^a \, d\mathbf{c} + \sum_k \int (f'^a f'^k - f^a f^k) \psi_a g b \, db d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (3.24)$$

Nas expressões anteriores  $\mathbf{C}_a$  é a velocidade peculiar, definida como  $\mathbf{C}_a = \mathbf{c} - \mathbf{u}_a$ , onde  $\mathbf{u}_a$  é a velocidade hidrodinâmica da espécie  $a$ , definida na seção 3.2.2.

### 3.2.1 Equações macroscópicas para um gás ideal simples

As equações de transferência dos invariantes de colisão são as equações de balanço dos momentos macroscópicos (nos quais foi omitida a identificação do tipo de molécula); densidade de massa  $\rho$ , velocidade hidrodinâmica  $\mathbf{u}$  e densidade de energia  $E$ , definidos da seguinte forma:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int m f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c}, \quad (3.25)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int m \mathbf{c} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c}, \quad (3.26)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) E(\mathbf{x}, t) = \int \frac{1}{2} m c^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c} = \frac{1}{2} \rho u^2 + \rho \varepsilon, \quad (3.27)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \varepsilon(\mathbf{x}, t) = \int \frac{1}{2} m C^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c}, \quad (3.28)$$

onde  $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}$  é a velocidade peculiar e  $\varepsilon$  é a energia interna. Os momentos de ordem superior da velocidade peculiar, que aparecem no desenvolvimento do termo  $\Phi_{a\alpha}$ , são o tensor pressão

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t) = \int m C_\alpha C_\beta f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c}, \quad (3.29)$$

<sup>2</sup>A convenção de soma nos índices repetidos é utilizada apenas para os subíndices em letras gregas. A notação vetorial é empregada conjuntamente com a indicial onde permitam maior clareza.

e o vetor fluxo não-convectivo de energia

$$q_\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int mC^2 C_\alpha f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (3.30)$$

Substituindo  $\psi$  pelos invariantes de colisão na equação (3.20), obtém-se, após manipulações algébricas, as seguintes equações:

- $\psi = m$ : continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0, \quad (3.31)$$

- $\psi = mc_\alpha$ : balanço de quantidade de movimento

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\rho u_\alpha u_\beta + \Pi_{\alpha\beta}) - \rho F_\alpha = 0, \quad (3.32)$$

- $\psi = \frac{1}{2}mc^2$ : balanço de energia

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \varepsilon + \frac{1}{2}u^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \rho \left( \varepsilon + \frac{1}{2}u^2 \right) u_\alpha + q_\alpha + \Pi_{\alpha\beta} u_\beta \right] - \rho F_\alpha u_\alpha = 0. \quad (3.33)$$

Estas expressões podem ser manipuladas para obter equações de transporte para a velocidade e a energia interna. Utilizando a equação da continuidade (3.31) é possível escrever a equação (3.32) como

$$\rho \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \rho u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} - \rho F_\alpha = 0. \quad (3.34)$$

De forma análoga, utilizando a equação (3.32), multiplicada por  $u_\alpha$ , e a equação da continuidade, para simplificar termos na equação (3.33), obtém-se as equações

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho \varepsilon u_\alpha + q_\alpha) + \Pi_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} = 0, \quad (3.35)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho u_\alpha \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_\alpha} + \Pi_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} = 0. \quad (3.36)$$

Nas equações (3.32) e (3.33) o tensor pressão  $\Pi_{\alpha\beta}$  e o vetor fluxo não-convectivo de energia  $q_\alpha$  podem ser identificados, por comparação direta com as equações de movimento, derivadas das teorias fenomenológicas, com o tensor tensão viscosa e o vetor fluxo de calor, respectivamente [Batchelor, 1967]. A energia interna de um gás ideal monoatômico está relacionada com a temperatura através da equação de estado térmica, que para o caso do gás ideal clássico tem a seguinte forma

$$\varepsilon = \frac{DkT}{2m}, \quad (3.37)$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura.

### 3.2.2 Equações macroscópicas para uma mistura de gases ideais

No caso de misturas de gases ideais são usadas duas formas para escrever as equações de transferência dos invariantes de colisão, dependendo da velocidade hidrodinâmica utilizada para calcular a velocidade peculiar. A primeira utiliza a velocidade peculiar  $\mathbf{C}_a$  para calcular os termos da equação de transferência por espécie, cujos momentos hidrodinâmicos, densidade de massa, velocidade hidrodinâmica da espécie e densidade de energia da espécie, são

$$\rho_a(\mathbf{x}, t) = \int m_a f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (3.38)$$

$$\rho_a(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_a(\mathbf{x}, t) = \int m_a \mathbf{c} f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (3.39)$$

$$\rho_a(\mathbf{x}, t) E_a(\mathbf{x}, t) = \int \frac{1}{2} m_a c^2 f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} = \frac{1}{2} \rho_a u_a^2 + \rho_a \varepsilon_a, \quad (3.40)$$

respectivamente, com

$$\rho_a(\mathbf{x}, t) \varepsilon_a(\mathbf{x}, t) = \int \frac{1}{2} m_a C_a^2 f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (3.41)$$

A energia interna da espécie  $a$  está relacionada com uma *temperatura* efetiva  $T_a$ , definida como

$$T_a \equiv \frac{2}{D} \frac{m_a \varepsilon_a}{k}, \quad (3.42)$$

e com a *pressão* efetiva  $p_a$ , de acordo com

$$p_a \equiv \frac{2}{D} \rho_a \varepsilon_a. \quad (3.43)$$

O tensor pressão da espécie  $a$  está definido como

$$\Pi_{a\alpha\beta}(\mathbf{x}, t) = \int m_a C_{a\alpha} C_{a\beta} f^a(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (3.44)$$

e o vetor fluxo não-convectivo de energia da espécie  $a$  como

$$q_{a\alpha}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int m_a C_a^2 C_{a\alpha} f^a(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (3.45)$$

A formulação anterior, sugerida por Goldman e Sirovich [1967], é útil quando é preciso obter propriedades macroscópicas da mistura a partir das propriedades dos componentes, como no capítulo 6.

Substituindo  $\psi$  pelos invariantes de colisão, na equação de transferência, obtém-se a equação da continuidade da mistura e, para as grandezas não conservadas por espécie, quantidade de movimento e energia, as equações de balanço por espécie:

- $\psi = m_a$ : continuidade

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \frac{\partial \rho_a u_{a\alpha}}{\partial x_\alpha} = 0, \quad (3.46)$$

Somando as equações de todas as espécies obtém-se a equação de continuidade da mistura<sup>3</sup>

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0, \quad (3.47)$$

onde

$$\rho = \sum_a \rho_a \quad \text{e} \quad \rho u_\alpha = \sum_a \rho_a u_{a\alpha}. \quad (3.48)$$

- $\psi = m_a c_\alpha$ : balanço de quantidade de movimento

$$\frac{\partial \rho_a u_{a\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\rho_a u_{a\alpha} u_{a\beta} + \Pi_{a\alpha\beta}) - \rho_a F_{a\alpha} = \sum_k \int J^{ak} m_a c_\alpha \, d\mathbf{c}, \quad (3.49)$$

- $\psi = \frac{1}{2} m_a c^2$ : balanço de energia

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho_a \left( \varepsilon_a + \frac{1}{2} u_a^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \rho_a \left( \varepsilon_a + \frac{1}{2} u_a^2 \right) u_{a\alpha} + q_{a\alpha} + \Pi_{a\alpha\beta} u_{a\beta} \right] \\ - \rho_a F_{a\alpha} u_{a\alpha} = \sum_k \int J^{ak} \frac{1}{2} m_a c^2 \, d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Por simplicidade será considerada apenas uma mistura binária. Para este sistema, somando as equações de balanço da quantidade de movimento dos componentes  $a$  e  $b$ , tem-se

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\rho u_\alpha u_\beta + \Pi_{\alpha\beta}) = \rho_a F_{a\alpha} + \rho_b F_{b\alpha}, \quad (3.51)$$

onde

$$\Pi_{\alpha\beta} = \Pi_{a\alpha\beta} + \Pi_{b\alpha\beta} + \frac{\rho_a \rho_b}{\rho} (u_{a\alpha} - u_{b\alpha})(u_{a\beta} - u_{b\beta}). \quad (3.52)$$

No caso da soma das equações de balanço da energia obtém-se a expressão

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \varepsilon + \frac{1}{2} u^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \rho \left( \varepsilon + \frac{1}{2} u^2 \right) u_\alpha + q_\alpha + \Pi_{\alpha\beta} u_\beta \right] = \rho_a F_{a\alpha} u_{a\alpha} + \rho_b F_{b\alpha} u_{b\alpha}, \quad (3.53)$$

onde

$$\rho \varepsilon = \rho_a \varepsilon_a + \rho_b \varepsilon_b + \frac{\rho_a \rho_b}{2\rho} (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)^2, \quad (3.54)$$

---

<sup>3</sup>No restante do texto, quando uma grandeza microscópica apareça sem a identificação da espécie, deve-se entender que tal grandeza se refere a um gás simples ou então a uma mistura de gases.

$$\begin{aligned}
q_\alpha &= q_{a\alpha} + q_{b\alpha} + \left( \frac{\rho_b}{\rho} \Pi_{a\alpha\beta} - \frac{\rho_b}{\rho} n_a k T_a \delta_{\alpha\beta} - \frac{\rho_a}{\rho} \Pi_{b\alpha\beta} + \frac{\rho_a}{\rho} n_b k T_b \delta_{\alpha\beta} \right) (u_{a\beta} - u_{b\beta}) \\
&+ \frac{(D+2)}{2} k T \frac{n_a n_b}{\rho} (m_b - m_a) (u_{a\alpha} - u_{b\alpha}) + \frac{(D+2)}{2} \frac{n_a n_b}{n} k (T_a - T_b) (u_{a\alpha} - u_{b\alpha}) \\
&+ \frac{\rho_a \rho_b}{2\rho} \left( \frac{\rho_a^2 - \rho_b^2}{\rho^2} - \frac{(D+2)}{D} \frac{n_a n_b}{n\rho} (m_b - m_a) \right) (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)^2 (u_{a\alpha} - u_{b\alpha}). \quad (3.55)
\end{aligned}$$

Em geral, os termos de fluxo podem ser calculados fazendo a equivalência entre os termos nas Eqs. (3.33) e (3.32) e as somas dos termos dos componentes, por se tratarem de equações lineares.

A segunda forma, e mais freqüentemente usada, de expressar as equações de balanço da mistura usa a velocidade peculiar com referência à velocidade hidrodinâmica da mistura, Eq. (3.48), para calcular o tensor pressão e o fluxo não-convectivo de energia [Chapman e Cowling, 1970, Ferziger e Kaper, 1972]. A equação de balanço da massa é, neste caso,

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \frac{\partial \rho_a u_\alpha}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial j_{a\alpha}}{\partial x_\alpha}, \quad (3.56)$$

onde  $j_{a\alpha}$  é o fluxo mássico difusivo da espécie  $a$

$$j_{a\alpha} = \rho_a (u_{a\alpha} - u_\alpha), \quad (3.57)$$

que satisfaz a relação

$$\sum_a j_{a\alpha} = 0. \quad (3.58)$$

As equações de balanço da quantidade de movimento e de energia são idênticas as Eqs. (3.51) e (3.53), com a energia interna da mistura, o tensor pressão e o fluxo não-convectivo de energia dados por

$$\rho \varepsilon = \sum_a \int f^a \frac{1}{2} m_a C^2 \, dc, \quad (3.59)$$

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_a \int f^a m_a C_\alpha C_\beta \, dc, \quad (3.60)$$

$$q_\alpha = \sum_a \int f^a \frac{1}{2} m_a C^2 C_\alpha \, dc, \quad (3.61)$$

respectivamente. A relações anteriores serão usadas no cálculo dos coeficientes de transporte na análise de Chapman-Enskog da seção 3.4 e do capítulo 6.

### 3.3 Equilíbrio e o teorema $H$

O teorema  $H$  de Boltzmann estabelece que, a função  $\bar{H}$  definida como

$$\bar{H}(t) = \sum_a \int f^a \ln f^a d\mathbf{c} d\mathbf{x} \quad (3.62)$$

é sempre decrescente no tempo,  $\frac{d\bar{H}}{dt} \leq 0$ , e que  $\frac{d\bar{H}}{dt} = 0$  se e só se  $f^a$  é a função distribuição de Maxwell-Boltzmann com a velocidade hidrodinâmica e a temperatura da mistura.

Assumindo uma mistura de gases rarefeitos, contida num recipiente de paredes perfeitamente lisas, na ausência de forças de corpo, a equação de transferência (3.20) para a grandeza  $\psi_a = \ln f^a + 1$  é:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int (\ln f^a + 1) f^a d\mathbf{c} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int (\ln f^a + 1) f^a c_\alpha d\mathbf{c} = \\ & \int \left( \frac{\partial f^a}{\partial t} + c_\alpha \frac{\partial f^a}{\partial x_\alpha} \right) d\mathbf{c} + \sum_k \int (f'^a f'^k - f^a f^k) (\ln f^a + 1) g b d\mathbf{b} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Somando as equações de transferência de todas as espécies, e levando em conta que as constantes são invariantes de colisão, tem-se

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial H_\alpha}{\partial x_\alpha} = -\frac{1}{4} \sum_{a,k} \int (f'^a f'^k - f^a f^k) \ln \frac{f'^a f'^k}{f^a f^k} g b d\mathbf{b} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}, \quad (3.64)$$

onde a Eq. (3.16) foi usada para escrever a integral no termo de produção,

$$H = \sum_a \int f^a \ln f^a d\mathbf{c} \quad (3.65)$$

e

$$H_\alpha = \sum_a \int f^a \ln f^a c_\alpha d\mathbf{c}. \quad (3.66)$$

Integrando a expressão (3.64) na região  $R$ , limitada pela superfície do recipiente  $\partial R$ , obtém-se, pela aplicação dos teoremas de Reynolds e da divergência,

$$\begin{aligned} & \frac{d\bar{H}}{dt} + \int_{\partial R} (H_\alpha - H u_{0\alpha}) dS_\alpha = \\ & -\frac{1}{4} \sum_{a,k} \int (f'^a f'^k - f^a f^k) \ln \frac{f'^a f'^k}{f^a f^k} g b d\mathbf{b} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c} d\mathbf{x} \leq 0, \end{aligned} \quad (3.67)$$

onde  $\mathbf{u}_0$  é a velocidade do contorno e  $dS_\alpha$  é um elemento diferencial de superfície apontando para fora. Num recipiente de paredes lisas, a função distribuição, perto da parede, satisfaz a relação  $f^a(c_\parallel, c_\perp) = f^a(c_\parallel, -c_\perp)$ , ou seja, por causa da reflexão especular, a partícula muda apenas o sentido da componente da sua velocidade perpendicular à parede, o que anula a integral (3.66). Assumindo também um recipiente estático, o segundo termo do lado esquerdo da Eq. (3.67) é nulo. Os integrandos no lado direito da equação (3.67) são sempre positivos, e nulos apenas quando

$$f'^a f'^k - f^a f^k = 0, \quad (3.68)$$

ou, o que é equivalente

$$\ln f'^a + \ln f'^k = \ln f^a + \ln f^k. \quad (3.69)$$

O resultado anterior indica que  $\overline{H}$  é uma função que não se incrementa com o tempo e que tende a um valor finito para o qual  $\frac{d\overline{H}}{dt} = 0$ . Isto acontece quando a quantidade  $\ln f$  é preservada pelas colisões, e pode ser escrita como uma combinação linear dos invariantes de colisão: massa, quantidade de movimento e energia cinética. A função distribuição que satisfaz a Eq. (3.69) para todas as combinações de espécies, sujeita as relações (3.48) e (3.59), é a função de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann

$$f^{a(M)} = n_a \left( \frac{m_a}{2\pi kT} \right)^{D/2} \exp \left( -\frac{m_a}{2kT} (\mathbf{c} - \mathbf{u})^2 \right). \quad (3.70)$$

Um gás diluído, inicialmente em condições arbitrárias, evoluirá de forma a atingir um estado descrito pela distribuição de Maxwell-Boltzmann, após um tempo suficientemente longo. Funções com a forma da Eq. (3.70) são chamadas de Maxwellianas. A função distribuição de Maxwell-Boltzmann anula cada um dos operadores de colisão  $J^{ak}$  e corresponde a solução da equação de ordem zero na expansão de Enskog-Chapman, como será visto na seção seguinte.

### 3.4 Análise multiescala

Para completar o desenvolvimento explícito das equações de balanço apresentadas na seção 3.2 é necessário relacionar o fluxo não-convectivo de energia e o tensor pressão com as variáveis hidrodinâmicas ou, mais especificamente, com os seus gradientes, na forma das chamadas equações constitutivas. Esta relação é estabelecida através do método de Chapman-Enskog [Chapman e Cowling, 1970].

O propósito da expansão de Chapman-Enskog é obter um tipo particular de solução por aproximações sucessivas para a equação de transporte de Boltzmann, que depende do tempo apenas através da densidade, velocidade e temperatura (variáveis macroscópicas ou hidrodinâmicas) e cuja integração fornece formas explícitas dos coeficientes de

transporte (coeficiente de difusão, viscosidade e condutividade térmica), como função das propriedades termodinâmicas e moleculares.

A solução das equações hierárquicas fornecidas pelas aproximações estabelece uma ponte entre a equação de transporte de Boltzmann e a hidrodinâmica descrita pelas equações de Navier-Stokes-Fourier. Embora a solução das equações de baixa ordem seja suficiente para obter a descrição termohidrodinâmica de um gás rarefeito, a seguir será apresentado o procedimento genérico de derivação, primeiro para um gás simples e depois para uma mistura de gases.

### 3.4.1 Método de Chapman - Enskog para um gás simples

Para simplificar a nomenclatura pode-se reescrever a equação de transporte de Boltzmann como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathcal{D}f = J(f, f) \quad (3.71)$$

onde

$$\mathcal{D}f \equiv (\mathbf{c} \cdot \nabla + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{c}}) f, \quad (3.72)$$

$$J(f, g) \equiv \int \int \int (f'g'_1 - fg_1) gb db d\epsilon d\mathbf{c}_1. \quad (3.73)$$

Antes de expandir a solução da equação é necessário conhecer a ordem de grandeza de cada um dos seus termos. Se  $\bar{t}$  é o tempo característico da variação das grandezas macroscópicas,  $L$  é o comprimento macroscópico característico, tal que  $L \sim \mathcal{O}(\phi/|\nabla\phi|)$ , onde  $\phi$  é uma propriedade macroscópica do escoamento, e  $\bar{c}$  é a velocidade molecular média, os termos do lado esquerdo da equação de Boltzmann são das ordens

$$\frac{\partial f}{\partial t} \sim \mathcal{O}(f\bar{t}^{-1}), \quad c_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} \sim \mathcal{O}(f\bar{c}L^{-1}). \quad (3.74)$$

A integral do lado direito da equação envolve fatores das seguintes ordens;  $\int b db \sim \mathcal{O}(d^2)$ , onde  $d$  é o diâmetro molecular,  $\int f d\mathbf{c} \sim \mathcal{O}(n)$  e  $g \sim \mathcal{O}(\bar{c})$ . Usando a estimativa da frequência de colisão para esferas rígidas para relacionar o diâmetro molecular com o livre percurso médio  $l \sim \mathcal{O}(d^2n)^{-1}$  e definindo o tempo médio entre colisões como  $\tau = \frac{l}{\bar{c}}$ , a equação de transporte de Boltzmann (sem o termo de força) passa a ser, em variáveis adimensionais,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\bar{t} l}{\tau L} \mathbf{c} \cdot \nabla f = \frac{\bar{t}}{\tau} J(f, f). \quad (3.75)$$

Assumindo que os fatores  $\frac{\bar{t}}{\tau}$  e  $\frac{l}{L}$  são da mesma ordem de grandeza e que o termo de

força é da mesma ordem dos termos à esquerda [Cercignani, 1990], tem-se

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathcal{D}f = \frac{1}{\epsilon} J(f, f), \quad (3.76)$$

onde o parâmetro  $\epsilon$ , proporcional ao número de Knudsen ( $Kn = l/L$ ), servirá para identificar a ordem de grandeza relativa dos termos das séries utilizadas no desenvolvimento do método. A função distribuição é aproximada pela expansão

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \epsilon^3 f^{(3)} + \dots, \quad (3.77)$$

sujeita às restrições

$$\int f^{(0)} d\mathbf{c} = n, \quad (3.78)$$

$$\frac{1}{n} \int f^{(0)} \mathbf{c} d\mathbf{c} = \mathbf{u}, \quad (3.79)$$

$$\frac{1}{n} \int f^{(0)} \frac{m}{D} \mathbf{C}^2 d\mathbf{c} = kT, \quad (3.80)$$

$$\int f^{(l)} \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ \mathbf{c} \\ c^2 \end{array} \right\} d\mathbf{c} = 0, \quad (\forall l \neq 0). \quad (3.81)$$

Como foi assumido no começo, a função distribuição depende do tempo através dos momentos hidrodinâmicos e suas derivadas espaciais. Assim,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u_\alpha} \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (3.82)$$

$$\frac{\partial f}{\partial X} = \left( \frac{\partial f^{(0)}}{\partial X} + \epsilon \frac{\partial f^{(1)}}{\partial X} + \dots \right), \quad X = (\rho, u_\alpha, T). \quad (3.83)$$

Substituindo  $f$  na equação de transporte de Boltzmann, obtém-se as seguintes equações de transferência para a massa, quantidade de movimento e energia:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} = 0, \quad (3.84)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) = \rho F_\alpha - \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon^l \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}^{(l)}}{\partial x_\beta}, \quad (3.85)$$

$$\rho \left( \frac{\partial kT}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial kT}{\partial x_\beta} \right) = -\frac{2}{D} \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon^l \left( \frac{\partial q_\alpha^{(l)}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \Pi_{\alpha\beta}^{(l)} \right), \quad (3.86)$$

onde

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(l)} = m \int f^{(l)} C_\alpha C_\beta \, \mathbf{dc} \quad \text{e} \quad q_\alpha^{(l)} = \frac{m}{2} \int f^{(l)} C_\alpha C^2 \, \mathbf{dc}. \quad (3.87)$$

Para agrupar os termos na expansão de forma que a aproximação de ordem ( $n$ ) dependa unicamente de aproximações de ordem inferior e eliminar a dependência entre as derivadas temporais da velocidade e da temperatura e os fluxos  $\Pi_{\alpha\beta}$  e  $q_\alpha$ , que só poderiam ser calculados quando  $f$  fosse conhecida, define-se o operador  $\frac{\partial}{\partial t}$  como a série infinita de operadores

$$\frac{\partial}{\partial t} \equiv \frac{\partial_0}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial_1}{\partial t} + \epsilon^2 \frac{\partial_2}{\partial t} + \dots, \quad (3.88)$$

que aplicado à expansão de  $f$ ,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{\partial_0}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial_1}{\partial t} + \epsilon^2 \frac{\partial_2}{\partial t} + \dots \right) (f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots), \quad (3.89)$$

conduz a um conjunto de equações, sujeitas a:

$$\frac{\partial_0 \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} \quad \text{e} \quad \frac{\partial_l \rho}{\partial t} = 0 \quad (l > 0), \quad (3.90)$$

$$\frac{\partial_0 u_\alpha}{\partial t} = -u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + F_\alpha - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}^{(0)}}{\partial x_\beta} \quad \text{e} \quad \frac{\partial_l u_\alpha}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}^{(l)}}{\partial x_\beta} \quad (l > 0), \quad (3.91)$$

$$\frac{\partial_0 kT}{\partial t} = -u_\beta \frac{\partial kT}{\partial x_\beta} - \frac{2}{D} \frac{1}{\rho} \frac{\partial q_\alpha^{(0)}}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{D} \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)}, \quad (3.92)$$

$$\frac{\partial_l kT}{\partial t} = -\frac{2}{D} \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial q_\alpha^{(l)}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \Pi_{\alpha\beta}^{(l)} \right) \quad (l > 0).$$

O termo de colisão definido na equação (3.73) pode ser escrito como:

$$\frac{1}{\epsilon} J(f, f) = \frac{1}{\epsilon} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \epsilon^{m+l} J(f^{(l)}, f^{(m)}), \quad (3.93)$$

$$J^{(l)}(f^{(0)}, f^{(1)}, \dots, f^{(l)}) \equiv \sum_{\substack{r,s \\ r+s=l}} J(f^{(r)}, f^{(s)}), \quad (3.94)$$

e, substituindo as expressões anteriores na equação de transporte de Boltzmann (3.71), obtém-se

$$\left[ \left( \frac{\partial_0}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial_1}{\partial t} + \epsilon^2 \frac{\partial_2}{\partial t} + \dots \right) + \mathcal{D} \right] (f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots) - \frac{1}{\epsilon} [J^{(0)}(f^{(0)}) + \epsilon J^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) + \epsilon^2 J^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) + \dots] = 0. \quad (3.95)$$



onde os parâmetros  $\epsilon_{aa}$  e  $\epsilon_{ab}$  representam a relação entre as frequências de colisão de moléculas da espécie  $a$  com moléculas das espécies  $a$  e  $b$ , respectivamente, e uma escala de tempo característica das variações das propriedades macroscópicas. Dependendo da relação entre as massas dos componentes e das concentrações, um dos operadores de colisão será dominante e seu efeito considerado como de ordem zero na análise por aproximações sucessivas. Tal é o caso de misturas de gases com massas muito diferentes. Por outro lado, se as massas e as concentrações são similares, os parâmetros possuem a mesma ordem de grandeza,  $\epsilon_{aa} \sim \epsilon_{ab} \sim \epsilon$ , como é assumido no método de Chapman-Enskog convencional. Neste trabalho estamos interessados apenas na modelagem de fenômenos com misturas com diferenças de massas moleculares de uma ordem de grandeza ou inferiores, em condições moderadas, pelo qual o método de Chapman-Enskog será utilizado na derivação dos coeficientes de transporte.

Escrevendo as funções distribuição em expansões análogas à Eq. (3.77) e o operador derivada temporal na forma da Eq. (3.88), obtém-se, nas duas primeiras ordens,

$$(0) \quad J^{(0)}(f^{a(0)}, f^{a(0)}) + J^{(0)}(f^{a(0)}, f^{b(0)}) = 0$$

$$(1) \quad \frac{\partial_0 f^{a(0)}}{\partial t} + \mathcal{D}f^{a(0)} = J^{(1)}(f^{a(0)}, f^{a(1)}) \quad (3.100)$$

$$+ J^{(1)}(f^{a(1)}, f^{a(0)}) + J^{(1)}(f^{a(0)}, f^{b(1)}) + J^{(1)}(f^{a(1)}, f^{b(0)}).$$

A solução da equação de ordem zero é a distribuição Maxwelliana com as propriedades locais da mistura, ou seja,

$$\int f^{a(0)} d\mathbf{c} = \int f^a d\mathbf{c} = n_a, \quad (3.101)$$

$$\sum_a \int f^{a(0)} m_a \mathbf{c} d\mathbf{c} = \sum_a \int f^a m_a \mathbf{c} d\mathbf{c} = \rho \mathbf{u}, \quad (3.102)$$

$$\sum_a \int f^{a(0)} m_a C^2 d\mathbf{c} = \sum_a \int f^a m_a C^2 d\mathbf{c} = DnkT, \quad (3.103)$$

$$\int f^{a(l)} d\mathbf{c} = 0 \quad (\forall l \neq 0), \quad (3.104)$$

$$\sum_a \int f^{a(l)} \left\{ \begin{array}{c} m_a \mathbf{c} \\ m_a C^2 \end{array} \right\} d\mathbf{c} = 0 \quad (\forall l \neq 0). \quad (3.105)$$

De maneira análoga a como foram obtidas as equações de balanço para o gás simples, é possível obter um conjunto de equações na forma das Eqs. (3.56), (3.51) e (3.53), onde

$$j_{a\alpha} = \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon^l \int m_a f^{a(l)} C_\alpha d\mathbf{c}, \quad (3.106)$$

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon^l \sum_a \int m_a f^{a(l)} C_\alpha C_\beta d\mathbf{c}, \quad (3.107)$$

$$q_\alpha = \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon^l \sum_a \int f^a \frac{1}{2} m_a C^2 C_\alpha d\mathbf{c}. \quad (3.108)$$

Usando a decomposição do operador derivada temporal, Eq. (3.88), e estas restrições, obtém-se uma expressão para o termo advectivo na equação de primeira ordem de Knudsen, dado por

$$\frac{\partial_0 f^{a(0)}}{\partial t} + \mathcal{D} f^{a(0)} = f^{(0)} \left[ \left( \frac{mC^2}{2kT} - \frac{D+2}{2} \right) C_\alpha \frac{\partial \ln T}{\partial x_\alpha} + \frac{m}{kT} \left( C_\alpha C_\beta - \frac{1}{D} C^2 \delta_{\alpha\beta} \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{n}{n_a} d_{a\alpha} \right], \quad (3.109)$$

onde  $p = nkT$  e o vetor força difusiva é

$$d_{a\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left( \frac{n_a}{n} \right) + \left( \frac{n_a}{n} - \frac{\rho_a}{\rho} \right) \frac{\partial \ln p}{\partial x_\alpha}. \quad (3.110)$$

As equações integrais (3.100) podem ser resolvidas usando técnicas similares às empregadas no caso do gás simples. O resultado deste processo são as equações de balanço de massa, de quantidade de movimento e de energia, com seus coeficientes de transporte [Chapman e Cowling, 1970, Ferziger e Kaper, 1972].

### 3.5 Modelo de colisão BGK

Dada a enorme dificuldade introduzida na solução da equação de transporte de Boltzmann por causa do operador de colisão integral, foram desenvolvidos alguns modelos cinéticos relativamente simples para este operador. Estes modelos devem possuir as características mais relevantes do operador de colisão integral, tais como, a conservação dos invariantes de colisão e, em alguns casos, a existência de um teorema  $H$ . O mais conhecido dos modelos é o modelo de colisão BGK, proposto por Bhatnagar, Gross, e Krook [1954]. O operador de colisão BGK expressa a mudança líquida no número de partículas como sendo proporcional à frequência de colisão e à diferença entre a função distribuição e a distribuição Maxwelliana local. Para derivar o modelo, o operador de colisão é dividido nas integrais  $\Upsilon^-$  e  $\Upsilon^+$ , definidas na seção 3.1. Na primeira delas, a função distribuição das partículas alvo não depende do processo de integração e, conhecendo a lei de interação entre as moléculas, a frequência de colisão poderia ser calculada. Assim,

$$-f \int f_1 g b db d\epsilon d\mathbf{c}_1 = -fn\nu, \quad (3.111)$$

onde  $\nu$  é uma função que, em geral, depende da temperatura.

O modelo assume que as moléculas que entram no elemento diferencial de volume no espaço de fase o fazem com uma distribuição Maxwelliana com os valores locais da densidade, velocidade e temperatura, de modo a satisfazer a conservação dos invariantes de colisão. O resultado da segunda integral é então substituído pela frequência de colisão, multiplicada pela distribuição Maxwelliana local

$$\int f' f'_1 g b db d\epsilon d\mathbf{c}_1 \approx n\nu f^{(M)}, \quad (3.112)$$

para obter o modelo

$$J_{BGK} = n\nu (f^{(M)} - f). \quad (3.113)$$

De acordo com as teorias dos fenômenos de transporte baseadas no livre percurso médio e de cálculos aproximados para várias leis de interação,  $\nu$  é uma função da temperatura  $T$  e, em particular, é constante para potenciais de interação de Maxwell, ou seja, aquele com  $\Phi \sim \frac{1}{r^4}$ , sendo  $r$  a separação entre as moléculas [Ferziger e Kaper, 1972, Morse, 1963]. Levando-se em conta que em alguns problemas os gradientes de densidade de número de partículas e de temperatura não são apreciáveis, a frequência de colisão  $n\nu$  pode ser assumida como constante.

O modelo BGK possui um teorema  $H$  local, facilmente verificável. A condição

$$\int J_{BGK} \ln f d\mathbf{c} = n\nu \int \ln \frac{f}{f^{(M)}} (f^{(M)} - f) d\mathbf{c} + \int J_{BGK} \ln f^{(M)} d\mathbf{c} \leq 0, \quad (3.114)$$

é satisfeita sempre dado que a segunda integral é nula, posto que  $\ln f^{(M)}$  é uma combinação dos invariantes de colisão e a expressão  $\ln \frac{x}{y}(y - x)$  é não-positiva e nula apenas quando  $x = y$ .

O método descrito na seção 3.4 se aplica igualmente às equações de Boltzmann com modelos cinéticos. No caso do modelo BGK, a solução da equação de primeira ordem em Knudsen é consideravelmente simplificada, já que na aproximação  $f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)}$  a correção de primeira ordem pode ser escrita explicitamente como

$$f^{(1)} = f^{(0)} \left\{ 1 - \frac{1}{n\nu} \left[ C_\alpha \left( \frac{mC^2}{2kT} - \frac{D+2}{2} \right) \frac{\partial \ln T}{\partial x_\alpha} + \frac{m}{kT} \left( C_\alpha C_\beta - \frac{1}{D} C^2 \delta_{\alpha\beta} \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right] \right\}. \quad (3.115)$$

Usando esta expressão para calcular o tensor pressão e o vetor fluxo não-convectivo de energia, de acordo com as suas definições, tem-se

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t) = \int m C_\alpha C_\beta f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} = p \delta_{\alpha\beta} - \frac{kT}{\nu} \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{D} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (3.116)$$

$$q_\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int m C^2 C_\alpha f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} = -\frac{(D+2) k^2 T}{2} \frac{\partial T}{m\nu \partial x_\alpha}, \quad (3.117)$$

respectivamente, onde os coeficientes de transporte, viscosidade e condutividade térmica, estão dados por

$$\eta = \frac{kT}{\nu}, \quad (3.118)$$

$$\kappa = \frac{(D+2) k^2 T}{2 m\nu}. \quad (3.119)$$

O modelo BGK fornece resultados aproximados, adequados para muitos tipos de problemas, embora o valor da constante  $\nu$ , ajustado com base em dados experimentais, não permita a escolha independente da viscosidade e da condutividade térmica. Esta característica faz com que o modelo possua um número de Prandtl,  $Pr = \eta c_p / \kappa = 1$ , fixo e diferente daquele obtido através da análise de Chapman-Enskog para o operador de colisão original;  $Pr = 2/3$ . Apesar destes inconvenientes e de ser altamente não-linear, por causa da dependência entre a função  $f^{(M)}$  e os momentos de  $f$ , o modelo BGK é muito utilizado, devido a que facilita a solução analítica de problemas em configurações simples e também constitui a base da grande maioria das abordagens numéricas para solução da equação de transporte de Boltzmann.

Além do BGK existem outros modelos cinéticos mais elaborados, baseados na linearização da equação de Boltzmann, como o proposto por Gross e Jackson [1959]

### 3.6 Modelos cinéticos para misturas

A modelagem de processos dinâmicos em misturas é consideravelmente mais complicada que a de gases simples, pelo fato de envolver diversos processos de equilíbrio acontecendo simultaneamente. Estes processos podem ser classificados em dois tipos: a aproximação da função distribuição de cada espécie a uma distribuição Maxwelliana local e o equilíbrio das propriedades macroscópicas de todas as espécies.

Dependendo da relação entre as massas, os processos podem acontecer em escalas de tempo muito diferentes, começando pela Maxwellização da espécie mais leve e, em determinadas circunstâncias, podem não acontecer completamente, como no caso de misturas de íons e elétrons. Uma estimativa da escala da Maxwellização é dada pelo tempo requerido para tornar isotrópico o tensor tensão ou nulo o vetor fluxo de calor de cada espécie. Já a escala representativa do processo de equilíbrio pode ser estimada através do problema de relaxação homogênea, é dizer, a diminuição com o tempo da diferença de velocidades e temperaturas, numa mistura homogênea. A maioria dos modelos cinéticos para misturas se baseia na descrição qualitativa destes processos.

O primeiro modelo para misturas foi proposto por Gross e Krook [1956]. Neste modelo, cada integral de colisão é aproximada por um operador BGK com uma função distribuição

Maxwelliana

$$f^{a(M)}(n_{ab}, \mathbf{u}_{ab}, T_{ab}) = n_{ab} \left( \frac{m_a}{2\pi k T_{ab}} \right)^{D/2} \exp \left( -\frac{m_a (\mathbf{c} - \mathbf{u}_{ab})^2}{2k T_{ab}} \right), \quad (3.120)$$

cujos parâmetros macroscópicos, que por compatibilidade com a literatura são chamados de densidade, velocidade e temperatura, são obtidos como combinações lineares das propriedades de cada espécie, restritas pelas equações de conservação e a solução do problema de relaxação homogênea, quando  $t \rightarrow \infty$ . A equação para a espécie  $a$  é

$$\frac{\partial f^a}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f^a = J_{BGK}^{aa} + J_{BGK}^{ab}, \quad (3.121)$$

com

$$J_{BGK}^{aa} = n_a \nu_{aa} (f^{a(M)}(n_{aa}, \mathbf{u}_{aa}, T_{aa}) - f^a) \quad \text{e} \quad J_{BGK}^{ab} = n_b \nu_{ab} (f^{a(M)}(n_{ab}, \mathbf{u}_{ab}, T_{ab}) - f^a). \quad (3.122)$$

Para satisfazer a equação de conservação da massa, o número de colisões entre espécies deve ser igual e portanto  $\nu_{ab} = \nu_{ba}$ . Os parâmetros do operador de colisão entre moléculas da mesma espécie correspondem às propriedades macroscópicas dessa espécie,  $n_{aa} = n_a$ ,  $\mathbf{u}_{aa} = \mathbf{u}_a$  e  $T_{aa} = T_a$ . A velocidade  $\mathbf{u}_{ab}$  é a media das velocidades das espécies, ponderadas pelas massas moleculares reduzidas,

$$\mathbf{u}_{ab} = \mu_a \mathbf{u}_a + \mu_b \mathbf{u}_b, \quad (3.123)$$

a densidade de número de moléculas  $n_{ab}$  é a mesma da espécie  $a$  e a temperatura  $T_{ab}$  é

$$T_{ab} = T_a + \mu_a \mu_b \left[ 2\alpha_{ab} (T_b - T_a) + \alpha_{ab} (2 - \alpha_{ab}) \frac{\mu_b (m_a + m_b)}{Dk} (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)^2 \right], \quad (3.124)$$

onde  $\mu_a = m_a / (m_a + m_b)$  e  $\alpha_{ab}$  é um parâmetro livre.

Posteriormente, Sirovich [1962] propôs um modelo *linearizado* para moléculas de Maxwell, com cinco parâmetros ajustáveis, da forma

$$\begin{aligned} J_{SIR}^a &= \alpha_{a1} (f^{a(M)} - f^a) + \alpha_2 \frac{f^{a(M)}}{n_a k T_a} (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b) \cdot \mathbf{C}_a \\ &+ \alpha_3 \frac{f^{a(M)}}{n_a k T_a} \left( \frac{m_a}{2kT} C_a^2 - \frac{D}{2} \right) (T_a - T_b) + \alpha_4 \frac{f^{a(M)}}{n_a k T_a} \left( \frac{m_a}{2kT} C_a^2 - \frac{D}{2} \right) (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)^2, \end{aligned} \quad (3.125)$$

onde  $f^{a(M)} = f^{a(M)}(n_a, \mathbf{u}_a, T_a)$  e os parâmetros  $\alpha_i$  são funções das densidades e das temperaturas.

O tensor tensão e o fluxo de calor foram determinados pelo autor usando um pro-

cedimento iterativo, diferente da expansão de Chapman-Enskog. Suas expressões são as seguintes:

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta} = p\delta_{\alpha\beta} - kT \left( \frac{n_a}{\alpha_{a1}} + \frac{n_b}{\alpha_{b1}} \right) \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{D} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right) \\ - \frac{2\alpha_2}{\rho} \left( \frac{\rho_a}{\alpha_{a1}} + \frac{\rho_b}{\alpha_{b1}} \right) \left( \Delta u_\alpha \Delta u_\beta - \frac{1}{D} \Delta u^2 \right), \end{aligned} \quad (3.126)$$

$$q_\alpha = -\frac{(D+2)}{2} k^2 T \left( \frac{\rho_a}{\alpha_{a1}} + \frac{\rho_b}{\alpha_{b1}} \right) + -\frac{(D+2)}{2} kT \left( \frac{n_a}{m_a \alpha_{a1}} + \frac{n_b}{m_b \alpha_{b1}} \right) \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} + \mathcal{O}(\Delta u^3), \quad (3.127)$$

onde  $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b$ .

Independentemente, Morse [1964] e Hamel [1965] propuseram um modelo do tipo BGK no qual, além das equações de conservação, foi estabelecido que as transferências de quantidade de movimento e energia entre espécies sejam as mesmas que as das moléculas de Maxwell ou então, o que é equivalente, que a solução ao problema de relaxação homogênea seja igual ao das moléculas de Maxwell. Dado que o modelo reproduz exatamente o problema de relaxação homogênea, pode considerar-se como uma aproximação razoável ao processo de equilíbrio, enquanto que sua descrição do processo de Maxwellização é apenas qualitativa porque, como todos os modelos de tipo BGK, a aproximação de todos os momentos àqueles da distribuição Maxwelliana acontece a uma taxa regulada por um único parâmetro.

A forma geral das equações é a mesma do modelo de Gross e Krook, com apenas a *temperatura* na distribuição Maxwelliana do operador de colisão cruzado diferente e dada por

$$T_{ab} = T_a + \mu_a \mu_b \left[ 2(T_b - T_a) + \frac{\mu_b (m_a + m_b)}{Dk} (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)^2 \right]. \quad (3.128)$$

Hamel [1965] discute as possíveis linearizações do modelo nos casos de misturas quase homogêneas e muito próximas do equilíbrio global, misturas em que os componentes têm propriedades macroscópicas similares e misturas de moléculas com massas moleculares muito diferentes. Em particular, a segunda das linearizações anteriores é equivalente ao modelo de Sirovich, desde que os parâmetros  $\alpha_i$  na Eq. (3.125) não sejam independentes.

Neste trabalho utilizou-se uma outra expressão, que permite realizar uma análise convencional de Chapman-Enskog do modelo BGK, na qual a aproximação de ordem zero à função distribuição de cada espécie é uma distribuição Maxwelliana com as propriedades locais: densidade da espécie, velocidade baricêntrica e temperatura da mistura. Esta aproximação se aplica às misturas cujos componentes tenham relações de massas moderadas e momentos macroscópicos próximos dos valores locais da mistura.

O operador de colisão  $J^{ab}$  é escrito como:

$$J_{BGKL}^{ab} = n_b \nu_{ab} (f^{a(M)} - f^a) + n_b \nu_{ab} f^{a(M)} \left[ \frac{m_a}{kT} (c_\alpha - u_\alpha) (u_{ab\alpha} - u_\alpha) + \frac{T_{ab} - T}{T} \left( \frac{m_a}{2kT} (c_\alpha - u_\alpha)^2 - \frac{D}{2} \right) \right] \quad (3.129)$$

com  $f^{a(M)} = f^{a(M)}(n_a, \mathbf{u}, T)$ . O operador  $J^{aa}$  é expandido de forma análoga.

Seguindo o procedimento apresentado na seção (3.4) obtiveram-se as relações constitutivas da difusão de massa, quantidade de movimento e calor, com coeficientes de transporte; coeficiente de difusão binário, viscosidade da mistura e condutividade da mistura, dadas por:

$$\mathcal{D}_{ab} = \frac{kT}{n(m_a + m_b)\mu_a\mu_b\nu_{ab}}, \quad (3.130)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t) = p\delta_{\alpha\beta} - kT \left( \frac{n_a}{n_a\nu_{aa} + n_b\nu_{ab}} + \frac{n_b}{n_b\nu_{bb} + n_a\nu_{ba}} \right) \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{D} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (3.131)$$

$$q_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{(D+2)}{2} k^2 T \left( \frac{n_a}{m_a(n_a\nu_{aa} + n_b\nu_{ab})} + \frac{n_b}{m_b(n_b\nu_{bb} + n_a\nu_{ba})} \right) \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} + \frac{(D+2)}{2} kT \left( \frac{j_{a\alpha}}{m_a} + \frac{j_{b\alpha}}{m_b} \right). \quad (3.132)$$

Por serem modelos para moléculas de Maxwell, nenhum dos anteriores possui o termo de difusão de massa por gradiente de temperatura ou difusão térmica. Esta aproximação, conhecida como diagonal, é suficiente dado que os efeitos do gradiente de temperatura no transporte de massa só são consideráveis em condições extremas [Goldman e Sirovich, 1967].

Os modelos BGK para misturas e suas linearizações possuem as mesmas limitações que o modelo para um fluido simples no que se refere a dependência entre a viscosidade e a condutividade térmica, o que se traduz num número de Prandtl fixo. Além disso, estes modelos não seguem o princípio da indiferenciabilidade, ou seja, quando as massas  $m_a$  dos componentes e suas seções de choque forem todas iguais, a somas das distribuições devem obedecer a equação de transporte para uma única espécie. Este fato é facilmente verificável na implementação numérica, por exemplo, observando a evolução de um sistema binário de moléculas mecanicamente idênticas com as mesmas condições iniciais, mas com distribuição espacial não-homogênea.

Outros modelos para misturas baseados no operador de colisão BGK foram propostos

por Sofonea e Sekerka [2001]. Nestes modelos, o efeito de todas as colisões é aproximado por um operador BGK, cuja distribuição Maxwelliana usa uma temperatura constante e a velocidade hidrodinâmica da mistura como parâmetros. Por suas limitações no ajuste das propriedades de transporte de cada espécie e a ausência de efeitos térmicos, estes modelos não são considerados nos capítulos seguintes.

# Capítulo 4

## Equação de Boltzmann com velocidades discretas

Neste capítulo é apresentado um processo de derivação da equação de Boltzmann com velocidades discretas (EBVD) ou simplesmente equação de Boltzmann discreta, ou seja, uma aproximação à equação de transporte de Boltzmann, com um modelo para o operador de colisão, composta por um conjunto de equações diferenciais parciais nas variáveis  $f_i(\mathbf{x}, t)$ , cujos momentos macroscópicos são idênticos àqueles da função distribuição original, até uma determinada ordem [Wolf-Gladrow, 2000].

Para este propósito irá explorar-se o fato, apontado por Grad [1949b], de que a solução da equação de Boltzmann  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$  é equivalente ao conjunto infinito formado por seus momentos macroscópicos. A função distribuição é expandida numa série infinita de polinômios tensoriais de Hermite, tendo como função peso uma distribuição de equilíbrio global [Shan e He, 1998, Philippi et al., 2006]. Esta série pode ser truncada, sem afetar os momentos macroscópicos de baixa ordem, para representar apenas a hidrodinâmica. Para este efeito, a escolha da ordem de truncamento da série é feita de acordo com aquela requerida, na análise de Chapman-Enskog, para obter as equações de Navier-Stokes-Fourier. Os coeficientes da expansão correspondem aos momentos macroscópicos de  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$  e podem ser calculados exatamente através de uma integração por quadratura. Desta forma, a evolução da aproximação para  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$  em polinômios de Hermite, truncada na ordem apropriada e avaliada no conjunto finito de abscissas, dadas pela solução do problema de quadratura, é equivalente às equações hidrodinâmicas.

A derivação apresentada não está limitada ao regime hidrodinâmico e pode ser utilizada para resolver os regimes de escoamento livre e de transição, desde que as restrições apropriadas sejam empregadas para determinar a ordem de precisão do problema de quadratura.

Para simplificar a análise, na equação de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f = J, \quad (4.1)$$

o operador de advecção é adimensionalizado usando como referência o comprimento  $l$  e o tempo  $\bar{t}$ , tais que satisfaçam a relação  $l/\bar{t} = \bar{c}$ , onde  $\bar{c}$  é a velocidade molecular de referência definida, em função da temperatura de referência  $T_0$  e da massa molecular de referência  $m_0$ , como  $\bar{c} = (kT_0/m_0)^{1/2}$ . A função distribuição por sua vez é adimensionalizada usando o fator  $n_0\bar{c}^{(-D)}$ , onde  $n_0$  é a densidade de número de partículas de referência. O operador de colisão  $J$  será substituído por um modelo cinético, do tipo BGK, proporcional ao fator  $(f^{(M)} - f)$ .

## 4.1 Expansão da equação de Boltzmann em polinômios de Hermite

Como foi proposto por Grad [1949b], a função distribuição pode ser desenvolvida como uma série infinita de polinômios tensoriais de Hermite. Os polinômios tensoriais de Hermite formam uma base ortogonal do espaço de Hilbert, com o produto interno definido como

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\mathbf{c}) fg \, d\mathbf{c}, \quad (4.2)$$

onde  $\omega(\mathbf{c})$  é a função peso

$$\omega(\mathbf{c}) = \frac{e^{-\frac{c^2}{2}}}{(2\pi)^{D/2}}. \quad (4.3)$$

Os polinômios tensoriais de Hermite são definidos através da fórmula

$$\mathcal{H}^{(n)} = \frac{(-1)^n}{\omega(\mathbf{c})} \nabla^{(n)} \omega(\mathbf{c}), \quad (4.4)$$

onde  $(n)$  é a ordem do tensor e  $\nabla^{(n)} \equiv \frac{\partial^n}{\partial c_{\alpha 1} \partial c_{\alpha 2} \dots \partial c_{\alpha n}}$ . Os cinco primeiros polinômios tensoriais são:

$$\mathcal{H}^{(0)} = 1, \quad (4.5a)$$

$$\mathcal{H}^{(1)} = \mathbf{c}, \quad (4.5b)$$

$$\mathcal{H}^{(2)} = (\mathbf{c}^2 - \boldsymbol{\delta}), \quad (4.5c)$$

$$\mathcal{H}^{(3)} = (\mathbf{c}^3 - \mathbf{c}\boldsymbol{\delta}), \quad (4.5d)$$

$$\mathcal{H}^{(4)} = (\mathbf{c}^4 - \mathbf{c}^2\boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\delta}^2), \quad (4.5e)$$

$$\mathcal{H}^{(5)} = (\mathbf{c}^5 - \mathbf{c}^3\boldsymbol{\delta} + \mathbf{c}\boldsymbol{\delta}^2), \quad (4.5f)$$

onde, por comodidade, foi utilizada a notação sugerida por Grad [1949a]. Nesta notação compacta, o tensor delta de Kronecker é representado em negrito sem subíndices e o tensor  $\boldsymbol{\delta}^s$ , de ordem  $2s$ , está definido como a soma dos produtos de  $s$   $\boldsymbol{\delta}$ s, que resultam das

permutações dos  $2s$  subíndices. Esta soma contém  $\frac{(2s)!}{2^s s!}$  elementos. Assim, por exemplo, o tensor  $\boldsymbol{\delta}^2$  corresponde à soma  $\boldsymbol{\delta}^2 = (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})$ .

A  $n$ -ésima potência de um vetor,  $\mathbf{c}^n$ , representa o tensor  $c_{\alpha_1}c_{\alpha_2}\cdots c_{\alpha_n}$ , e o produto de tensores  $\mathbf{c}^r \boldsymbol{\delta}^s$  representa o tensor de ordem  $r+2s$ , formado pela soma de  $\frac{(r+2s)!}{2^s r! s!}$  elementos, que correspondem ao produto de  $r$   $\mathbf{c}$ s e  $s$   $\boldsymbol{\delta}$ s, para todas as permutações de subíndices. Por exemplo, o termo  $\mathbf{c}^2 \boldsymbol{\delta}$ , que aparece no polinômio tensorial de quarta ordem, corresponde à soma de seis termos;  $\mathbf{c}^2 \boldsymbol{\delta} = (c_\delta c_\alpha \delta_{\gamma\beta} + c_\delta c_\beta \delta_{\alpha\gamma} + c_\delta c_\gamma \delta_{\alpha\beta} + c_\beta c_\alpha \delta_{\gamma\delta} + c_\gamma c_\beta \delta_{\alpha\delta} + c_\alpha c_\gamma \delta_{\beta\delta})$ . Em geral, a multiplicação de dois tensores  $\mathbf{ab}$  representa a soma de todas as possíveis permutações de seus índices.

Empregando a velocidade molecular como variável na expansão polinomial [Shan e He, 1998, Philippi et al., 2006], a função distribuição pode ser escrita como

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) = \omega(\mathbf{c}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\mathbf{c}), \quad (4.6)$$

onde o produto de tensores  $\mathbf{a}^{(n)} \mathcal{H}^{(n)}$  é uma contração em todos os subíndices. Os coeficientes da série podem ser calculados, usando a ortogonalidade dos tensores, como

$$a_{r_n}^{(n)} = \int f \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad (4.7)$$

onde  $r_n$  representa a seqüência de índices  $r_n = \{\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\}$ .

Esta expansão é análoga à empregada por Grad [1949b], com a diferença de que a apresentada aqui é feita em torno da distribuição de equilíbrio global, com velocidade hidrodinâmica e desvio da energia interna nulos. A conveniência desta escolha com relação à discretização do espaço de velocidades será discutida mais adiante.

A descrição hidrodinâmica do comportamento de um gás precisa da representação exata dos coeficientes de baixa ordem, que contém as grandezas densidade e velocidade hidrodinâmica

$$m\mathbf{a}^{(0)} = \rho, \quad (4.8)$$

$$m\mathbf{a}^{(1)} = \rho\mathbf{u}, \quad (4.9)$$

a energia interna, calculada a partir do traço do tensor pressão  $\mathbf{\Pi}$ ,

$$m\mathbf{a}^{(2)} = \mathbf{\Pi} + \rho(\mathbf{u}^2 - \boldsymbol{\delta}), \quad (4.10)$$

e o vetor fluxo de calor, que corresponde à contração do tensor de terceira ordem  $\mathbf{Q}$ ,

$$m\mathbf{a}^{(3)} = \mathbf{Q} + \rho(\mathbf{u}^3 - \mathbf{u}\boldsymbol{\delta}) + \mathbf{u}\mathbf{\Pi}. \quad (4.11)$$

Além disso, o truncamento da série numa ordem  $N$ , não afeta diretamente os momentos de ordem inferior, por tanto, para obter uma representação adequada da termo-

hidrodinâmica é suficiente manter a expansão até a ordem requerida na análise de Chapman-Enskog.

As equações constitutivas, que relacionam o tensor tensão e o vetor fluxo de calor com as derivadas dos momentos macroscópicos de baixa ordem, nas equações de Navier-Stokes-Fourier, são o resultado das contribuições da correção de primeira ordem em Knudsen na expansão Eq. (3.77). Esta correção pode ser calculada explicitamente no caso do modelo BGK, de acordo com a Eq. (3.96), como

$$f^{(1)} = -\frac{1}{n\nu} \left( \frac{\partial_0 f^{(0)}}{\partial t} + c_\gamma \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_\gamma} \right), \quad (4.12)$$

e suas contribuições ao tensor pressão e ao vetor fluxo de calor como

$$\left\{ \begin{array}{c} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \\ u_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} + q_\alpha^{(1)} \end{array} \right\} = \int m f^{(1)} \left\{ \begin{array}{c} c_\alpha c_\beta \\ \frac{1}{2} c^2 c_\alpha \end{array} \right\} d\mathbf{c} = \\ -\frac{1}{n\nu} \left( \frac{\partial_0}{\partial t} \int m f^{(0)} \left\{ \begin{array}{c} c_\alpha c_\beta \\ \frac{1}{2} c^2 c_\alpha \end{array} \right\} d\mathbf{c} + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \int m f^{(0)} \left\{ \begin{array}{c} c_\alpha c_\beta c_\gamma \\ \frac{1}{2} c^2 c_\alpha c_\gamma \end{array} \right\} d\mathbf{c} \right). \quad (4.13)$$

Da expressão anterior se conclui que, para obter as relações constitutivas consistentes é necessário manter na expansão os termos dos polinômios de Hermite de ordem  $N \leq 4$ , no caso do operador de colisão BGK.

Em modelos que utilizam o operador de colisão linearizado e o procedimento de dedução de Gross e Jackson [1959], termos adicionais, envolvendo a velocidade molecular, aparecem no lado direito da Eq. (4.12) e expansões truncadas em ordens superiores são necessárias.

A função distribuição Maxwelliana local presente no operador de colisão, em variáveis adimensionais, tem a forma

$$f^{(M)} = \frac{n}{(2\pi)^{D/2}} \left( \frac{1}{\theta + 1} \right)^{D/2} \exp \left( -\frac{1}{2} \frac{(\mathbf{c} - \mathbf{u})^2}{(\theta + 1)} \right), \quad (4.14)$$

onde

$$\theta = \frac{T}{T_0} \frac{m_0}{m} - 1 \quad (4.15)$$

é o desvio da energia interna do seu valor de referência, definido de acordo com a Eq. (3.37) como  $\varepsilon_0 \equiv \frac{D}{2} \frac{kT_0}{m_0}$ . Esta função é um caso particular de  $f$  e pode ser desenvolvida de acordo com as Eqs. (4.6) e (4.7). Os coeficientes desta série, em notação abreviada, até quinta ordem, são:

$$\mathbf{a}^{(0)(M)} = n, \quad (4.16a)$$

$$\mathbf{a}^{(1)(M)} = n\mathbf{u}, \quad (4.16b)$$

$$\mathbf{a}^{(2)(M)} = n(\mathbf{u}^2 + \theta\boldsymbol{\delta}), \quad (4.16c)$$

$$\mathbf{a}^{(3)(M)} = n(\mathbf{u}^3 + \theta\mathbf{u}\boldsymbol{\delta}), \quad (4.16d)$$

$$\mathbf{a}^{(4)(M)} = n(\mathbf{u}^4 + \theta\mathbf{u}^2\boldsymbol{\delta} + \theta^2\boldsymbol{\delta}^2), \quad (4.16e)$$

$$\mathbf{a}^{(5)(M)} = n(\mathbf{u}^5 + \theta\mathbf{u}^3\boldsymbol{\delta} + \theta^2\mathbf{u}\boldsymbol{\delta}^2). \quad (4.16f)$$

Desta forma, a aproximação à função distribuição Maxwelliana local, até quinta ordem, é

$$\begin{aligned} f^{(M)} = \omega(\mathbf{c})n \left\{ 1 + \mathbf{u} \cdot \mathbf{c} + \frac{1}{2} \left[ (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c})^2 - u^2 + \theta(c^2 - D) \right] \right. \\ + \frac{1}{6} \mathbf{u} \cdot \mathbf{c} \left[ (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c})^2 - 3u^2 + 3\theta(c^2 - 2 - D) \right] \\ + \frac{1}{24} \left[ (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c})^4 - 6(\mathbf{u} \cdot \mathbf{c})^2 u^2 + 3u^4 \right. \\ + 3\theta^2(D(D+2) - 2c^2(D+2) + c^4) \\ + 6\theta((\mathbf{u} \cdot \mathbf{c})^2(c^2 - D - 4) + u^2(D+2 - c^2)) \left. \right] \\ + \frac{1}{120} \mathbf{u} \cdot \mathbf{c} \left[ (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c})^4 + 15\theta^2 c^4 - 10(\mathbf{u} \cdot \mathbf{c})^2(\theta(D+6) + u^2) \right. \\ + 15(\theta^2(D+2)(D+4) + 2\theta u^2(D+4) + u^4) \\ \left. - 10\theta c^2(3(\theta(D+4) + u^2) - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c})^2) \right] \left. \right\}. \quad (4.17) \end{aligned}$$

## 4.2 Discretização do espaço de velocidades moleculares

Tendo uma representação aproximada da função distribuição, até ordem  $N$ , é possível estabelecer um conjunto de equações de balanço para os seus momentos. Os invariantes de colisão  $\psi$ , e em geral os tensores  $\mathbf{c}^n$ , que aparecem nas equações de Chapman-Enskog, fazem parte dos polinômios tensoriais de Hermite de ordem ( $n$ ). Substituindo a expansão truncada da função distribuição

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \approx \omega(\mathbf{c}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\mathbf{c}), \quad (4.18)$$

na Eq. (4.7) e, dado que os coeficientes  $a_{r_n}^{(n)}$  são independentes da velocidade molecular, uma condição suficiente para a representação dos momentos hidrodinâmicos é o cálculo exato do produto interno entre polinômios de Hermite até ordem  $N$ , através da quadratura

$$\int \omega(\mathbf{c}) \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\mathbf{c}) \mathcal{H}_{s_m}^{(m)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = \sum_i^b W_i \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\mathbf{c}_i) \mathcal{H}_{s_m}^{(m)}(\mathbf{c}_i), \quad (4.19)$$

onde  $b$  é o número de velocidades moleculares discretas e  $W_i = w_i \omega(\mathbf{c}_i)$ .

Devido à escolha da função distribuição de equilíbrio global como função peso na expansão em polinômios de Hermite, o conjunto de pesos e abscissas que formam a solução do problema de quadratura é independente do estado local do fluido, o que permite avaliar os momentos macroscópicos de gases com massas moleculares diferentes e campos de temperatura não-homogêneos, usando o mesmo conjunto de velocidades  $\mathbf{c}_i$ . Assim, o cálculo dos momentos da velocidade conclui a construção da equação de Boltzmann discreta, composta pelas  $b$  equações diferenciais parciais

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \nabla f_i = J_i, \quad (4.20)$$

onde  $f_i(\mathbf{x}, t) = W_i f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i, t)$ .

### 4.2.1 Quadraturas em redes cartesianas regulares

Existem vários métodos para a determinação das abscissas  $\mathbf{c}_i$  e dos pesos  $w_i$  para quadraturas em espaços de  $D$  dimensões [Stroud, 1971]. Em particular, são de interesse as quadraturas cujas abscissas são vetores que ligam um ponto aos vértices de uma rede cartesiana regular. Estas abscissas permitem a solução da equação de transporte de Boltzmann através de uma seqüência exata de *colisão e propagação*; base do método de Boltzmann para gases em rede (LBM), que será descrito no capítulo seguinte.

A quadratura gaussiana é um método de integração no qual é possível escolher as abscissas em que o integrando será avaliado, e os pesos correspondentes a estas abscissas, que permitem a representação exata da integral Eq. (4.19). Em uma dimensão, a solução da quadratura gaussiana para integrais de polinômios ortogonais é obtida através de uma teoria geral bem desenvolvida [Stroud, 1971]. A solução para integrais de polinômios ortogonais com a função peso, Eq. (4.3), é conhecida como fórmula de Gauss-Hermite. Estas fórmulas permitem o cálculo exato de integrais de polinômios ortogonais de grau  $2b - 1$  usando  $b$  pesos e abscissas. Porém, no caso de integrais em espaços de duas ou mais dimensões não existe uma teoria geral de solução da quadratura gaussiana.

Para integrais em várias dimensões pode ser utilizada uma generalização da fórmula de Gauss-Hermite conhecida como fórmula do produto [Stroud, 1971]. Esta fórmula é construída como o produto de formulas para dimensões menores. A integral no espaço de

$D$  dimensões, de um monômio do polinômio de grau  $d$ , da forma

$$\int \omega(\mathbf{c}) \prod_{\alpha=\alpha_1}^{\alpha_D} c_\alpha^{m_\alpha} d\mathbf{c}, \quad (4.21)$$

com  $m_{\alpha_1} + m_{\alpha_2} + \dots + m_{\alpha_D} \leq d$ , poder ser escrita como o produto de integrais

$$\int \omega(c_{\alpha_1}) c_{\alpha_1}^{m_{\alpha_1}} dc_{\alpha_1} \int \omega(c_{\alpha_2}) c_{\alpha_2}^{m_{\alpha_2}} dc_{\alpha_2} \dots \int \omega(c_{\alpha_D}) c_{\alpha_D}^{m_{\alpha_D}} dc_{\alpha_D}. \quad (4.22)$$

Usando a fórmula de quadratura de Gauss-Hermite unidimensional

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-\frac{c^2}{2}} c^m dc = \sum_i^b w_i c_i^m, \quad (4.23)$$

com precisão  $d$ , para resolver cada uma das integrais, obtém-se a solução em  $D$  dimensões,

$$\prod_{\alpha=\alpha_1}^{\alpha_D} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-\frac{c_\alpha^2}{2}} c_\alpha^{m_\alpha} dc_\alpha = \sum_{\substack{1 \leq i_\alpha \leq b \\ \alpha=1,2,\dots,D}} w_{i_1} w_{i_2} \dots w_{i_D} c_{i_1}^{m_{\alpha_1}} c_{i_2}^{m_{\alpha_2}} \dots c_{i_D}^{m_{\alpha_D}}, \quad (4.24)$$

com  $b^D$  abscissas.

Redes regulares deste tipo foram obtidas por He e Luo [1997b] usando a fórmula do produto da quadratura de Gauss-Hermite para polinômios de quinta ordem. Estas redes correspondem àquelas conhecidas anteriormente como  $D2Q9$  e  $D3Q27$ . Shan et al. [2006] estenderam a aplicação da fórmula do produto para obter as redes  $D3Q15$  e  $D3Q19$ .

A fórmula de Gauss-Hermite para o produto de polinômios de terceira ordem e superiores não possui abscissas que sejam múltiplos inteiros de uma constante, portanto, é preciso usar um número não-ótimo de vetores para obter uma solução cartesiana regular. A fórmula do produto da solução unidimensional não-ótima, mas regular, permite calcular redes regulares em duas e três dimensões que, em geral, possuem um grande número de vetores com relação às obtidas por outros métodos.

Recentemente, Philippi et al. [2006] obtiveram soluções para redes cartesianas regulares, com várias ordens de precisão, usando quadraturas com abscissas prescritas. Este método consiste em escolher um conjunto de abscissas com vetores de  $m$  módulos diferentes, da forma  $\mathbf{c}_i = (x_i, y_i, z_i) c_L$ , onde  $x_i, y_i$  e  $z_i$  são números inteiros e  $c_L$  é o passo da rede, para logo resolver as  $(m+1)$  equações lineares independentes, resultantes da avaliação da Eq. (4.19), e obter os  $m$  pesos  $W_i$  e o passo  $c_L$ . Em geral, a escolha das abscissas é feita de maneira que cada vetor tenha um vetor oposto de igual módulo e as redes sejam invariantes com relação a uma rotação de  $\pi/2$ . Estas condições permitem satisfazer trivialmente a ortogonalidade dos monômios quando o seu número de componentes  $c_\alpha$  for ímpar. No caso de monômios com expoentes pares, os autores demonstraram que o pro-

duto interno de polinômios ortogonais depende do quadrado das normas dos polinômios de ordem inferior e, portanto, a representação exata do quadrado das normas é o único sistema de equações independentes. Por causa da estabilidade numérica dos métodos de solução da Eq. (4.20) serão escolhidas apenas as soluções que possuam todos os pesos positivos.

Para calcular a solução da Eq. (4.19) para polinômios de segunda ordem em duas dimensões, o conjunto de abscissas representadas na Fig. (4.1), com módulos 0,  $c_L$  e  $\sqrt{2}c_L$  e pesos  $W_0$ ,  $W_{1-4}$  e  $W_{5-8}$ , é usado para obter um sistema de quatro equações e quatro incógnitas, que correspondem ao cálculo do quadrado das normas dos polinômios  $\mathcal{H}^{(0)}$ ,  $\mathcal{H}_x^{(1)}$  ( $\mathcal{H}_y^{(1)}$ ),  $\mathcal{H}_{xx}^{(2)}$  ( $\mathcal{H}_{yy}^{(2)}$ ) e  $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}$  ( $\mathcal{H}_{yx}^{(2)}$ ):

$$\int \omega(\mathbf{c}) 1^2 d\mathbf{c} = 1 = W_0 + 4(W_4 + W_8), \quad (4.25a)$$

$$\int \omega(\mathbf{c}) c_x^2 d\mathbf{c} = 1 = 2c_L^2 (W_4 + 2W_8), \quad (4.25b)$$

$$\int \omega(\mathbf{c}) (c_x^2 - 1)^2 d\mathbf{c} = 2 = W_0 + 2(c_L^4 - 2c_L^2 + 2)W_4 + 4(c_L^2 - 1)^2 W_8, \quad (4.25c)$$

$$\int \omega(\mathbf{c}) (c_x c_y)^2 d\mathbf{c} = 1 = 4c_L^4 W_8. \quad (4.25d)$$

A solução do sistema é conhecida como rede  $D2Q9$ , e seu passo e pesos estão resumidos na Tabela 4.1.

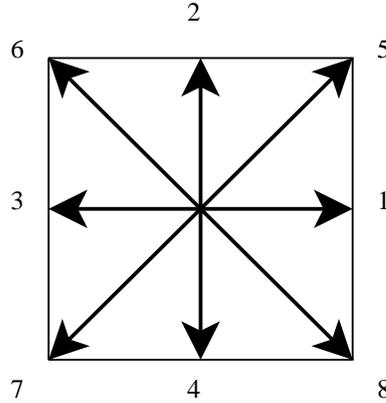


Figura 4.1: Rede de segunda ordem  $D2Q9$

Para obter soluções do produto de polinômios de ordens superiores, Philippi et al. [2006] acrescentaram à rede  $D2Q9$  conjuntos de vetores nas direções principais e diagonais para obter as redes  $D2Q13$ ,  $D2Q17$  e  $D2Q21$ . Os sistemas de equações construídos usando as duas primeiras redes não possuem soluções reais positivas. No caso da rede  $D2Q21$ , o número de incógnitas é maior que o número de equações, o que permite obter as soluções às equações do quadrado das normas dos polinômios  $\mathcal{H}^{(0)}$ ,  $\mathcal{H}_x^{(1)}$ ,  $\mathcal{H}_{xx}^{(2)}$ ,  $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxx}^{(3)}$  e

Tabela 4.1: Passo e pesos da rede  $D2Q9$ .

$c_L = \sqrt{3}$	
$W_0$	$\frac{4}{9}$
$W_{1-4}$	$\frac{1}{9}$
$W_{5-8}$	$\frac{1}{36}$

$\mathcal{H}_{xy}^{(3)}$ , em função do parâmetro  $c_L$  e utilizar este grau de liberdade adicional para eliminar o maior número de abscissas possível. Tal é o caso da rede  $D2V17a$ , para polinômios de terceira ordem, apresentada em Philippi et al. [2006]. Esta é nomeada assim para diferenciá-la de outras redes com o mesmo número de vetores.

As expressões para os pesos da rede  $D2Q21$  são números reais positivos desde que o passo da rede se encontre nos limites

$$c_L \geq \frac{1}{6} \sqrt{\frac{1}{3} \left( 98 - \frac{4571}{(-27163+162\sqrt{3667295})^{1/3}} + (-27163 + 162\sqrt{3667295})^{1/3} \right)}, \quad (4.26)$$

$$c_L \leq \frac{1}{6} \sqrt{\frac{5}{2} (25 + \sqrt{193})}, \quad (4.27)$$

que são as raízes dos pesos  $W_0$  e  $W_{9-12}$ , dos vetores com módulo nulo e  $2c_L$ , respectivamente. Escolhendo eliminar os vetores com módulo  $2c_L$ , obtém-se a rede  $D2V17a$ , mostrada na Fig. (4.2a).

Tabela 4.3: Passo e pesos da rede  $D2V17a$ .

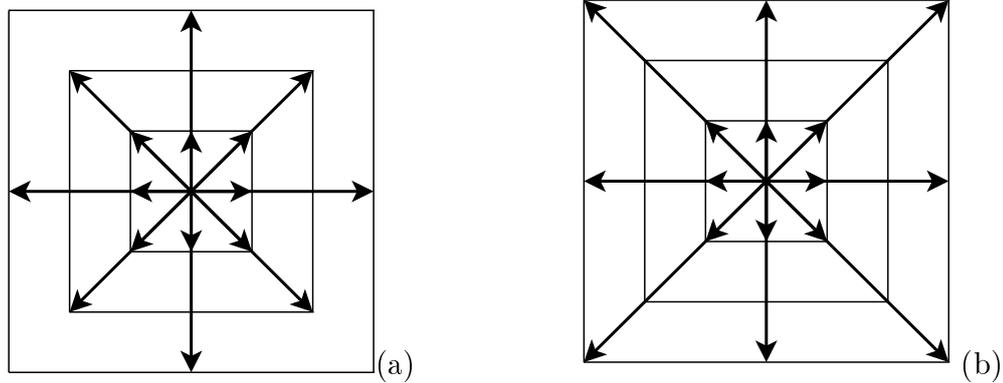
$c_L = \frac{1}{6} \sqrt{\frac{5}{2} (25 + \sqrt{193})}$	
$W_0$	$\frac{575+193\sqrt{193}}{8100}$
$W_{1-4}$	$\frac{3355-91\sqrt{193}}{18000}$
$W_{5-8}$	$\frac{655+17\sqrt{193}}{27000}$
$W_{9-12}$	$\frac{685-49\sqrt{193}}{54000}$
$W_{13-16}$	$\frac{1445-101\sqrt{193}}{162000}$

Como foi apontado no caso da rede  $D2Q9$ , pelo produto de fórmulas é possível construir uma solução em dimensões superiores. Este fato pode ser explorado, de forma inversa, aplicando a metodologia de Philippi et al. [2006] às redes bidimensionais, com o número mínimo de vetores, cuja projeção corresponda à solução cartesiana regular unidimensional.

A solução cartesiana regular para normas de polinômios de terceira ordem em uma dimensão possui quatro grupos de vetores, com módulos  $0$ ,  $c_L$ ,  $2c_L$  e  $3c_L$ , sendo que o peso correspondente ao terceiro grupo se anula para os valores do passo  $c_L = \sqrt{\frac{1}{3}(5 \pm \sqrt{10})}$ . Uma rede como a  $D2V17b$ , mostrada na Fig. (4.2b), tem projeção em uma dimensão da forma descrita, enquanto que o número de equações independentes para o cálculo das normas é igual ao número de incógnitas. A Tabela 4.4 apresenta a solução, cujos pesos e passo de rede são positivos.

Tabela 4.4: Passo e pesos da rede  $D2V17b$ .

$c_L = \sqrt{\frac{1}{3}(5 + \sqrt{10})}$	
$W_0$	$\frac{190-8\sqrt{10}}{505}$
$W_{1-4}$	$\frac{-15+12\sqrt{10}}{200}$
$W_{5-8}$	$\frac{150-39\sqrt{10}}{800}$
$W_{9-12}$	$\frac{130-41\sqrt{10}}{64800}$
$W_{13-16}$	$\frac{295-92\sqrt{10}}{16200}$

Figura 4.2: Redes de terceira ordem  $D2V17a$  e  $D2V17b$ 

A quadratura unidimensional para produtos de polinômios de quarta ordem, usando uma rede cartesiana regular, com módulos de velocidade  $0$ ,  $c_L$ ,  $2c_L$  e  $3c_L$ , possui uma única solução com todos os pesos e o passo positivos. Porém, não é possível construir uma rede bidimensional para obter o quadrado das normas dos polinômios de quarta ordem usando apenas vetores nas direções principais e diagonais. Tomando como exemplo os monômios de quarta ordem  $c_x c_x c_y c_y$  e  $c_x c_x c_x c_y$ , cujas normas são diferentes, observa-se que, em redes formadas por vetores nas direções principais e nas diagonais, os termos não-nulos do lado direito da Eq. (4.19) correspondem apenas às diagonais e portanto  $c_{ix} c_{ix} c_{iy} c_{iy} = c_{ix} c_{ix} c_{ix} c_{iy}$ , impossibilitando a construção de um sistema de equações independentes. Assim, as redes para quadraturas de quarta ordem devem ser construídas com

vetores que ligam um ponto da rede aos seus vizinhos, explorando progressivamente cada módulo de velocidade.

Uma rede deste tipo é mostrada na Fig. (4.3)<sup>1</sup>. Esta rede foi obtida por Philippi et al. [2006] e permitiu, pela primeira vez, a simulação consistente de problemas termohidrodinâmicos usando o método da equação de Boltzmann para gases em rede.

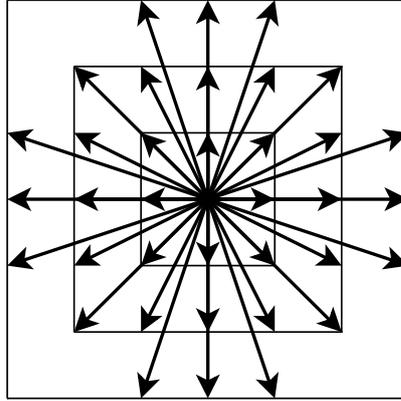


Figura 4.3: Rede de quarta ordem  $D2V37$

Posteriormente, Philippi et al. [2007] obtiveram, pelo método acima exposto, as redes para produtos de polinômios de quinta e sexta ordem,  $D2V53$  e  $D2V81$ , respectivamente. Estas redes são as requeridas pela análise de Chapman-Enskog de equações de Boltzmann com modelos de colisão com múltiplos parâmetros de relaxação, deduzidos pelo procedimento de Gross e Jackson [1959]. O aumento na ordem de precisão da quadratura se justifica pela escolha independente dos coeficientes de viscosidade e condutividade térmica, e pelo aumento na estabilidade do LBM. Estes modelos são uma formulação termodinamicamente consistente para o tratamento de escoamentos compressíveis e não-isotérmicos, de fluidos com viscosidade determinada pelo primeiro parâmetro de relaxação e com número de Prandtl ajustado independentemente, pela escolha do segundo parâmetro de relaxação, possibilitando a simulação de escoamentos com combinações de números de Reynolds e Prandtl arbitrárias.

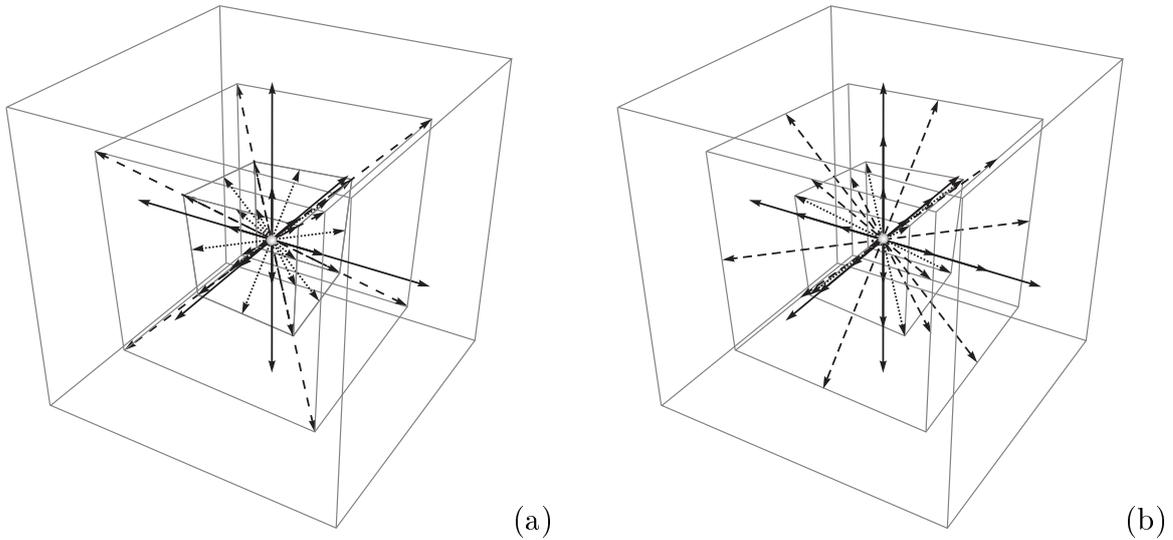
Em três dimensões as redes regulares para polinômios de segunda ordem são conhecidas como  $D3Q15$ ,  $D3Q19$  e  $D3Q27$  [Qian et al., 1992, He e Luo, 1997b]. No caso de polinômios de terceira ordem, a rede tridimensional  $D3V41$ , com módulos  $0$ ,  $c_L$ ,  $\sqrt{2}c_L$ ,  $\sqrt{3}c_L$ ,  $3c_L$  e  $\sqrt{12}c_L$ , e cuja projeção em duas dimensões é a rede  $D2V17a$ , fornece um sistema fechado de equações cujas soluções positivas são apresentadas na Tabela 4.5.

Para esta ordem é possível também construir uma rede com um sistema fechado de equações, cuja projeção em duas dimensões é a rede  $D2Q21$ . Esta rede é a  $D3V39$  apresentada na Fig. (4.4) e na Tabela 4.6.

<sup>1</sup>Os pesos e abscissas das redes que não aparecem neste capítulo se encontram compilados no Apêndice A.

Tabela 4.5: Passo e pesos da rede  $D3V41$ .

$c_L = \frac{1}{6} \sqrt{\frac{5}{2}} (25 + \sqrt{193})$	
$W_0$	$\frac{955 - 59\sqrt{193}}{500}$
$W_{1-6}$	$\frac{-50135 + 3863\sqrt{193}}{54000}$
$W_{7-18}$	$\frac{7525 - 517\sqrt{193}}{13500}$
$W_{19-26}$	$\frac{-14395 + 1051\sqrt{193}}{54000}$
$W_{27-32}$	$\frac{1445 - 101\sqrt{193}}{162000}$
$W_{33-40}$	$\frac{685 - 49\sqrt{193}}{108000}$

Figura 4.4: Redes tridimensionais de terceira ordem (a)  $D3V41$  e (b)  $D3V39$ .

Com o aumento da ordem dos polinômios e da dimensão espacial, o número de vetores necessários para resolver o problema de quadratura se torna excessivamente grande levando em conta que o estado de um sítio precisa ser representado pelas  $b$  distribuições  $f_i$  e sua evolução pela solução de  $b$  equações diferenciais, Eq. (4.20). Para contornar esta limitação serão exploradas quadraturas com soluções não-regulares e métodos alternativos de discretização da equação de Boltzmann com velocidades discretas, diferentes do LBM.

### 4.2.2 Quadraturas não-regulares

Em geral, para uma determinada ordem existem fórmulas de quadratura com um número de abscissas menor do que o das obtidas restringindo as soluções aos vértices de uma rede cartesiana regular. Algumas destas soluções se encontram compiladas por Stroud [1971].

Usando o procedimento descrito na seção anterior, soluções não-regulares foram obtidas prescrevendo as direções dos vetores, pela sobreposição de polígonos e poliedros, circunscritos em círculos e esferas com centro na origem e com pares de vértices diame-

Tabela 4.6: Passo e pesos da rede  $D3V39$ .

$c_L = \sqrt{\frac{3}{2}}$	
$W_0$	$\frac{1}{12}$
$W_{1-6}$	$\frac{1}{12}$
$W_{7-14}$	$\frac{1}{27}$
$W_{15-20}$	$\frac{2}{135}$
$W_{21-32}$	$\frac{1}{432}$
$W_{33-38}$	$\frac{1}{1620}$

tralmente opostos. Esta escolha garante que as conclusões obtidas na seção anterior com relação à ortogonalidade dos monômios com componentes de ordem ímpar, à dependência entre as equações de ortogonalidade e do quadrado da norma e à impossibilidade de construir sistemas de equações independentes para as normas dos polinômios de quarta ordem, usando apenas vetores nas direções principais e diagonais, continuam sendo válidas.

Por exemplo, a rede  $D2V12$  que representa exatamente o produto interno de polinômios de Hermite de terceira ordem é formada por um conjunto de quatro vetores de módulo  $r_1$ , nas direções principais e dois conjuntos de vetores nas direções diagonais, com comprimentos  $\sqrt{2}r_2$  e  $\sqrt{2}r_3$ . A avaliação da Eq. (4.19) fornece um sistema com seis equações independentes para o quadrado das normas de  $\mathcal{H}^{(0)}$ ,  $\mathcal{H}_x^{(1)}$ ,  $\mathcal{H}_{xx}^{(2)}$ ,  $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxx}^{(3)}$  e  $\mathcal{H}_{xxy}^{(3)}$ , com seis incógnitas: os raios  $r_1$ ,  $r_2$  e  $r_3$  e os pesos correspondentes.

Em três dimensões uma rede para polinômios de terceira ordem,  $D3V27$ , é composta pelo vetor nulo e pela sobreposição de um octaedro, formado pelos seis vetores de comprimento  $r_1$  nas direções principais, um icosaedro, formado pelas permutações das coordenadas  $(\pm r_2, \pm r_2, 0)$ , e um cubo, formado pelas permutações das coordenadas  $(\pm r_3, \pm r_3, \pm r_3)$ .

Como foi mostrado na seção anterior, as redes para polinômios de quarta ordem não podem ser construídas com vetores cujas componentes não-nulas sejam iguais. Em duas dimensões, a adição de um octágono formado pelas permutações das coordenadas  $(\pm r_4, \pm r_5)$  à rede  $D2V12$  permite obter um sistema fechado de equações com soluções reais positivas; rede  $D2V20$ .

Em três dimensões, a rede  $D3V52$ , formada por dois octaedros, dois cubos e um icosaedro em duas posições, resulta também num sistema fechado de equações com soluções positivas.

O produto interno de polinômios de quinta ordem é representado exatamente através da rede  $D2V28a$ , composta pela sobreposição de três grupos de vetores nas direções principais, com módulos  $r_1$ ,  $r_2$  e  $r_3$ , e por dois octágonos formados pelas permutações das coordenadas  $(\pm r_4, \pm r_5)$  e  $(\pm r_6, \pm r_7)$ .

Uma outra rede da mesma ordem pode ser calculada com três conjuntos de vetores nas

direções principais, dois nas diagonais e um octágono. A avaliação da Eq. (4.19) usando estes vetores fornece um sistema com doze equações independentes, para o quadrado das normas dos polinômios  $\mathcal{H}^{(0)}$ ,  $\mathcal{H}_x^{(1)}$ ,  $\mathcal{H}_{xx}^{(2)}$ ,  $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxx}^{(3)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxy}^{(3)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxx}^{(4)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxyy}^{(4)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxxy}^{(4)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxxx}^{(5)}$ ,  $\mathcal{H}_{xxyyy}^{(5)}$  e  $\mathcal{H}_{xyyyy}^{(5)}$ , e treze incógnitas, então, uma equação adicional pode ser usada para estabelecer uma relação entre as componentes dos vetores que formam o octágono para, por exemplo, impor que seja regular ou, como no caso da rede *D2V28b*, tenham uma relação de dois a um.

Uma estratégia similar pode ser usada com as redes para produtos de polinômios de quarta ordem, *D2V20* e *D3V52*, nas quais a adição de um vetor nulo permite acrescentar uma equação que relacione as componentes dos vetores para obter soluções mais homogêneas ou compactas, como no caso da rede *D3V53*.

As quadraturas não-regulares podem ser usadas junto com o esquema de colisão e propagação do LBM, implementando uma etapa de re-alocação por extrapolação à rede cartesiana, logo após a propagação como, por exemplo, no esquema proposto por He et al. [1996], ou na solução da Eq. (4.20) por diferenças finitas, como será visto no capítulo 7.

No apêndice A são apresentadas soluções adicionais, para várias ordens de truncamento, em duas e três dimensões.

# Capítulo 5

## Método LBGK para gases ideais simples

Neste capítulo é apresentado o desenvolvimento do método da equação de Boltzmann para gases em rede com modelo de colisão BGK. A derivação é feita de acordo com o procedimento de discretização do espaço de velocidades desenvolvido no capítulo anterior e com base no método das diferenças finitas. A forma particularmente simples do sistema de equações algébricas obtidas permite uma implementação direta e muito vantajosa em computadores paralelos.

A equação de Boltzmann para gases em rede (LBE) é uma discretização particular da equação de Boltzmann com velocidades discretas, Eq. (4.20), que usa o esquema de Euler na derivada temporal e diferenças a montante de primeira ordem para a derivada espacial. Nesta discretização, o espaço e o tempo se encontram acoplados através da relação  $\Delta x_{i\alpha} = c_{i\alpha} \Delta t$ , o que se traduz no número de Courant

$$C = \frac{|\mathbf{c}_i|}{|\Delta \mathbf{x}_i|} \Delta t \quad (5.1)$$

unitário [Tannehill et al., 1997]. A equação de Boltzmann para gases em rede satisfaz o critério de estabilidade do método explícito de solução de equações lineares hiperbólicas homogêneas conhecido como critério de Courant-Friedrichs-Lewy, dado por  $C \leq 1$ . Esta condição implica que nenhuma informação relativa à configuração de um sítio poderá propagar-se com velocidade maior do que a maior velocidade disponível na rede. Embora a satisfação marginal da condição de estabilidade seja suficiente, em muitos casos esta é uma condição conservativa e, quando gradientes elevados da função distribuição introduzem perturbações de grande amplitude, como no caso de escoamento compressível, o método de solução diverge [Sterling e Chen, 1996].

As características particulares da LBE permitem a absorção dos erros temporais e espaciais pelos coeficientes de transporte, transformando esta equação num esquema de solução de segunda ordem para as equações hidrodinâmicas [Cao et al., 1997]. Embora a

incorporação dos erros nos coeficientes de transporte introduza uma dependência anômala destes com a densidade local, em muitas aplicações estes efeitos são desprezíveis e o método é comparável à solução das equações de Navier-Stokes.

## 5.1 Discretização espacial e temporal

Partindo da equação de Boltzmann com velocidades discretas, o termo advectivo é discretizado usando o esquema de Euler de primeira ordem no tempo<sup>1</sup>

$$\partial_t f_i = \frac{f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} - \frac{1}{2} \partial_t \partial_t f_i \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (5.2)$$

e uma discretização espacial de primeira ordem a montante, com relação à direção  $i$ ,

$$c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i = c_i \frac{f(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f(\mathbf{x} - \Delta \mathbf{x}_i, t + \Delta t)}{\Delta x_i} + \frac{1}{2} c_{i\alpha} \Delta x_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_i + \mathcal{O}(\Delta x_i^2). \quad (5.3)$$

Juntando os termos tem-se

$$\begin{aligned} \frac{f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} + c_i \frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x} - \Delta \mathbf{x}_i, t)}{\Delta x_i} \\ - \frac{1}{2} (\partial_t \partial_t f_i \Delta t - c_{i\alpha} \partial_\alpha \partial_\beta f_i \Delta x_{i\beta}) = J_i(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (5.4)$$

Como já foi mencionado, no LBM  $\mathbf{c}_i = \Delta \mathbf{x}_i / \Delta t$ . Usando esta condição, a equação anterior se transforma em

$$f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t) + J_i(\mathbf{x}, t) \Delta t + \frac{1}{2} (\partial_t \partial_t f_i - c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_i) \Delta t^2. \quad (5.5)$$

Expandindo as funções  $f(\mathbf{x}, t + \Delta t)$  em torno de  $f(x_\alpha + \Delta x_\alpha, t + \Delta t)$  e  $f(x_\alpha - \Delta x_\alpha, t)$  em torno de  $f(\mathbf{x}, t)$ , na expressão anterior, tem-se, até segunda ordem no passo de tempo

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + J_i(\mathbf{x}, t) \Delta t \\ + \frac{1}{2} (\partial_t \partial_t f_i + 2c_{i\alpha} \partial_\alpha \partial_t f_i + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_i) \Delta t^2. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Finalmente, avaliando explicitamente o operador de colisão BGK e desprezando os termos de segunda ordem e superiores no passo de tempo na Eq. (5.6), obtém-se o

<sup>1</sup>Neste capítulo será empregada a notação  $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$  e  $\partial_\alpha \equiv \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ .

esquema de colisão-propagação e a equação LBGK

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + n\nu \left( f_i^{(M)} - f_i \right) \Delta t. \quad (5.7)$$

A expressão possui a mesma forma daquela derivada dos modelos de gás em rede, e é diferente da equação LBGK de Qian et al. [1992] apenas na frequência de colisão, que nesses modelos é assumida como constante [Chen e Doolen, 1998].

## 5.2 Equações hidrodinâmicas e análise de Chapman - Enskog

Nesta seção será apresentada uma análise multiescala da equação LBGK, que conduz às equações de balanço macroscópicas. A análise se baseia no procedimento de Chapman-Enskog, descrito na seção (3.4), embora ele seja aplicado a uma equação diferencial diferente, que inclui os erros das discretizações espacial e temporal. Como na análise original, a função distribuição é assumida como uma função do tempo apenas através das variáveis hidrodinâmicas  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$  e  $T$ . A divisão do operador de advecção é feita de maneira análoga, de forma que os momentos da equação diferencial com a solução em ordem zero sejam as equações de Euler.

Com o propósito de elaborar um procedimento genérico, a expansão do operador derivada temporal, Eq. (3.82), não será avaliada explicitamente e, no seu lugar, serão avaliados os momentos de um conjunto de equações, análogo às Eqs. (3.96), para estabelecer uma relação entre a correção de primeira ordem e as equações da hidrodinâmica.

Define-se o modelo como a combinação de uma expansão da função distribuição Maxwelliana, usada no operador BGK, truncada numa determinada ordem, e a rede de velocidades moleculares que permite calcular a quadratura, Eq. (4.19), para polinômios até a ordem de truncamento. No desenvolvimento da análise será assumido que cada momento macroscópico, na forma das Eqs. (3.25) a (3.28), é representado exatamente pela quadratura. Os efeitos dos erros na representação dos momentos macroscópicos em soluções de baixa ordem são abordados separadamente.

A equação LBGK representa uma equação diferencial de segunda ordem, diferente da equação de transporte de Boltzmann, devido a inclusão dos erros advindos das discretizações espacial e temporal, até segunda ordem no passo de tempo. Esta equação, após ser adimensionalizada usando as grandezas de referência, descritas na seção (3.4), apresenta a seguinte forma:

$$\partial_t f_i + c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i + \epsilon \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \partial_t f_i + 2c_{i\alpha} \partial_\alpha \partial_t f_i + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_i) = \frac{1}{\epsilon} J_i, \quad (5.8)$$

onde o parâmetro  $\epsilon$ , que representa o número de Knudsen, está definido como  $\epsilon \equiv \tau/\bar{t} =$

$l/L$  e o passo de tempo foi adimensionalizado com o tempo médio entre colisões  $\tau$ .

A substituição da função distribuição por uma expansão em potências do parâmetro  $\epsilon$

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \dots, \quad (5.9)$$

e da expansão análoga da derivada temporal

$$\partial_t = \partial_0 + \epsilon \partial_1 + \dots, \quad (5.10)$$

forneem as seguintes equações nas três primeiras ordens de  $\epsilon$ :

$$J_i^{(0)} = 0, \quad (5.11)$$

$$J_i^{(1)} = \partial_0 f_i^{(0)} + c_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{(0)}, \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} J_i^{(2)} = \partial_0 f_i^{(1)} + \partial_1 f_i^{(0)} + c_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \partial_0 \left( \partial_0 f_i^{(0)} + c_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{(0)} \right) \\ + \frac{\Delta t}{2} c_{i,\alpha} \partial_\alpha \left( \partial_0 f_i^{(0)} + c_{i,\beta} \partial_\beta f_i^{(0)} \right). \end{aligned} \quad (5.13)$$

A solução da Eq. (5.11) é a mesma que, de acordo com o Teorema *H* da seção (3.3), é a solução da equação de transporte de Boltzmann homogênea. Segundo a teoria de Enskog, os parâmetros macroscópicos presentes na distribuição Maxwelliana correspondem aos valores locais das grandezas densidade de número de partículas, densidade de quantidade de movimento e densidade de energia. De acordo com estas definições as soluções de ordem superior estão restritas pelas seguintes relações:

$$\rho = m \sum_i f_i^{(0)}, \quad \sum_i f_i^{(l)} = 0 \quad \forall l \neq 0, \quad (5.14)$$

$$\rho u_\alpha = m \sum_i f_i^{(0)} c_{i\alpha}, \quad \sum_i f_i^{(l)} c_{i\alpha} = 0 \quad \forall l \neq 0, \quad (5.15)$$

$$\rho \frac{1}{2} u^2 + \rho \varepsilon = m \sum_i \frac{1}{2} f_i^{(0)} c_i^2, \quad \sum_i f_i^{(l)} c_i^2 = 0 \quad \forall l \neq 0. \quad (5.16)$$

### 5.2.1 Equações de Euler

Os momentos da equação em primeira ordem de Knudsen fornecem as equações hidrodinâmicas de Euler, que descrevem o escoamento de fluidos sem transferência de calor e

sem efeitos viscosos,

$$\partial_0 \rho + \partial_\alpha \rho u_\alpha = 0, \quad (5.17)$$

$$\partial_0 \rho u_\gamma + \partial_\alpha \rho u_\alpha u_\gamma + \partial_\alpha p \delta_{\alpha\gamma} = 0, \quad (5.18)$$

$$\partial_0 \left( \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + \partial_\alpha \left( \rho \varepsilon u_\alpha + \frac{1}{2} \rho u^2 u_\alpha + p u_\alpha \right) = 0. \quad (5.19)$$

A partir das equações anteriores é possível derivar as equações de balanço em primeira ordem de Knudsen para a velocidade hidrodinâmica, a energia interna  $\varepsilon = DkT/2m$  e a pressão  $p = nkT$ ,

$$\partial_0 u_\gamma + u_\alpha \partial_\alpha u_\gamma + \frac{1}{\rho} \partial_\gamma p = 0, \quad (5.20)$$

$$\partial_0 \varepsilon + u_\alpha \partial_\alpha \varepsilon + \frac{p}{\rho} \partial_\alpha u_\alpha = 0, \quad (5.21)$$

$$\partial_0 p + \partial_\alpha p u_\alpha + \frac{2}{D} p \partial_\alpha u_\alpha = 0. \quad (5.22)$$

Através da manipulação das equações para a pressão ou a energia interna determina-se a relação entre as variáveis pressão e densidade num processo adiabático e reversível. Esta relação é

$$\frac{d_0}{dt} \left( p \rho^{-\frac{D+2}{D}} \right) \equiv \partial_0 p \rho^{-\frac{D+2}{D}} + u_\alpha \partial_\alpha p \rho^{-\frac{D+2}{D}} = 0. \quad (5.23)$$

## 5.2.2 Equações de Navier - Stokes

O momento de  $m$ , na equação de segunda ordem de Knudsen fornece:

$$\partial_1 \rho = 0. \quad (5.24)$$

Como era previsto pela restrição Eq. (5.14), a equação em primeira ordem de Knudsen não introduz termos espúrios na equação de balanço de massa. Assim, usando a Eq. (5.10) e a definição do parâmetro  $\epsilon$ , para retornar às variáveis originais, obtém-se a equação de continuidade

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha \rho u_\alpha = 0. \quad (5.25)$$

Multiplicando a equação de segunda ordem de Knudsen por  $mc_{i\gamma}$ , somando em todas as direções e usando a Eq. (5.15), tem-se

$$\partial_1 \rho u_\gamma + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\gamma}^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha A = 0, \quad (5.26)$$

onde a expressão  $A$  depende dos momentos de segunda e terceira ordem da distribuição  $f_i^{(0)}$  da seguinte forma:

$$A = \partial_0 \sum m_i f_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\gamma} + \partial_\beta \sum_i m f_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma}, \quad (5.27)$$

$$A = \partial_0 (\rho u_\alpha u_\gamma + p \delta_{\alpha\gamma}) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma + p (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta})). \quad (5.28)$$

As derivadas temporais na expressão anterior são eliminadas, com ajuda das expressões Eqs. (5.18), (5.20) e (5.22), para escrevê-la explicitamente como função do tensor taxa de deformação, assim,

$$A = p \left( \partial_\gamma u_\alpha + \partial_\alpha u_\gamma - \frac{2}{D} \partial_\beta u_\beta \delta_{\alpha\gamma} \right). \quad (5.29)$$

A Equação (5.27) é também equivalente ao momento de segunda ordem do operador de colisão  $J_i^{(1)} = -n\nu f_i^{(1)}$ , então, pela definição do tensor pressão,

$$\Pi_{\alpha\gamma}^{(1)} = -\frac{p}{n\nu} \left( \partial_\gamma u_\alpha + \partial_\alpha u_\gamma - \frac{2}{D} \partial_\beta u_\beta \delta_{\alpha\gamma} \right). \quad (5.30)$$

A soma das equações de primeira e segunda ordem de Knudsen, junto com a Eq. (5.10) e a definição do parâmetro  $\epsilon$ , estabelecem a equação de balanço da densidade de quantidade de movimento

$$\partial_t \rho u_\gamma + \partial_\alpha \rho u_\alpha u_\gamma + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\gamma}^* = 0, \quad (5.31)$$

onde  $\Pi^*$  é o tensor pressão aparente

$$\Pi_{\alpha\gamma}^* = p \delta_{\alpha\gamma} - \eta^* \left( \partial_\gamma u_\alpha + \partial_\alpha u_\gamma - \frac{2}{D} \partial_\beta u_\beta \delta_{\alpha\gamma} \right), \quad (5.32)$$

e  $\eta^*$  é a viscosidade dinâmica aparente, dada por

$$\eta^* = p \left( \frac{1}{n\nu} - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (5.33)$$

O momento de  $\frac{1}{2} m c_i^2$  em segunda ordem de Knudsen é

$$\partial_1 \left( \rho \epsilon + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + \partial_\alpha \left( u_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} + q_\alpha^{(1)} \right) + \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha B = 0, \quad (5.34)$$

com

$$B = \frac{1}{2} \left( \partial_0 \sum_i m f_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\gamma} c_{i\gamma} + \partial_\beta \sum_i m f_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\gamma} \right), \quad (5.35)$$

$$B = \partial_0 u_\alpha \left( \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho u^2 + p \right) + \partial_\beta \frac{1}{2} \left( \rho u^2 u_\alpha u_\beta + p (D+4) u_\alpha u_\beta + p u^2 \delta_{\alpha\beta} + \frac{p}{\rho} (D+2) \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (5.36)$$

que, com ajuda das equações de balanço em ordem zero, Eqs. (5.17) a (5.22), pode ser escrito como

$$B = u_\beta p \left( \partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{D} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \right) + \frac{pk(D+2)}{2m} \partial_\alpha T. \quad (5.37)$$

A expressão anterior é equivalente ao momento do operador de colisão de primeira ordem,  $\sum_i J_i^{(1)} \frac{1}{2} m c_i^2$ :

$$B = -n\nu \left( u_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} + q_\alpha^{(1)} \right) = u_\beta p \left( \partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{D} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \right) + \frac{pk(D+2)}{2m} \partial_\alpha T. \quad (5.38)$$

Substituindo as expressões de  $B$  na equação de primeira ordem de Knudsen, agrupando os termos e retornando às variáveis originais, obtém-se a equação de balanço da densidade de energia

$$\partial_t \left( \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + \partial_\alpha \left( \rho \varepsilon u_\alpha + \frac{1}{2} \rho u^2 u_\alpha + u_\beta \Pi_{\alpha\beta}^* + q_\alpha^* \right) = 0, \quad (5.39)$$

onde  $\mathbf{q}^*$  é o fluxo não-convectivo de energia aparente, dado por

$$q_\alpha^* = -\kappa^* \partial_\alpha T, \quad (5.40)$$

com condutividade térmica aparente

$$\kappa^* = \left( \frac{1}{n\nu} - \frac{\Delta t}{2} \right) \frac{pk(D+2)}{2m}. \quad (5.41)$$

Como foi mencionado, os termos de segunda ordem no passo de tempo, resultantes da discretização espacial e temporal, contribuem ao transporte difusivo de quantidade de movimento e energia através dos termos espúrios, proporcionais a  $\frac{\Delta t}{2}$ , na viscosidade e na condutividade térmica aparentes. Desta forma, os coeficientes de transporte diferem daqueles da teoria cinética não só no valor como na dependência anômala na densidade local. Os termos espúrios aparecem apenas nas expressões do tensor pressão e do vetor fluxo de calor aparentes, portanto as equações de Euler e a equação de estado são corretamente representadas.

Com a equação de estado de gás ideal, calculada como o momento da função distribuição de ordem zero, obtém-se o calor específico a pressão constante

$$c_p = \frac{(D+2)k}{2m}, \quad (5.42)$$

e o número de Prandtl que, como no modelo BGK original, é

$$Pr^* = \frac{\eta^* c_p}{\kappa^*} = 1. \quad (5.43)$$

A velocidade do som no gás monoatômico rarefeito calcula-se pelo balanço de massa e quantidade de movimento na descontinuidade produzida por uma pequena perturbação de pressão [Anderson Jr., 2003]. Realizando este balanço sobre um volume de controle que se movimenta com a velocidade da perturbação e assumindo que todo o processo acontece sem mudanças apreciáveis na entropia, ou seja, num processo descrito pela relação Eq. (5.23), obtém-se

$$c_s^2 = \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = \frac{(D+2)kT}{Dm}. \quad (5.44)$$

### 5.2.3 Erros em aproximações de baixa ordem

Na derivação das equações hidrodinâmicas de Euler, Eqs. (5.17) a (5.19), e de Navier-Stokes-Fourier, Eqs. (5.25), (5.31) e (5.39), foi assumido que os momentos de  $f_i$  são exatamente representados pela equação de quadratura e pela aproximação à função distribuição por polinômios de Hermite. De acordo com a Eq. (4.13), os momentos da distribuição Maxwelliana local até quarta ordem são necessários para obter as expressões do fluxo de calor e do tensor pressão na escala hidrodinâmica. O erro introduzido pelo truncamento da expansão da função distribuição Maxwelliana em ordens inferiores se manifesta pelo acréscimo de termos espúrios nas equações de balanço que, dependendo das condições do escoamento, podem ser desconsiderados. Por exemplo, os modelos  $D2Q9$  e  $D3Q19$  possuem momentos da distribuição Maxwelliana de terceira ordem da forma

$$\sum_i^b m f_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = p_0 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}), \quad (5.45)$$

onde  $p_0 \equiv nkT_0$ . Esta expressão aplicada ao cálculo da equação de energia em primeira ordem de Knudsen fornece

$$\partial_0 \left( \rho \varepsilon + \rho \frac{u^2}{2} \right) + \partial_\alpha \frac{D+2}{2} p_0 u_\alpha = 0, \quad (5.46)$$

que, usando as expressões Eqs. (5.20) e (5.17), pode ser escrita como

$$\partial_0 p + \partial_\alpha p_0 u_\alpha + \frac{2}{D} p_0 \partial_\alpha u_\alpha - \frac{2}{D} \left( \rho u_\alpha u_\beta \partial_\beta u_\alpha + u_\alpha \partial_\alpha (p - p_0) + \frac{u^2}{2} \partial_\beta \rho u_\beta \right) = 0. \quad (5.47)$$

Na equação anterior aparecem termos com ordem de grandeza proporcional ao número de Mach ao cubo. A contribuição destes termos é desprezível em situações onde a velocidade hidrodinâmica seja baixa. Porém, mesmo a baixas velocidades, o fator  $p_0$ , que aparece no lugar da pressão local e que é independente da temperatura, faz com que os modelos de segunda ordem não consigam representar a equação de balanço da energia mesmo na mais baixa ordem de Knudsen. Como consequência desta inconsistência nas equações hidrodinâmicas de Euler, a Eq. (5.23) não é mais satisfeita e, mesmo possuindo uma equação de estado correta, a velocidade do som é diferente da expressão Eq. (5.44).

O momento de terceira ordem também aparece no desenvolvimento da equação de balanço de quantidade de movimento em segunda ordem de Knudsen e no cálculo da correção de primeira ordem do tensor pressão. A expressão envolvendo o momento de terceira ordem é

$$A_{2da} = \partial_0 (\rho u_\alpha u_\gamma + p \delta_{\alpha\gamma}) + \partial_\beta p_0 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}). \quad (5.48)$$

Usando a Eq. (5.47) para eliminar a derivada temporal da pressão, e arranjando os termos na forma da Eq. (5.29), da equação anterior obtém-se a expressão

$$A_{2da} = p_0 \left( \partial_\gamma u_\alpha + \partial_\alpha u_\gamma - \frac{2}{D} \partial_\beta u_\beta \delta_{\alpha\gamma} \right) + u_\alpha \partial_\gamma (p_0 - p) + u_\gamma \partial_\alpha (p_0 - p) + u_\beta \partial_\beta (p_0 - p) \delta_{\alpha\gamma}, \quad (5.49)$$

na qual foram omitidos termos da ordem do número de Mach ao cubo, proporcionais a  $\partial_\beta \rho u_\alpha u_\beta u_\gamma$ ,  $\rho u_\delta u_\beta \partial_\beta u_\delta \delta_{\alpha\gamma}$  e  $u^2 \partial_\beta \rho u_\beta \delta_{\alpha\gamma}$ . Desconsiderando estes termos de alta ordem, e assumindo que as diferenças  $p_0 - p$  são desprezíveis, a equação de balanço da densidade de quantidade de movimento de um modelo de segunda ordem é

$$\partial_i \rho u_\gamma + \partial_\alpha \rho u_\alpha u_\gamma + \partial_\gamma p + \partial_\alpha \eta_{2da}^* \left( \partial_\gamma u_\alpha + \partial_\alpha u_\gamma - \frac{2}{D} \partial_\beta u_\beta \delta_{\alpha\gamma} \right) \approx 0, \quad (5.50)$$

com viscosidade dinâmica aparente dada por

$$\eta_{2da}^* = p_0 \left( \frac{1}{n\nu} - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (5.51)$$

A pesar destas limitações os modelos de segunda ordem podem ser aplicados a problemas com pequenos gradientes de pressão e nos quais os efeitos térmicos não sejam apreciáveis.

No caso dos modelos de terceira ordem,  $D2V17a/b$ ,  $D3V39$  e  $D3V41$ , os erros devidos ao truncamento aparecem no cálculo do momento  $\frac{1}{2} m c_i^2$  da equação de segunda ordem em

Knudsen, especificamente no desenvolvimento do termo  $B$ . O momento de quarta ordem, nas redes citadas, é

$$\begin{aligned} \sum_i^b \frac{1}{2} m f_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_i^2 &= p \varepsilon_0 \frac{(D+2)^2}{2D} \delta_{\alpha\beta} + p_0 \varepsilon_0 \frac{(D+2)}{D} \delta_{\alpha\beta} \left( 1 - \frac{(D+2)}{2} \right) \\ &+ p_0 u_\alpha u_\beta \frac{(D+4)}{2} + p_0 \frac{u^2}{2} \delta_{\alpha\beta} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Após simplificações, o termo  $B$  pode ser escrito como

$$B_{3ra} = u_\beta p \left( \partial_\gamma u_\alpha + \partial_\alpha u_\gamma - \frac{2}{D} \partial_\beta u_\beta \delta_{\alpha\gamma} \right) + \frac{(D+2)p_0 k T_0}{2m T} \partial_\alpha T, \quad (5.53)$$

onde termos proporcionais a  $\partial_\alpha \rho u_\alpha u_\alpha u^2$ ,  $\partial_\alpha \rho (T/T_0 - 1) u^2$ ,  $\partial_\beta \rho (T/T_0 - 1) u_\alpha u_\beta$  e  $T_0/T (T/T_0 - 1)^2 \partial_\alpha p$  foram excluídos.

Usando a expressão  $B_{3ra}$  na análise multiescala obtém-se uma equação de balanço de densidade de energia aplicável a escoamentos a baixo número de Mach, com pequenas variações de pressão e temperatura, cujo coeficiente de condutividade térmica aparente é dado por

$$\kappa_{3ra}^* = \left( \frac{1}{n\nu} - \frac{\Delta t}{2} \right) \frac{(D+2)p_0 k T_0}{2m T}. \quad (5.54)$$

## 5.3 Verificação e resultados numéricos

Para verificar os resultados da análise de Chapman-Enskog foram realizadas simulações de problemas governados pelas equações de Euler e pela equação de advecção-difusão, com diferentes condições iniciais. Para manter a compatibilidade com a nomenclatura já utilizada em outras publicações, nas simulações apresentadas neste capítulo será assumida a escolha das grandezas de referência e da separação entre sítios de forma tal que o passo de tempo seja unitário e a massa molecular igual à massa de referência. Pelos mesmos motivos, os comprimentos e velocidades serão normalizados usando o passo da rede  $c_L$ .

As verificações foram realizadas em todas as redes regulares de segunda, terceira e quarta ordens e os resultados são apresentados apenas para as redes mais referenciadas na literatura, com menor número de velocidades ou as que apresentam alguma característica particular com relação à estabilidade, como no caso da rede  $D2V17a$ .

### 5.3.1 Propagação de ondas de choque

Para testar as capacidades do modelo de capturar corretamente fenômenos compressíveis foi simulado um problema bem conhecido na dinâmica dos gases, a propagação de ondas de choque normais.

Um tubo de choque está formado por dois compartimentos separados por uma membrana adiabática na posição  $x = 0$ , inicialmente preenchidos com gases com diferentes densidades e temperaturas e, conseqüentemente, a pressões diferentes. A região ocupada pelo gás à esquerda da membrana adiabática ( $x < 0$ ) será designada com o número 4 e a região à direita com o número 1. No instante inicial a membrana é retirada e é permitido à porção do gás a alta pressão expandir-se na região de baixa pressão. Assumindo que o gás na região 4 tem a maior pressão, a onda de compressão se desloca à direita criando uma região de alta temperatura, designada com o número 2, e induzindo ao gás atrás dela a se movimentar com velocidade  $u_2$ . Esta é também a velocidade da interface que separa as massas de gás inicialmente a pressões diferentes, chamada de superfície de contato. Simultaneamente, uma onda de expansão se propaga no sentido oposto, diminuindo a pressão do gás inicialmente à pressão  $p_4$ . A região compreendida entre a superfície de contato e o final da onda de expansão é designada com o número 3. Assumindo que o gás confinado no tubo de choque é um gás ideal, com velocidade do som dada pela Eq. (5.44), é possível calcular as relação entre suas propriedades termodinâmicas nas diferentes regiões, a partir da relação de pressão inicial  $p_4/p_1$ , utilizando os balanços de massa, quantidade de movimento e energia, e o método das linhas características [Anderson Jr., 2003].

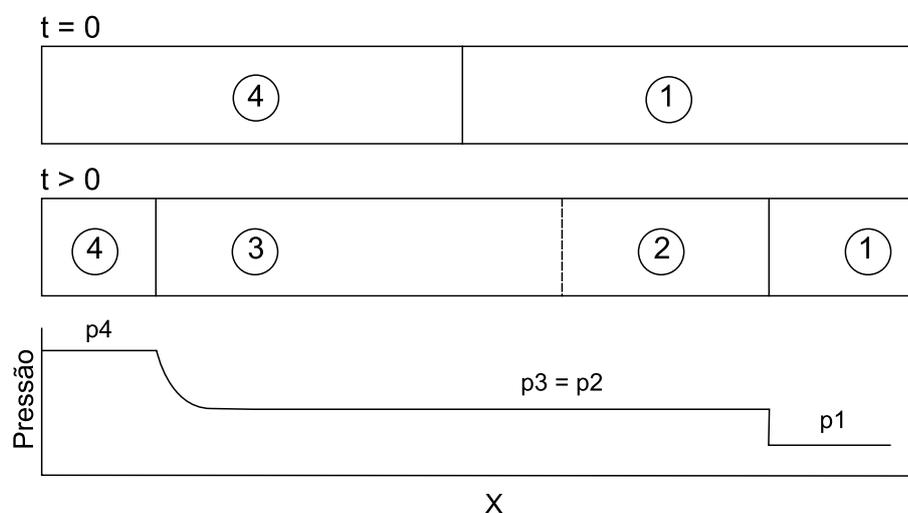


Figura 5.1: Diagrama de pressão na propagação de uma onda num tubo de choque após a ruptura da membrana que separa as regiões 1 e 4.

As simulações do problema da propagação de ondas de choque, com modelos de terceira ordem e superiores, forneceram resultados satisfatórios, mesmo para altas relações de pressão e temperatura.

Os modelos de terceira ordem representam corretamente as equações de continuidade e balanço da quantidade de movimento e energia em primeira ordem de Knudsen, portanto são suficientes para obter uma solução satisfatória às equações hidrodinâmicas de Euler.

A Figura (5.2) mostra a configuração do tubo de choque após 140 passos de tempo numa simulação usando o modelo de quarta ordem  $D2V37$ . As comparações entre os resultados teóricos e esta simulação são apresentados na Tabela 5.1.

Como se percebe na Fig. (5.2), as interfaces entre as regiões do escoamento possuem espessura finita devido aos fenômenos de difusão, que não podem ser eliminados totalmente, anulando os coeficientes de transporte, por causa da instabilidade numérica. Em alguns casos as instabilidades numéricas aparecem devido à diferença entre as frequências de colisão nas diferentes regiões e, em conseqüência, dos valores diferentes dos coeficientes de transporte. Este efeito pode ser minimizado adotando uma frequência de colisão constante e empregando o parâmetro de relaxação  $\tau_0 \equiv \frac{1}{n_0\nu}$  no operador de colisão.

Em geral, os resultados obtidos com as redes de terceira e quarta ordem são satisfatórios em várias combinações de configurações iniciais, mas estão limitados pela estabilidade numérica do método. Em particular, as simulações com o modelo de terceira ordem  $D2V17a$  tornam-se instáveis para valores negativos do desvio de temperatura  $\theta$ , sendo que a amplitude da faixa estável diminui com a relação inicial de densidades. Especificamente, no caso de uma relação inicial de densidades 4 : 1, como a da Fig. (5.2), as simulações com o modelo de terceira ordem  $D2V17a$  divergem para valores do desvio da temperatura  $\theta < -0.2$ . O modelo de terceira ordem  $D2V17b$  apresenta uma sensibilidade aos desvios de temperatura ligeiramente menor, para uma mesma razão de densidades.

Tabela 5.1: Comparação entre os resultados da simulação apresentada na Fig. (5.2) e a solução teórica ao problema do tubo de choque.

Propriedade	Sol. Analítica	Simulação	Erro
$n_3$	2.745717947	2.74170458	0.15%
$n_2$	1.362247097	1.36245593	0.02%
$\varepsilon_3$	0.479095726	0.47991180	0.17%
$\varepsilon_2$	0.965655743	0.96598190	0.03%
$p_3$	1.315461732	1.316107768	0.05%
$p_2$	1.315461732	1.315776380	0.02%
$u_3$	0.405224745	0.405392000	0.04%
$u_2$	0.405224745	0.405581200	0.09%

A Figura (5.3) mostra a dependência da velocidade do som com a temperatura, dada pela equação (5.44), em simulações da propagação de uma pequena perturbação de pressão, num meio com temperatura homogênea, usando os modelos de terceira e quarta ordem  $D2V17a/b$ ,  $D3V39$  e  $D2V37$ . Pelo mesmo método verificou-se que a velocidade do som em modelos de segunda ordem é independente da temperatura.

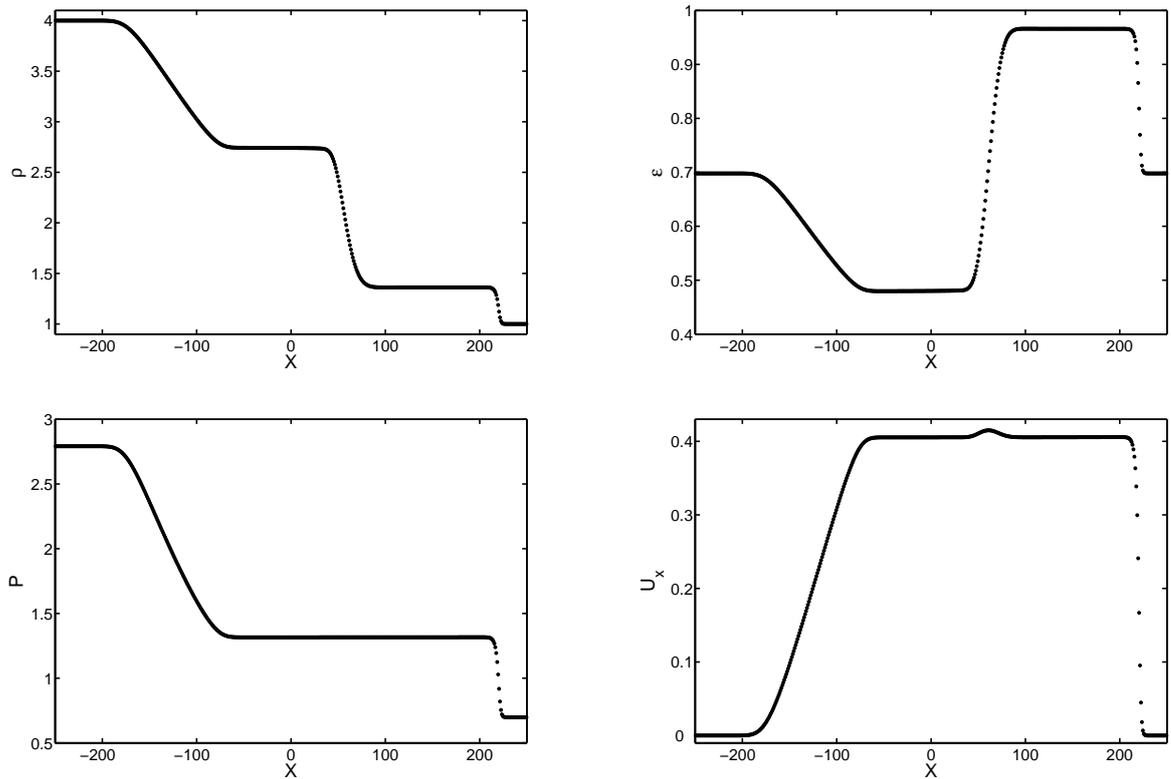


Figura 5.2: Resultados da simulação do tubo de choque, com relação inicial de densidades 4 : 1, temperatura inicial homogênea  $\theta = 0.0$  e  $\nu = 1.0$ , usando o modelo de quarta ordem  $D2V37$ .

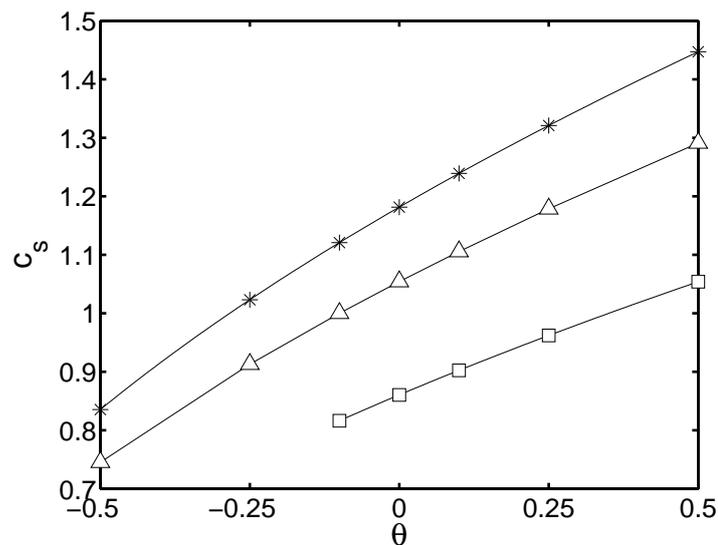


Figura 5.3: Velocidade do som vs.  $\theta$  em simulações com modelos de terceira e quarta ordem.  $D2V17a$  ( $\square$ ),  $D2V37$  ( $*$ ) e  $D3V39$  ( $\triangle$ ). A linha contínua corresponde à expressão analítica.

### 5.3.2 Difusão de quantidade de movimento

A evolução de um sistema com densidade e temperatura homogêneas, com condições de contorno periódicas em todas as direções, inicialmente com um perfil sinusoidal de velocidade dado por  $u_x = 0$  e  $u_y(x, t = 0) = u_0 \sin Kx$ , onde  $K = 2\pi/L$  e  $L$  é o comprimento do domínio, é regido pela Eq. (5.31). Considerando que a velocidade máxima  $u_0$  é pequena, de maneira que os campos de densidade e temperatura, e por tanto de pressão, permaneçam homogêneos e constantes, a equação de balanço da quantidade de movimento pode ser simplificada como<sup>2</sup>

$$\partial_t u_y - (\eta/\rho) \partial_x \partial_x u_y = 0. \quad (5.55)$$

A solução da Eq. (5.55), sujeita às condições iniciais e de contorno já mencionadas, é

$$u_y(x, t) = u_0 \sin(Ky) \exp(-(\eta/\rho)K^2t), \quad (5.56)$$

e pode ser usada para determinar o valor da viscosidade cinemática  $\eta/\rho$  através da equação

$$\eta/\rho = \frac{1}{K^2t} \log \frac{u_y(x, t=0)}{u_y(x, t)}, \quad (5.57)$$

onde, para minimizar o efeito dos erros de arredondamento, os valores da velocidade  $u_y$  são tomados nas cristas ou, alternativamente, a viscosidade cinemática é avaliada usando uma relação de integrais dos perfis de velocidade,

$$\eta/\rho = \frac{1}{K^2t} \log \frac{\int_0^{L/2} u_y(x, t_0) dx}{\int_0^{L/2} u_y(x, t_1) dx}. \quad (5.58)$$

A Figura (5.4) mostra o decaimento do perfil sinusoidal com amplitude  $u_0 = 0.01$  num domínio de  $L = 360$  passos de rede. A viscosidade cinemática foi determinada a cada 1000 passos de tempo, pelos dois métodos sugeridos com, praticamente, os mesmos resultados.

A dependência da viscosidade com o parâmetro  $\nu$ , a temperatura e a densidade foi verificada por simulações com diferentes amplitudes do perfil de velocidade inicial, e da mesma ordem de grandeza daquela utilizada na simulação da Fig. (5.4), usando redes com diferentes ordens de aproximação, em duas e três dimensões. Estes resultados coincidem com as expressões obtidas pela análise de Chapman-Enskog, Eqs. (5.33) e (5.51), com erros inferiores a 0.05%, em todos os casos. Quando a amplitude do perfil inicial de velocidade é de ordem superior a 0.1 as discrepâncias aumentam, devido a que os efeitos de compressibilidade se tornam significativos e a Eq. (5.55) deixa de ser uma aproximação válida para a dinâmica do escoamento. As Figuras (5.5) a (5.10) apresentam estas comparações.

---

<sup>2</sup>No restante do capítulo os coeficientes de transporte referidos correspondem aos valores aparentes, obtidos na seção (5.2), e será omitida a distinção na notação.

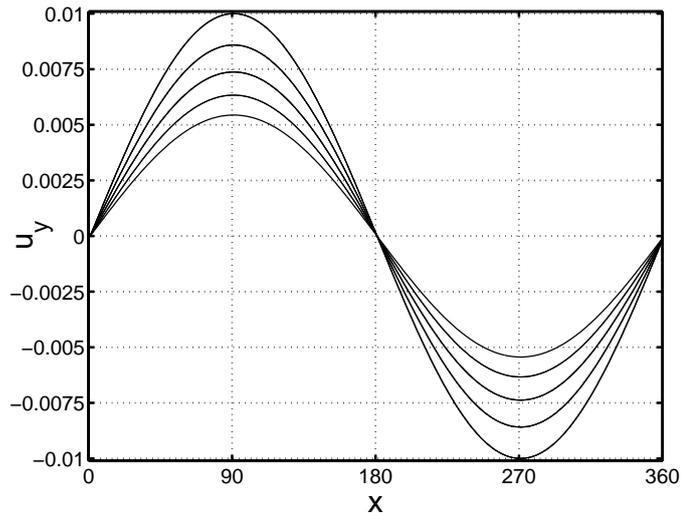


Figura 5.4: Decaimento de um perfil sinusoidal de velocidade.  $n = 1.0$ ,  $\theta = 0.0$ ,  $\nu = 0.5$ ,  $t = [0 - 4000]$ , rede  $D2Q9$  com  $L = 360$ .

Da mesma forma que na simulação da propagação de ondas de choque, o modelo de terceira ordem  $D2V17a$  mostrou-se mais sensível aos desvios de temperatura do que o modelo  $D2V17b$ , também de terceira ordem, e instável para valores de  $\theta \leq -0.25$ , mesmo em simulações com pequenas perturbações de velocidade.

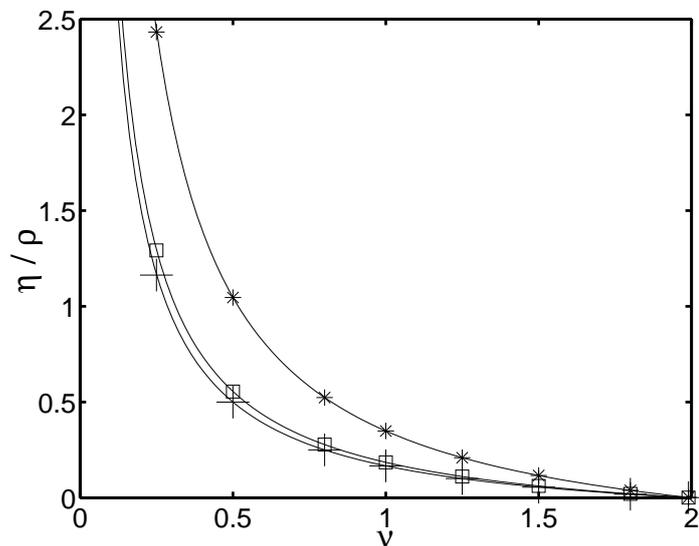


Figura 5.5: Viscosidade cinemática vs.  $\nu$ .  $n = 1.0$ ,  $\theta = 0.0$ ,  $u_0 = 0.01$ . Modelos  $D2Q9$  (+),  $D2V17a$  (□) e  $D2V37$  (\*). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

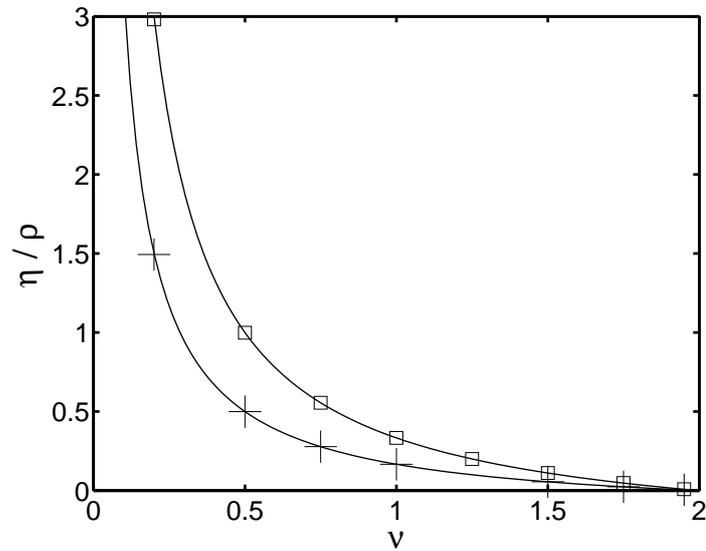


Figura 5.6: Viscosidade cinemática vs.  $\nu$ .  $n = 1.0$ ,  $\theta = 0.0$ ,  $u_0 = 0.01$ . Modelos  $D3Q19$  (+),  $D3V39$  (□). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

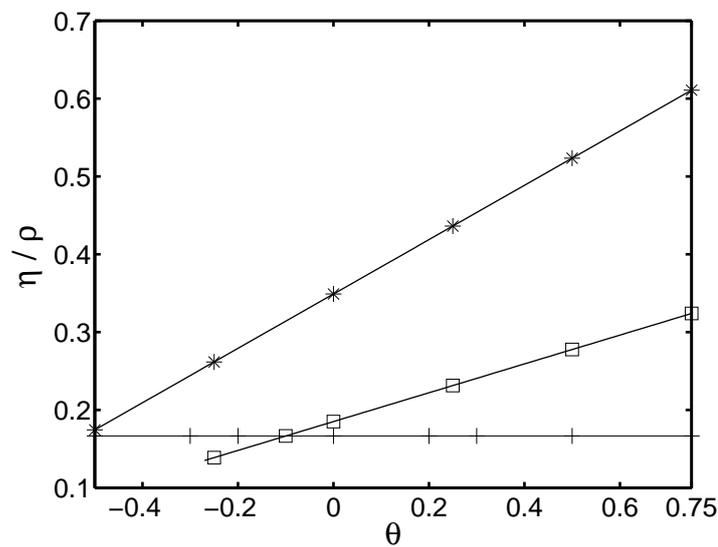


Figura 5.7: Viscosidade cinemática vs.  $\theta$ .  $n = 1.0$ ,  $\nu = 1.0$ ,  $u_0 = 0.01$ . Modelos  $D2Q9$  (+),  $D2V17a$  (□) e  $D2V37$  (\*). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

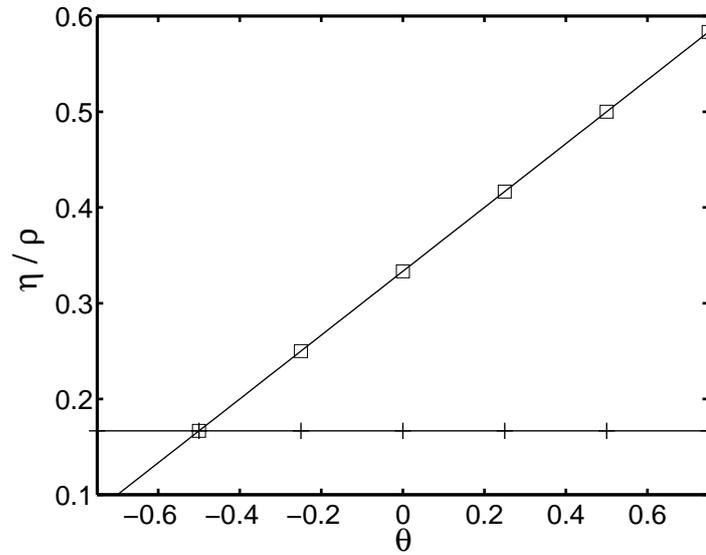


Figura 5.8: Viscosidade cinemática vs.  $\theta$ .  $n = 1.0$ ,  $\nu = 1.0$ ,  $u_0 = 0.01$ . Modelos  $D3Q19$  (+) e  $D3V39$  (□). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

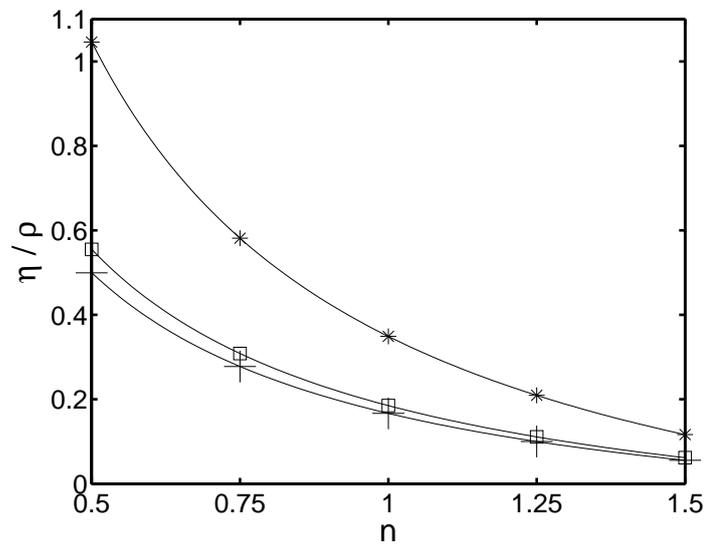


Figura 5.9: Viscosidade cinemática vs.  $n$ .  $\nu = 1.0$ ,  $\theta = 1.0$ ,  $u_0 = 0.01$ . Modelos  $D2Q9$  (+),  $D2V17a$  (□) e  $D2V37$  (\*). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

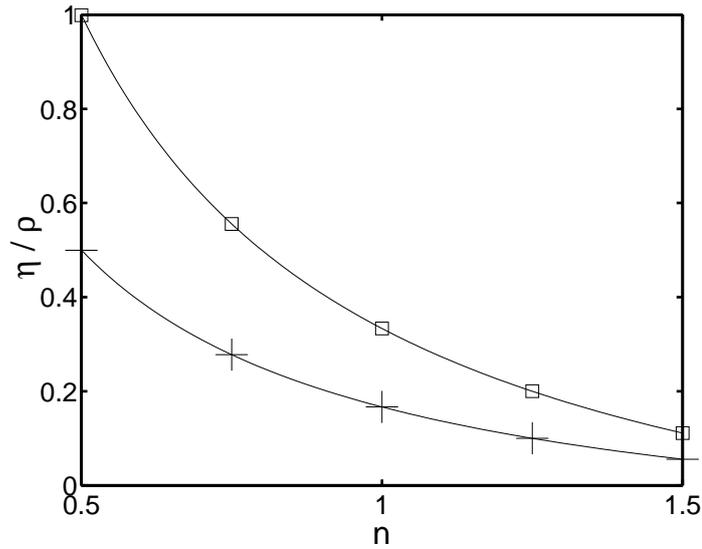


Figura 5.10: Viscosidade cinemática vs.  $n$ .  $\nu = 1.0$ ,  $\theta = 1.0$ ,  $u_0 = 0.01$ . Modelos  $D3Q19$  (+),  $D3V39$  (□). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

### 5.3.3 Transferência de calor

Para verificar as expressões da condutividade térmica na equação de balanço da energia, foi simulado um problema de transferência de calor num meio infinito, tendo como condição inicial um degrau de temperatura, da forma

$$T(x, t = 0) = \begin{cases} T_\infty + \Delta T & x < 0 \\ T_\infty & x > 0 \end{cases}. \quad (5.59)$$

O fluido se encontra inicialmente em repouso e com uma distribuição de pressão homogênea. A escolha destas condições garante que no transcurso da simulação, os campos de velocidade tenham valores desprezíveis e os termos convectivos e de dissipação viscosa possam ser anulados. A diferença de temperaturas  $\Delta T$  é considerada pequena o suficiente para assumir a condutividade térmica constante em todo o domínio. Desta forma o problema se reduz à condução de calor num meio gasoso, análoga ao problema de contato de corpos semi-infinitos com diferentes temperaturas. A evolução deste sistema é regida pela equação de difusão

$$\partial_t T - \alpha \partial_x^2 T = 0, \quad (5.60)$$

onde  $\alpha = \frac{\kappa}{\rho c_p}$  é a difusividade térmica, e cuja solução, sujeita as condições iniciais e de contorno descritas, é:

$$T(x, t) = T_\infty + \frac{1}{2} \Delta T \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right), \quad (5.61)$$

A Figura (5.11) mostra a evolução no campo de temperatura para uma diferença inicial de temperatura de  $0.01T_\infty$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica

calculada com a condutividade térmica aparente Eq. (5.41), usando os valores das propriedades iniciais no intervalo  $x > 0$ . Por esta razão observa-se uma ligeira assimetria no perfil de temperatura das duas regiões e uma maior discrepância com a solução analítica à esquerda da descontinuidade inicial. Verificou-se também que as hipóteses sobre os campos de pressão e velocidade são válidas, inclusive nos instantes iniciais.

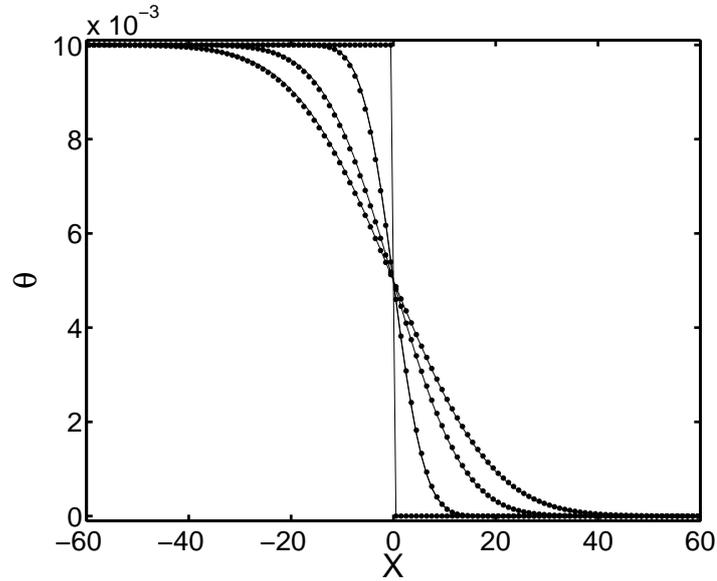


Figura 5.11: Evolução do perfil de temperatura.  $n = 0.9$ ,  $\nu = 1.5$ ,  $\theta_\infty = 0.0$  e  $\Delta\theta = 0.01$ .  $t = [0, 100, 500, 1000]$ . Modelo  $D2V37$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (5.61).

As Figuras (5.12) a (5.14) apresentam a comparação das expressões analíticas, Eqs. (5.41) e (5.54), com os resultados da simulação, usando o modelo de quarta ordem  $D2V37$  e os modelos de terceira ordem  $D2V17a$  e  $D3V39$ , para diferentes valores da frequência de colisão  $\nu$ , temperatura inicial  $T_\infty$  e densidade inicial  $n$ . Como nas simulações anteriores os erros são inferiores a 0.1% em todos os casos.

As simulações foram reproduzidas com o modelo  $D2V17b$  com idênticos resultados, mas com uma faixa mais ampla de desvios de temperatura realizáveis, com relação ao modelo  $D2V17a$ . Este aumento na estabilidade permite, por exemplo, realizar uma simulação com os mesmos valores de densidade, frequência de colisão e diferença de temperatura da Fig. (5.11) com desvios de temperatura  $\theta_\infty = -0.5$ .

### 5.3.4 Discussão

Além dos experimentos numéricos especificamente projetados para verificar a velocidade do som, as equações macroscópicas e os coeficientes de transporte, diversas simulações foram realizadas para testar a isotropia das soluções, pela propagação de ondas sonoras e pela difusão de perturbações de densidade e temperatura em meios homogêneos.

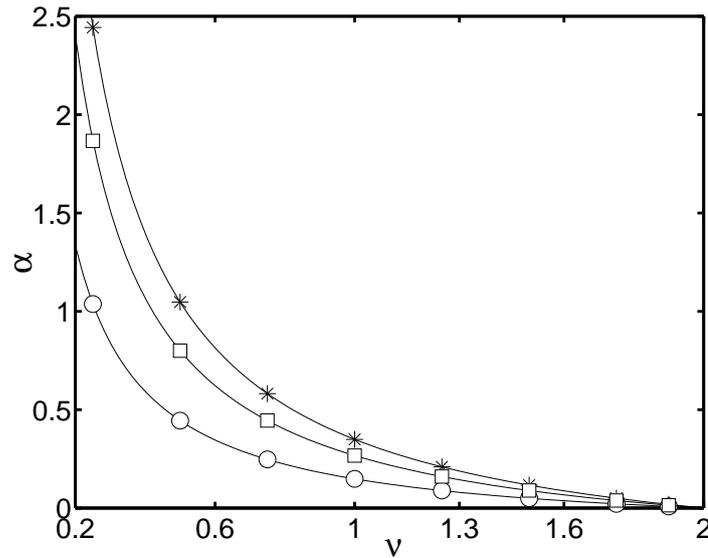


Figura 5.12: Difusividade térmica vs.  $\nu$ .  $n = 1.0$ ,  $\theta_\infty = 0.25$  e  $\Delta\theta = 0.01$ . Modelos  $D2V17a$  ( $\circ$ ),  $D2V37$  ( $*$ ) e  $D3V39$  ( $\square$ ). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

Inicialmente, o ponto central de um domínio bidimensional possui um valor de densidade ou temperatura maior que suas vizinhanças, nas quais o fluido se encontra em repouso e com temperatura e pressão uniformes. Tanto a perturbação de densidade como de temperatura tem uma evolução temporal dada pela solução da equação de difusão. Durante este processo de evolução verificou-se que os contornos de propriedades constantes praticamente coincidem com a solução analítica e a distribuição do erro é simétrica com relação ao ponto central, evidenciando a isotropia do método de solução.

Como foi observado nas seções anteriores, o método de Boltzmann para gases em rede com operador de colisão BGK consegue simular corretamente escoamentos compressíveis não-isotérmicos desde que sejam empregados modelos de quarta ordem ou superiores para a função distribuição Maxwelliana local e para as redes formadas pelos vetores de velocidade molecular. Em outros casos a total consistência com as equações hidrodinâmicas não está garantida e depende das condições particulares de cada escoamento.

Nos modelos de segunda ordem as equações de balanço da quantidade de movimento e de energia não são corretamente representadas, porém, tais modelos podem ser empregados na simulação de escoamentos a baixo número de Mach, nos quais os efeitos térmicos não sejam relevantes e tenham apenas mudanças desprezíveis de pressão. Sob estas condições é possível considerar a densidade quase constante e o escoamento regido pelas equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis. Este é o caso do modelo  $D2Q9$  apresentado e de sua versão convencional (atérmica), extensamente explorada na literatura [Chen e Doolen, 1998, Succi, 2001], cuja função distribuição de equilíbrio não possui termos envolvendo o desvio de temperatura  $\theta$ .

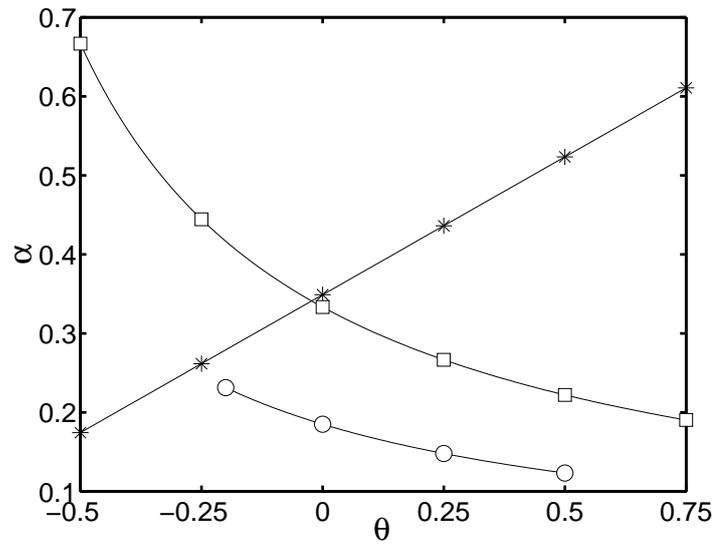


Figura 5.13: Difusividade térmica vs.  $\theta_\infty$ .  $n = 1.0$ ,  $\nu = 1.0$  e  $\Delta\theta = 0.01$ . Modelos *D2V17a* (○), *D2V37* (\*) e *D3V39* (□). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

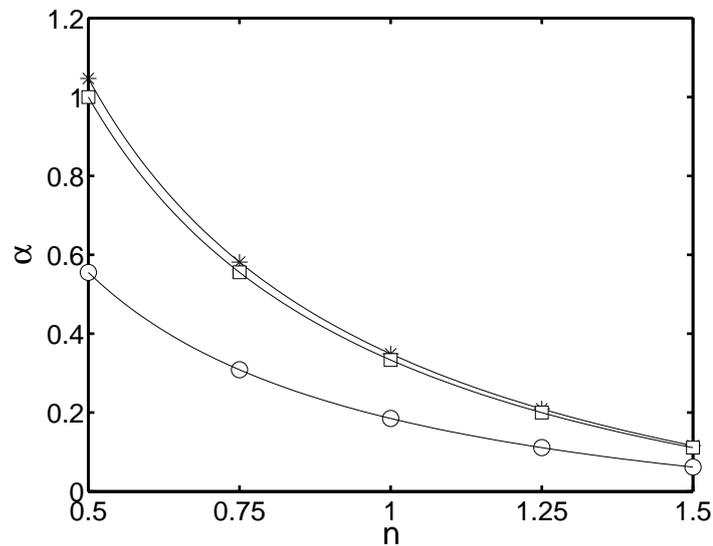


Figura 5.14: Difusividade térmica vs.  $n$ .  $\theta_\infty = 0.0$ ,  $\nu = 1.0$  e  $\Delta\theta = 0.01$ . Modelos *D2V17a* (○), *D2V37* (\*) e *D3V39* (□). As linhas contínuas correspondem às expressões analíticas.

Modelos de terceira ordem com redes como as  $D2V17a/b$ ,  $D3V39$  e  $D3V41$  representam adequadamente a equação de balanço da quantidade de movimento e podem ser aplicados, com pequenos erros, na equação de balanço da energia, na simulação de escoamentos a baixo número de Mach e com pequenas variações de pressão e temperatura.

O modelo de quarta ordem com rede  $D2V37$  é, de acordo com o conhecimento do autor, o único modelo que usa a equação de Boltzmann para gases em rede, totalmente consistente e capaz de resolver escoamentos compressíveis com mudanças de temperatura consideráveis. Em contraste com outros modelos LBE, nos quais a energia e o fluxo de calor são calculados como momentos de uma função distribuição, determinada heurísticamente, a forma da função distribuição de equilíbrio empregada no operador de colisão BGK foi determinada mediante um processo de aproximação que leva em conta suas características físicas e matemáticas de forma mais rigorosa. Conseqüentemente esta aproximação é menos suscetível, desde o ponto de vista da estabilidade numérica, aos gradientes de densidade e à amplitude dos desvios de temperatura. O modelo incorpora também a dissipação viscosa e o trabalho de compressão na equação da energia, diferentemente das abordagens em que a energia interna é tratada como um escalar passivo e que possuem estabilidade numérica comparável.

Nas diversas simulações observou-se que a estabilidade depende fortemente da ordem de aproximação à função distribuição e à rede utilizadas e das condições do escoamento dadas pelos valores da densidade, velocidade e temperatura e pela magnitude dos seus gradientes. Em geral verificou-se que, para uma dada configuração inicial, a estabilidade do método diminui com a frequência de colisão e com o valor absoluto do desvio de temperatura, sendo o modelo  $D2V17a$  o mais sensível a estes parâmetros.

A clara desvantagem dos modelos de alta ordem é o número elevado de vetores de rede necessários para avaliar os momentos da função distribuição. Tal exigência torna pouco competitiva a implementação de modelos de quarta ordem em três dimensões.

## Capítulo 6

# Método LBGK para misturas binárias de gases ideais

A derivação de uma equação de Boltzmann para gases em rede, partindo da equação de transporte de Boltzmann com velocidades discretas para uma mistura de gases ideais, é apresentada neste capítulo. O modelo cinético proposto por Morse [1964] e Hamel [1965] é utilizado para representar as colisões entre moléculas de espécies diferentes, por causa da sua relativa simplicidade e facilidade de implementação.

Usando um procedimento de discretização da equação de Boltzmann com velocidades discretas com o modelo de colisão BGK para misturas binárias, análogo ao desenvolvido no capítulo 5, obtém-se para a espécie  $a$  a equação

$$f_i^a(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^a(\mathbf{x}, t) + n_a \nu_{aa} \left( f_i^{aa(M)} - f_i^a \right) \Delta t + n_b \nu_{ab} \left( f_i^{ab(M)} - f_i^a \right) \Delta t, \quad (6.1)$$

onde as funções distribuição Maxwellianas,  $f_i^{aa(M)}$  e  $f_i^{ab(M)}$ , possuem a mesma forma que às dos gases simples.

De acordo com o exposto no capítulo anterior, a discretização temporal deve estar acoplada com a discretização espacial através da relação  $\mathbf{c}_i = \Delta \mathbf{x}_i / \Delta t$  para obter a forma simples da equação de Boltzmann para gases em rede. Assim, se dois gases de massas moleculares diferentes se encontram à mesma temperatura estes irão possuir velocidades do som diferentes e, portanto, no mesmo passo de tempo as partículas serão propagadas a distâncias diferentes, sendo que a partícula mais leve se deslocará a uma distância maior. Este inconveniente pode ser resolvido de várias formas.

A primeira delas consiste em utilizar redes diferentes para cada espécie, cujas relações de comprimento sejam iguais à raiz quadrada do inverso da relação de massas,  $\Delta x_{i,a} / \Delta x_{i,b} = \sqrt{m_b / m_a}$ . Com uma discretização deste tipo as duas populações seguem um esquema de colisão-propagação exato, mas sua aplicação está limitada a pequenas relações de massa devido a que de outra forma seria necessária a utilização de redes muito

finas. Esta discretização também está limitada aos casos em que é factível aproximar a raiz quadrada da relação de massas por números inteiros.

A segunda alternativa consiste em utilizar velocidades moleculares diferentes e a mesma discretização espacial e temporal para as duas espécies e redistribuir a massa do componente mais leve após a etapa de propagação, por um procedimento de interpolação conservativo [McCracken e Abraham, 2005].

Durante o processo de derivação da equação de Boltzmann com velocidades discretas os parâmetros  $\theta_{aa}$  e  $\theta_{ab}$  são utilizados para expressar os desvios da relação entre a *temperatura* e a massa molecular, da forma

$$\theta_{ab} = \frac{T_{ab} m_0}{T_0 m_a} - 1, \quad (6.2)$$

onde  $T_0$  e  $m_0$  são a temperatura e a massa molecular de referência. Assumindo que a massa de referência  $m_0$  foi escolhida de maneira a limitar o valor de  $\theta_{aa}$  e satisfazer a relação

$$\frac{(\theta_{aa} + 1)}{(\theta_{bb} + 1)} = \frac{T_a \mu_b}{T_b \mu_a}, \quad (6.3)$$

é factível usar a mesma discretização espacial e temporal para os dois gases.

Esta terceira alternativa de discretização mantém as vantagens relativas à facilidade de paralelização, à simplicidade e economia computacional do algoritmo e à exatidão na conservação da quantidade de massa, características do LBM para gases simples. Por estas razões, a mesma discretização espacial para os dois gases será assumida nos desenvolvimentos deste capítulo.

A relação de massas  $\frac{\mu_b}{\mu_a}$  praticável está limitada pela estabilidade numérica do método que, como foi visto no capítulo anterior para gases simples, depende também dos coeficientes de transporte, da magnitude dos desvios  $\theta_{ak}$  e dos gradientes das propriedades macroscópicas.

## 6.1 Equações hidrodinâmicas e análise de Chapman-Enskog para misturas binárias

Com o propósito de obter as expressões gerais para o fluxo mássico difusivo, o tensor pressão e o vetor fluxo de calor nas equações macroscópicas da mistura, a análise multiescala do modelo será feita sobre a discretização de uma equação com operadores de colisão aproximados, na forma da Eq. (3.129), que permitem a obtenção de uma aproximação à função distribuição de ordem zero independente das frequências de colisão e, por conseguinte, a aplicação do método de Chapman-Enskog convencional [Facin et al., 2004]. Esta aproximação é uma expansão em séries de Taylor das distribuições de velocidade Maxwellianas nos operadores de colisão em torno de  $f_i^{a(M)} = f_i^{a(M)}(n_a, \mathbf{u}, T)$ , válida para sistemas próximos do equilíbrio, que satisfazem as relações

$$\frac{|T_a - T_b|}{T} \ll 1 \quad \text{e} \quad \frac{|\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b|}{|\mathbf{u}|} \ll 1. \quad (6.4)$$

Cabe notar que o modelo dado pela Eq. (3.129) não satisfaz o balanço de energia da mistura. A soma dos momentos  $\frac{m_k c_i^2}{2}$  das equações para cada espécie possui um erro, na forma de um termo fonte, proporcional ao quadrado da diferença de velocidades das espécies.

Uma análise de ordem de grandeza dos termos na equação de Boltzmann para gases em rede da mistura, similar à apresentada na seção 3.4, conduz a

$$\partial_t f_i^a + c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i^a + \epsilon \frac{\Delta t}{2} (\partial_t \partial_t f_i^a + 2c_{i\alpha} \partial_\alpha \partial_t f_i^a + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta f_i^a) = \frac{1}{\epsilon} J_i^a, \quad (6.5)$$

onde  $J_i^a = J_i^{aa} + J_i^{ab}$  e assumiu-se que as relações dos tempos médios entre colisões  $aa$  e  $ab$  e o tempo característico macroscópico são da mesma ordem de grandeza e por sua vez da mesma ordem de grandeza que o número de Knudsen da mistura,  $\epsilon_{aa} \sim \epsilon_{ab} \sim \epsilon \sim Kn$ .

Expandindo a função distribuição para cada componente e o operador derivada temporal da forma

$$f_i^a = f_i^{a(0)} + \epsilon f_i^{a(1)} + \epsilon^2 f_i^{a(2)} + \dots, \quad (6.6)$$

$$\partial_t = \partial_0 + \epsilon \partial_1 + \dots, \quad (6.7)$$

e isolando os termos da mesma ordem em  $\epsilon$ , na Eq. (6.5), obtém-se as equações até segunda ordem de Knudsen:

$$J_i^{aa(0)} + J_i^{ab(0)} = 0, \quad (6.8)$$

$$J_i^{aa(1)} + J_i^{ab(1)} = \partial_0 f_i^{a(0)} + c_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{a(0)}, \quad (6.9)$$

$$\begin{aligned} J_i^{aa(2)} + J_i^{ab(2)} &= \partial_0 f_i^{a(1)} + \partial_1 f_i^{a(0)} + c_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{a(1)} + \frac{\Delta t}{2} \partial_0 \left( \partial_0 f_i^{a(0)} + c_{i,\alpha} \partial_\alpha f_i^{a(0)} \right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} c_{i,\alpha} \partial_\alpha \left( \partial_0 f_i^{a(0)} + c_{i,\beta} \partial_\beta f_i^{a(0)} \right), \end{aligned} \quad (6.10)$$

com o operador de colisão em primeira ordem  $J_i^{a(1)} = J_i^{aa(1)} + J_i^{ab(1)}$  dado por

$$\begin{aligned} J_i^{a(1)} &= \sum_{k=a,b} n_k \nu_{ak} \left( -f_i^{a(1)} + f_i^{a(M)} \left[ \frac{m_a}{kT} (c_{i\alpha} - u_\alpha) (u_{ak\alpha} - u_\alpha) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{T_{ak} - T}{T} \left( \frac{m_a}{2kT} (c_{i\alpha} - u_\alpha)^2 - \frac{D}{2} \right) \right] \right). \end{aligned} \quad (6.11)$$

Como conseqüência da equação de ordem zero de Knudsen as correções da função distribuição de cada espécie estão restritas por

$$\rho_a = m_a \sum_i f_i^{a(0)}, \quad \sum_i f_i^{a(l)} = 0 \quad \forall l \geq 1, \quad (6.12)$$

$$j_{a\alpha}^{(l)} = \rho_a (u_{a\alpha}^{(l)} - u_\alpha) = m_a \sum_i f_i^{a(l)} c_{i\alpha}, \quad (6.13)$$

$$\rho_a \varepsilon_a^{(1)} = D n_a k (T_a^{(1)} - T) = m_a \sum_i f_i^{a(1)} C_i^2. \quad (6.14)$$

Nas seções seguintes assumir-se-á que as correções de primeira ordem ao fluxo mássico difusivo, o tensor pressão e o vetor fluxo de calor são suficientes para descrever a termohidrodinâmica da mistura. No desenvolvimento também será assumido que o modelo para a distribuição Maxwelliana e as redes empregadas permitem calcular exatamente os momentos hidrodinâmicos requeridos.

### 6.1.1 Equações de Euler

A solução das equações em ordem zero é a distribuição Maxwelliana com as propriedades locais da mistura,  $f_i^{a(M)}(n_a, \mathbf{u}, T)$ . Calculando o momento  $m_a$  da equação em primeira ordem de Knudsen obtém-se a equação de balanço de massa de primeira ordem para a espécie  $a$

$$\partial_0 \rho_a + \partial_\alpha \rho_a u_\alpha = 0. \quad (6.15)$$

Somando as equações de balanço de massa das duas espécies obtém-se a equação de balanço de massa da mistura

$$\partial_0 \rho + \partial_\alpha \rho u_\alpha = 0. \quad (6.16)$$

O momento  $m_a c_{i\alpha}$  da equação de primeira ordem de Knudsen fornece a equação de balanço da quantidade de movimento da espécie  $a$

$$\partial_0 \rho_a u_\alpha + \partial_\beta \rho_a u_\alpha u_\beta + \partial_\alpha n_a k T = -\frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} \rho j_{a\alpha}, \quad (6.17)$$

que somada à equação análoga para a espécie  $b$  resulta na equação de balanço da quantidade de movimento da mistura em primeira ordem de Knudsen ou equação de Euler

$$\partial_0 \rho u_\alpha + \partial_\beta \rho u_\alpha u_\beta + \partial_\alpha n k T = 0, \quad (6.18)$$

onde  $m_{ab} = m_a + m_b$  e a relação  $\rho(u_{a\alpha} - u_\alpha) = \rho_b(u_{a\alpha} - u_{b\alpha})$  foi utilizada para expressar o fluxo mássico difusivo em função da diferença de velocidades hidrodinâmicas das espécies.

Das equações de balanço de massa e de quantidade de movimento da mistura obtém-se

$$\partial_0 u_\alpha + u_\beta \partial_\beta u_\alpha + \frac{1}{\rho} \partial_\alpha n k T = 0, \quad (6.19)$$

que, junto com as equações de balanço de massa e quantidade de movimento da espécie  $a$ , permite obter a relação

$$\partial_0 \rho_a u_\alpha + \partial_\beta \rho_a u_\alpha u_\beta + \partial_\alpha n_a k T = \partial_\alpha n_a k T - \frac{\rho_a}{\rho} \partial_\alpha n k T. \quad (6.20)$$

Como conseqüência das restrições impostas às distribuições de ordem zero, as equações de estado dos componentes e da mistura são as de gases ideais, ou seja, a pressão dos componentes nas equações em primeira ordem de Knudsen é a pressão parcial  $p_a = n_a k T$ , de acordo com a lei de Dalton, e a pressão da mistura é  $p = n k T = \frac{n}{n_a} n_a k T$ . Usando estas relações pode-se escrever

$$\log n_a k T = \log p + \log \frac{n_a}{n}, \quad (6.21)$$

o que permite expressar a derivada espacial da pressão parcial como

$$\partial_\alpha n_a k T = \frac{n_a}{n} \partial_\alpha p + p \partial_\alpha \frac{n_a}{n}. \quad (6.22)$$

Substituindo a expressão anterior no lado direito da Eq. (6.20) obtém-se,

$$\partial_0 \rho_a u_\alpha + \partial_\beta \rho_a u_\alpha u_\beta + \partial_\alpha n_a k T = p d_{a\alpha} = -\frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} \rho j_{a\alpha}, \quad (6.23)$$

onde

$$d_{a\alpha} = \partial_\alpha \frac{n_a}{n} + \left( \frac{n_a}{n} + \frac{\rho_a}{\rho} \right) \partial_\alpha \log p = \partial_\alpha \frac{n_a}{n} + \frac{n_a n_b}{n \rho} (m_b - m_a) \partial_\alpha \log p \quad (6.24)$$

é a força difusiva da espécie  $a$ .

O momento  $\frac{1}{2} m_a c_i^2$  da equação de primeira ordem de Knudsen é

$$\partial_0 \left( \frac{D}{2} n_a k T + \frac{u^2}{2} \rho_a \right) + \partial_\alpha \left( \frac{(D+2)}{2} n_a k T u_\alpha + \frac{u^2}{2} \rho_a u_\alpha \right) = G, \quad (6.25)$$

onde o termo  $G$  é o momento do operador de colisão  $\sum_i^b J_i^{a(1)} \frac{1}{2} m_a c_i^2$  que, após escrever  $T_{ab}$  explicitamente segundo a Eq. (3.128), reduz-se a

$$G = \rho_a \rho_b \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} \left( (u_{b\beta} - u_{a\beta}) u_\beta + \frac{Dk}{m_{ab}} (T_b - T_a) + \frac{\mu_b}{2} (\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_a)^2 \right). \quad (6.26)$$

Somando as equações de balanço de energia dos componentes em primeira ordem de Knudsen obtém-se a equação de balanço de energia para a mistura

$$\partial_0 \left( \frac{D}{2} nkT + \frac{u^2}{2} \rho \right) + \partial_\alpha \left( \frac{(D+2)}{2} nkT u_\alpha + \frac{u^2}{2} \rho u_\alpha \right) = \rho_a \rho_b \frac{\nu_{ab}}{2m_{ab}} (\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_a)^2. \quad (6.27)$$

Assumindo que o termo do lado direito da equação, proporcional ao quadrado da diferença das velocidades, é de ordem desprezível, e utilizando as Eqs. (6.16) e (6.19) para eliminar as derivadas temporais, obtém-se a equação de transporte para a temperatura em primeira ordem de Knudsen

$$\partial_0 T + u_\alpha \partial_\alpha T + \frac{2}{D} T \partial_\alpha u_\alpha \approx 0. \quad (6.28)$$

### 6.1.2 Equações de Navier - Stokes

Em segunda ordem de Knudsen a equação de balanço da massa da espécie  $a$  é

$$\partial_1 \rho_a + \partial_\alpha j_{a\alpha}^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha \left( -\frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} \rho j_{a\alpha} \right) = 0. \quad (6.29)$$

Somando as equações em primeira e segunda ordens e fatorando  $j_{a\alpha} \approx j_{a\alpha}^{(1)}$  obtém-se a equação de difusão da massa para a espécie  $a$

$$\partial_t \rho_a + \partial_\alpha \rho_a u_\alpha = -\partial_\alpha j_{a\alpha}^*, \quad (6.30)$$

onde o fluxo mássico difusivo aparente é dado pela expressão

$$j_{a\alpha}^* = -\frac{n^2}{\rho} m_a m_b \mathcal{D}_{ab}^* d_{a\alpha}, \quad (6.31)$$

e o coeficiente de difusão binário aparente está dado por

$$\mathcal{D}_{ab}^* = \frac{p\rho}{n^2 m_a m_b} \left( \frac{m_{ab}}{\rho \nu_{ab}} - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (6.32)$$

A Equação (6.30) é exata até segunda ordem de Knudsen e, com exceção dos termos espúrios introduzidos pela discretização, corresponde à aproximação para moléculas de Maxwell [Chapman e Cowling, 1970].

O momento  $m_a c_{i\beta}$  da equação em segunda ordem de Knudsen é

$$\partial_0 j_{a\beta}^{(1)} + \partial_1 \rho_a u_\beta + \partial_\alpha \Pi_{a\alpha\beta}^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \partial_0 p d_{a\beta} + \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha I = \sum_i J_i^{a(2)} m_a c_{i\beta}, \quad (6.33)$$

com a expressão  $I$  dada por

$$I = \partial_0 \sum_i f_i^{q(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} + \partial_\gamma \sum_i f_i^{q(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma}. \quad (6.34)$$

Avaliando os momentos de segunda e terceira ordem e utilizando as equações de Euler

para eliminar as derivadas temporais tem-se

$$I = n_a k T \left( \partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \right) + u_\alpha p d_{a\beta} + u_\beta p d_{a\alpha}. \quad (6.35)$$

A função  $I$  é também o momento de segunda ordem do operador de colisão  $J_i^{a(1)}$ , assim

$$I = \sum_i J_i^{a(1)} m_a c_{i\alpha} c_{i\beta} = \Gamma_a \left( u_\alpha j_{a\beta} + u_\beta j_{a\alpha} - \Pi_{a\alpha\beta}^{(1)} \right) + \rho_a \rho_b \frac{\nu_{ab}}{m_0} (u_{b\gamma} - u_{a\gamma}) (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma}) + \sum_{k=a,b} n_k \nu_{ak} n_a k (T_{ak} - T) \delta_{\alpha\beta}, \quad (6.36)$$

com

$$\Gamma_a = n_a \nu_{aa} + n_b \nu_{ab}. \quad (6.37)$$

Usando a relação anterior pode-se escrever, após álgebra,

$$\Pi_{a\alpha\beta}^{(1)} = -\frac{n_a k T}{\Gamma_a} \left( \partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \right) + u_\alpha j_{a\beta} + u_\beta j_{a\alpha} + \frac{n_a k}{\Gamma_a} \sum_{k=a,b} n_k \nu_{ak} (T_{ak} - T) \delta_{\alpha\beta}. \quad (6.38)$$

Somando as equações de balanço de quantidade de movimento para a espécie  $a$  em primeira e segunda ordem de Knudsen tem-se

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_a u_{a\beta} + \partial_\alpha \left( \rho_a u_\alpha u_\beta + n_a k T \delta_{\alpha\beta} + \Pi_{a\alpha\beta}^{(1)} \right) - \frac{\Delta t}{2} \partial_0 \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} \rho j_{a\alpha} \\ + \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha \left( \Gamma_a \left( u_\alpha j_{a\beta} + u_\beta j_{a\alpha} - \Pi_{a\alpha\beta}^{(1)} \right) - \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} \rho \left( u_\alpha j_{a\beta} + u_\beta j_{a\alpha} \right) \right. \\ \left. + \sum_{k=a,b} n_k \nu_{ak} n_a k (T_{ak} - T) \delta_{\alpha\beta} \right) = -\frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} \rho j_{a\alpha} + \sum_i J_i^{a(2)} m_a c_{i\beta}. \end{aligned} \quad (6.39)$$

Somando a equação anterior com a versão análoga para a espécie  $b$  e eliminando os fluxos mássicos difusivos, com o auxílio da relação Eq. (6.23), obtém-se a equação de balanço da quantidade de movimento da mistura

$$\partial_t \rho u_\beta + \partial_\alpha \rho u_\alpha u_\beta = -\partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^*, \quad (6.40)$$

com o tensor pressão aparente dado por

$$\Pi_{\alpha\beta}^* = p \delta_{\alpha\beta} - \eta^* \left( \partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (6.41)$$

e a viscosidade dinâmica aparente por

$$\eta^* = kT \left( \frac{n_a}{\Gamma_a} - \frac{n_a}{2} \Delta t + \frac{n_b}{\Gamma_b} - \frac{n_b}{2} \Delta t \right). \quad (6.42)$$

Na equação (6.40) foram omitidos os termos proporcionais a

$$\partial_\alpha \left( \frac{1}{\Gamma_a} \sum_{k=a,b} n_k \nu_{ak} n_a k (T_{ak} - T) + \frac{1}{\Gamma_b} \sum_{k=a,b} n_k \nu_{bk} n_b k (T_{bk} - T) \right), \quad (6.43)$$

que são da ordem de  $\rho_a \rho_b (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)^2$ , como pode ser demonstrado usando as definições das *temperaturas*  $T_{ab}$  e  $T_{ba}$  e da temperatura da mistura, de acordo com a Eq. (3.54).

Nas regiões onde a concentração da espécie  $b$  é nula a expressão anterior se reduz à viscosidade dinâmica aparente de um gás simples

$$\eta_a^* = n_a kT \left( \frac{1}{n_a \nu_{aa}} - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (6.44)$$

A equação de balanço de energia para a espécie  $a$  de segunda ordem de Knudsen é

$$\begin{aligned} \partial_0 \left( \rho_a \varepsilon_a^{(1)} + u_\beta j_{\alpha\beta}^{(1)} \right) + \partial_1 \left( \frac{D}{2} n_a kT + \frac{u^2}{2} \rho_a \right) + \partial_\alpha \left( q_{a\alpha}^{(1)} + \rho_a \varepsilon_a^{(1)} u_\alpha + u_\alpha u_\beta j_{a\beta}^{(1)} \right. \\ \left. + \frac{u^2}{2} j_{a\alpha}^{(1)} + u_\beta \Pi_{a\alpha\beta}^{(1)} \right) + \frac{\Delta t}{2} \partial_0 G + \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha M = \sum_i \frac{1}{2} J_i^{a(2)} m_a c_i^2, \end{aligned} \quad (6.45)$$

onde a função  $M$  está dada por

$$M = \partial_0 \sum_i f_i^{q(0)} \frac{m_a}{2} c_{i\alpha} c_i^2 + \partial_\gamma \sum_i f_i^{q(0)} \frac{m_a}{2} c_{i\alpha} c_{i\gamma} c_i^2, \quad (6.46)$$

que, com o auxílio das equações de balanço das propriedades da mistura em primeira ordem Knudsen, pode ser escrita como

$$M = \frac{(D+2)}{2m_a} n_a kT \partial_\alpha T + n_a kT u_\beta \sigma_{a\alpha\beta} + p d_{a\alpha} \left( \frac{(D+2)}{2m_a} kT + \frac{u^2}{2} \right) + p u_\alpha u_\beta d_{a\beta}, \quad (6.47)$$

com  $\sigma_{a\alpha\beta} = (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{D} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta})$ .

O termo  $M$  é também o momento do operador de colisão de primeira ordem  $\sum_i^b J_i^{a(1)} \frac{m_a}{2} c_{i\alpha} c_i^2$ . Utilizando as definições do tensor pressão aparente e o fluxo mássico difusivo aparente e eliminando os termos proporcionais a  $(\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)^2$  obtém-se as equações de balanço de energia das espécies. Somando estas duas equações obtém-se a equação de balanço da energia da mistura

$$\partial_t \left( \frac{D}{2} n kT + \frac{u^2}{2} \rho \right) + \partial_\alpha \left( \frac{D}{2} n kT u_\alpha + \frac{u^2}{2} \rho u_\alpha + u_\beta \Pi_{\alpha\beta}^* + q_\alpha^* \right) = 0, \quad (6.48)$$

onde o fluxo não-convectivo de energia aparente é dado por

$$q_\alpha^* = -\kappa^* \partial_\alpha T + \frac{(D+2)}{2} kT \left( \frac{j_{a\alpha}^*}{m_a} + \frac{j_{b\alpha}^*}{m_b} \right), \quad (6.49)$$

cujo primeiro termo é a difusão de energia regida pela lei de Fourier, com condutividade térmica aparente dada por

$$\kappa^* = \frac{(D+2)}{2} k^2 T \left( \frac{n_a}{m_a \Gamma_a} - \frac{n_a}{2m_a} \Delta t + \frac{n_b}{m_b \Gamma_b} - \frac{n_b}{2m_b} \Delta t \right), \quad (6.50)$$

e o segundo representa o transporte de entalpia pelas correntes difusivas de cada espécie, com relação a velocidade baricêntrica da mistura.

Como resultado desta análise temos os coeficientes de transporte da mistura, que com exceção dos termos espúrios, proporcionais a  $\frac{\Delta t}{2}$ , correspondem à análise das equações de Boltzmann apresentada no capítulo 3.

No desenvolvimento da equação de difusão da massa foram calculados momentos de até terceira ordem. No caso da equação de balanço da quantidade de movimento e de balanço de energia foram necessários os cálculos de momentos de quarta e quinta ordem respectivamente. Devido ao intrincado das expressões algébricas que resultam da avaliação dos momentos com aproximações de baixa ordem, os erros introduzidos por estas aproximações serão estabelecidos experimentalmente, levando em conta também que não há uma equivalência total entre as Eqs. (3.121), (3.122) e (3.129).

## 6.2 Verificação e resultados numéricos

Para verificar os resultados da análise de Chapman-Enskog foram realizadas simulações do processo de relaxação homogênea, cuja solução é a base dos modelos BGK para misturas, e de problemas governados pela equação de advecção-difusão, com diferentes condições iniciais. Também será abordada a avaliação dos erros introduzidos na solução da equação de difusão de massa por causa da não-indiferenciabilidade de componentes idênticos.

Como no capítulo 5, o passo de tempo será considerado unitário e as velocidades e comprimentos serão normalizados usando o passo da rede  $c_L$ . A escolha da massa molecular de referência, utilizada na definição das grandezas  $\theta_{ak}$ , será aquela que permita satisfazer a relação Eq. (6.3) mantendo os valores de  $\theta_{aa}$  e  $\theta_{bb}$  separados simetricamente com relação ao desvio nulo. De forma semelhante, as massas moleculares adimensionais dos componentes correspondem aos seus valores reduzidos  $\mu_a$  e  $\mu_b$ .

### 6.2.1 Relaxação homogênea

Em uma mistura de gases cujas funções distribuição são espacialmente homogêneas, mas com diferentes propriedades macroscópicas, as diferenças entre a velocidade hidrodinâ-

mica das espécies e as *temperaturas* dos componentes diminuem enquanto o sistema se aproxima do estado de equilíbrio global. Este processo é representativo da última etapa de relaxação e foi utilizado por Morse [1964] e Hamel [1965] para determinar as expressões dos parâmetros  $\mathbf{u}_{ab}$  e  $T_{ab}$  no caso de moléculas de Maxwell. A capacidade do esquema LBE de reproduzir fielmente este processo foi testada em diversas configurações iniciais, em sistemas com massas moleculares diferentes e amplas variações nas propriedades macroscópicas das espécies.

A dinâmica do processo de relaxação homogênea no modelo escolhido é governada pela solução da Eq. (6.5). Durante o processo de relaxação os gradientes da função distribuição são nulos, portanto as equações de balanço em primeira e segunda ordem de Knudsen são

$$\partial_0 f_i^{a(0)} = J_i^{a(1)}, \quad (6.51)$$

$$\partial_0 f_i^{a(1)} + \partial_1 f_i^{a(0)} + \frac{\Delta t}{2} \partial_0 \left( \partial_0 f_i^{a(0)} \right) = J_i^{a(2)}. \quad (6.52)$$

Os momentos  $m_a c_{i\alpha}$  destas equações são equivalentes a

$$\partial_0 \rho_a u_\alpha = -\rho \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} j_{a\alpha}, \quad (6.53)$$

$$\partial_0 j_{a\alpha}^{(1)} + \partial_1 \rho_a u_\alpha + \frac{\Delta t}{2} \partial_0 \left( -\rho \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} j_{a\alpha} \right) = 0. \quad (6.54)$$

Somando as equações das duas ordens, considerando que  $\partial_0 \rho_a u_{a\alpha} = \partial_0 \rho_a u_\alpha + \partial_0 j_{a\alpha}^{(1)}$  e  $\partial_t \rho_a \approx \partial_0 \rho_a + \partial_1 \rho_a = 0$ , a derivada temporal da velocidade do componente  $a$  pode ser escrita explicitamente como

$$\partial_0 u_{a\alpha} + \partial_1 u_\alpha + \frac{\Delta t}{2} \partial_0 \left( -\frac{\rho}{\rho_a} \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} j_{a\alpha} \right) = -\frac{\rho}{\rho_a} \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} j_{a\alpha}. \quad (6.55)$$

Subtraindo a expressão análoga para a derivada temporal da velocidade do componente  $b$  obtém-se a equação

$$\partial_0 (u_{a\alpha} - u_{b\alpha}) \left( 1 - \rho \frac{\Delta t}{2} \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} \right) = -\rho \frac{\nu_{ab}}{m_{ab}} (u_{a\alpha} - u_{b\alpha}), \quad (6.56)$$

cujas soluções são

$$\Delta \mathbf{u} = \Delta \mathbf{u}_0 \exp(-\alpha_{\mathbf{u}} t), \quad (6.57)$$

onde  $\Delta \mathbf{u} = (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)$  e

$$\alpha_{\mathbf{u}} = 1 / \left( \frac{m_{ab}}{\rho \nu_{ab}} - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (6.58)$$

O decaimento exponencial da diferença de *temperaturas* dos componentes obtém-se de forma similar. Para simplificar as expressões pode-se assumir que inicialmente os

componentes da mistura possuem a mesma velocidade hidrodinâmica ou então que o sistema se encontra em repouso. Desta forma, somando as equações de balanço da energia de cada espécie em primeira e segunda ordem de Knudsen e assumindo que  $\partial_0 \frac{D}{2} n_a k T_a = \partial_0 \left( \frac{D}{2} n_a k T + \rho_a \varepsilon_a^{(1)} \right)$ , a equação de evolução da diferença de *temperaturas* é dada por

$$\partial_0 (T_a - T_b) (1 - n \mu_a \mu_b \nu_{ab} \Delta t) = -2 n \mu_a \mu_b \nu_{ab} (T_a - T_b), \quad (6.59)$$

cuja solução é

$$\Delta T = \Delta T_0 \exp(-\alpha_T t), \quad (6.60)$$

onde  $\Delta T = (T_a - T_b)$  e

$$\alpha_T = 1 / \left( \frac{1}{2 n \mu_a \mu_b \nu_{ab}} - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (6.61)$$

As equações (6.57) e (6.60) foram verificadas em simulações com diferentes combinações de parâmetros. Como predito pela análise, as constantes de decaimento  $\alpha_u$  e  $\alpha_T$  não dependem das frequências de colisão entre partículas da mesma espécie, da velocidade hidrodinâmica ou da temperatura da mistura. Exemplos da relaxação de *temperaturas* e velocidades são apresentados nas Figs. (6.1) e (6.2). Nestas simulações foram usados os modelos com redes de terceira ordem *D2V17b* e *D3V39*.

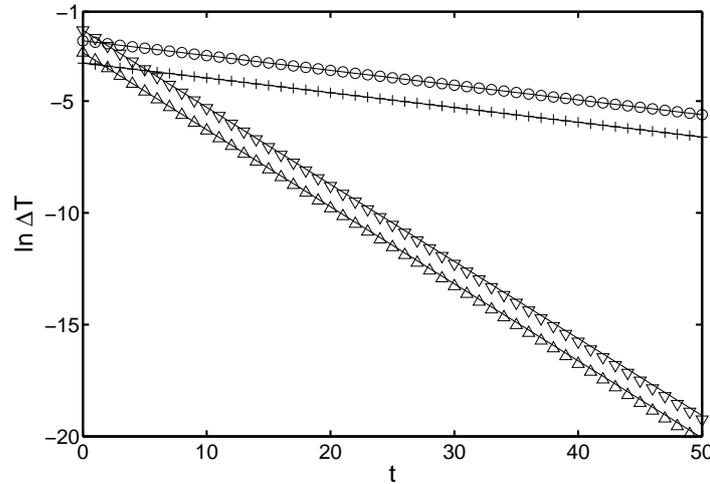


Figura 6.1: Relaxação homogênea de temperatura.  $\nu_{aa} = 0.7$ ,  $\nu_{bb} = 0.75$ ,  $\nu_{ab} = 1.0$ ,  $n_a = 0.6$ ,  $n_b = 0.1$ ,  $\theta_a = -0.3$ ,  $\theta_b = 0.1$ ,  $\mu_a/\mu_b = 0.7/0.3$ . Rede *D2V17b* ( $\Delta$ ), Rede *D3V39* ( $\nabla$ ).  $\nu_{aa} = 0.5$ ,  $\nu_{bb} = 0.8$ ,  $\nu_{ab} = 0.20$ ,  $n_a = 0.8$ ,  $n_b = 0.2$ ,  $\theta_a = -0.5$ ,  $\theta_b = 0.5$ ,  $\mu_a/\mu_b = 0.8/0.2$ . Rede *D2V17b* (+), Rede *D3V39* ( $\circ$ ). As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.60).

Todos os modelos testados, de segunda a quinta ordem, em duas e três dimensões, apresentaram boa concordância com as Eqs. (6.57) e (6.60), com discrepâncias que aumentam conforme as constantes de decaimento aumentam.

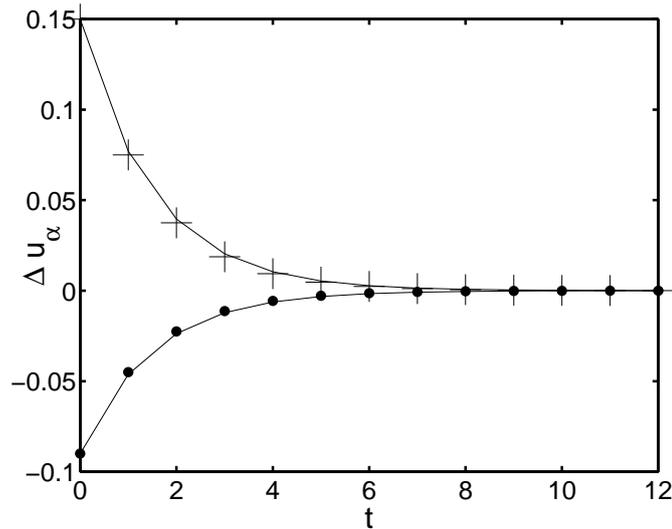


Figura 6.2: Relaxação homogênea de velocidade.  $\nu_{aa} = 0.7$ ,  $\nu_{bb} = 0.75$ ,  $\nu_{ab} = 1.0$ ,  $n_a = 0.5$ ,  $n_b = 0.5$ ,  $\theta_a = -0.1$ ,  $\theta_b = -0.1$ ,  $\mu_a/\mu_b = 0.7/0.3$ ,  $u_{ax0} = 0.1$ ,  $u_{ay0} = 0.01$ ,  $u_{bx0} = -0.05$ ,  $u_{by0} = 0.1$ , Rede  $D2V17b$ .  $\Delta u_x$  (+),  $\Delta u_y$  (●). As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.57).

## 6.2.2 Indiferenciabilidade de espécies idênticas

Como já foi apontado no capítulo 3, os modelos com operador de colisão BGK não obedecem ao princípio de indiferenciabilidade, portanto, uma mistura de componentes mecanicamente idênticos não se comporta como um gás simples em todas as circunstâncias.

Para avaliar os efeitos desta inconsistência, foram realizadas simulações na situação limite em que as duas porções de gás com moléculas idênticas se encontram em repouso, à mesma temperatura e densidade e inicialmente separadas. Em  $t > 0$  é permitido às duas espécies misturar-se, provocando gradientes espúrios na densidade, velocidade e temperatura da mistura.

Nas simulações em que um degrau unitário de concentração foi empregado como condição inicial, instabilidades numéricas apareceram durante os primeiros passos, com quase todas as combinações de parâmetros testadas e em redes de todas as ordens. Esta instabilidade inicial pôde ser corrigida acrescentando partículas da espécie  $a$  nas regiões de maior concentração de  $b$  e vice-versa. Por esta razão as simulações apresentadas foram realizadas utilizando um pequeno traço de contaminante, com concentração da ordem de  $5 \times 10^{-4}$ , nas regiões quase puras.

As Figuras (6.3) a (6.5) mostram a evolução, a cada 10 passos de tempo, da velocidade hidrodinâmica da mistura, da densidade total e da energia interna da mistura, em simulações usando o modelo de quinta ordem  $D2V53a$ .

Os picos de densidade total, velocidade e energia interna da mistura têm amplitude máxima nos primeiros estágios do processo e diminuem conforme a perturbação se pro-

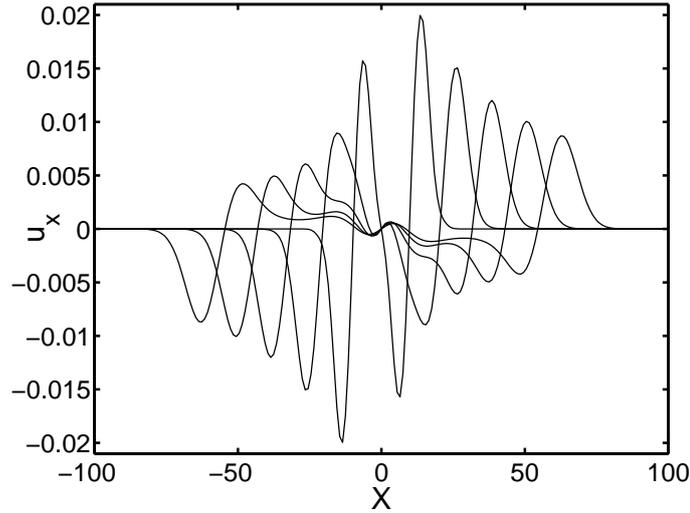


Figura 6.3: Velocidade da mistura vs.  $t$ .  $m_a = m_b = 0.5$ ,  $n_a = n_b = 0.5$ ,  $\nu_a = \nu_b = \nu_{ab} = 1.0$ ,  $\theta = 0.0$ , rede  $D2V53a$ .

paga, com velocidade próxima à velocidade do som, na direção das regiões de componentes quase puros.

A velocidade e, portanto, o número de Mach máximo da mistura, atingida no começo da simulação, é da ordem de 0.02. A amplitude das perturbações de densidade e energia interna é da ordem de 5% dos valores iniciais quando a concentração do contaminante é a mínima necessária para manter a estabilidade numérica. Estas perturbações são proporcionais à diferença inicial de concentrações, decaem rapidamente, e por isto espera-se que não tenham um efeito considerável sobre o processo difusivo após os instantes iniciais.

Assumindo temperatura e pressão homogêneas e constantes, a equação da difusão de massa do componente  $a$  pode ser escrita como<sup>1</sup>

$$\partial_t \omega_a - \mathcal{D} \partial_x \partial_x \omega_a = 0, \quad (6.62)$$

onde  $\omega_a = \rho_a / \rho$  e  $\mathcal{D}$  é o coeficiente de difusão calculado segundo as Eqs. (6.31) e (6.32), com as propriedades iniciais da mistura. A Figura (6.6) mostra uma comparação entre a simulação de um degrau de concentração, com os mesmos parâmetros utilizados nas Figs. (6.3) a (6.5), e a solução analítica da equação de difusão de massa, para esta configuração,

$$\omega_a = \frac{1}{2} \Delta \omega_a \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{\mathcal{D}t}} \right) + \omega_{a0}, \quad (6.63)$$

onde  $\omega_{a0}$  é a concentração inicial do componente  $a$  no intervalo  $x > 0$ .

<sup>1</sup>No restante do capítulo os coeficientes de transporte referidos correspondem aos valores aparentes, obtidos na seção (6.1.2), e será omitida a distinção na notação.

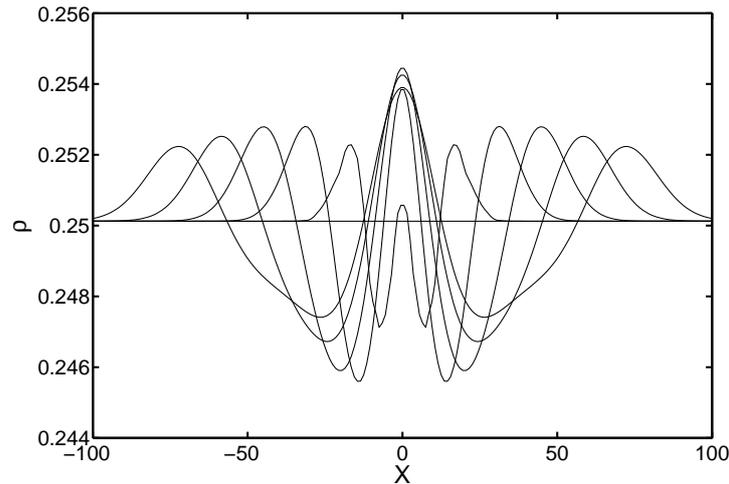


Figura 6.4: Densidade da mistura vs.  $t$ .  $m_a = m_b = 0.5$ ,  $n_a = n_b = 0.5$ ,  $\nu_a = \nu_b = \nu_{ab} = 1.0$ ,  $\theta = 0.0$ , rede  $D2V53a$ .

Mesmo nas condições limite de estabilidade numérica, com as maiores perturbações na velocidade e na temperatura da mistura, os resultados da simulação apresentam erros consideráveis apenas nos primeiros 100 passos de tempo, após os quais há uma boa concordância com a solução analítica. A diferença se deve, em parte, a que o coeficiente de difusão nas regiões próxima de  $x = 0$  é menor do que o calculado com as propriedades iniciais da mistura, já que depende diretamente da energia interna que, como mostra a Fig. (6.5), decai nos primeiros estágios. Esta tendência é a mesma independentemente do valor da temperatura inicial. Também se verificou que as simulações com menores diferenças iniciais de concentração apresentam menores discrepâncias com a solução analítica.

### 6.2.3 Difusão de massa

O problema de difusão de massa num degrau de concentração é um tipo de configuração cuja simulação não corresponde exatamente à solução da equação de difusão com coeficiente constante e também muito propensa a instabilidades numéricas, como foi apontado na seção anterior. Por isto, na determinação do coeficiente de difusão binário foi empregada uma outra configuração, com gradientes de concentração contínuos, na qual os efeitos das características do modelo BGK com relação à indiferenciabilidade de gases idênticos têm ordem de grandeza desprezível.

A continuidade no gradiente de concentração diminui consideravelmente a instabilidade numérica do método, sendo factível obter soluções em faixas de temperatura mais amplas.

No caso de um sistema composto por dois gases com a mesma massa molecular e com uma distribuição sinusoidal de concentração na direção  $x$  de um meio infinito, com

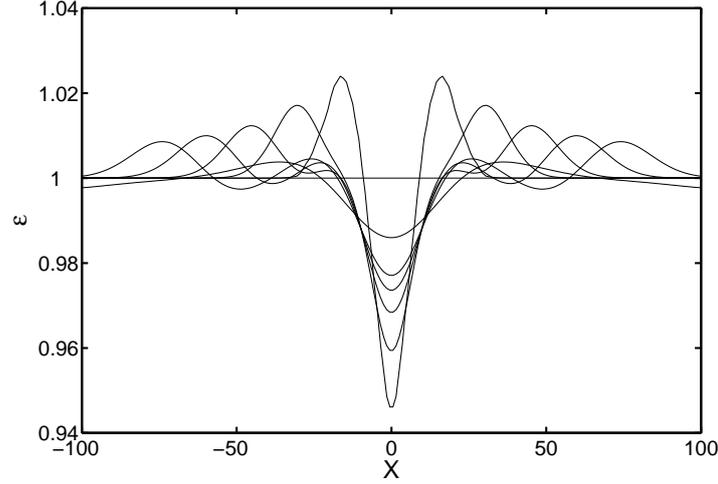


Figura 6.5: Energia interna da mistura vs.  $t$ .  $m_a = m_b = 0.5$ ,  $n_a = n_b = 0.5$ ,  $\nu_a = \nu_b = \nu_{ab} = 1.0$ ,  $\theta = 0.0$ , rede  $D2V53a$ .

temperatura e pressão uniformes e com velocidade inicial uniforme  $u_{x0}$ , a equação de difusão da massa, Eq. (6.30), pode ser escrita como

$$\partial_t \omega_a + u_x \partial_x \omega_a - \mathcal{D} \partial_x^2 \omega_a = 0. \quad (6.64)$$

A solução da equação anterior é

$$\omega_a = \frac{1}{2} \omega_{a0} \left( e^{-k^2 \mathcal{D} t} \sin(Kx - Ku_{x0} t) + 1 \right), \quad (6.65)$$

onde  $K$  é número de onda e  $\omega_{a0}$  é a concentração máxima da espécie  $a$ .

Uma simulação com as condições acima descritas, num meio com condições periódicas em todas as direções, é apresentada na Fig. (6.7). Neste caso foi empregada a máxima amplitude de concentração como condição inicial e uma velocidade inicial elevada,  $u_{x0} = 0.1$ . A figura mostra o decaimento do perfil, a cada 180 passos de tempo, desde o instante inicial até o momento em que a onda percorreu a metade do domínio.

Neste problema o coeficiente de difusão pode ser medido, como uma relação de integrais, empregando o perfil de concentração num instante arbitrário. Se a função  $A(t)$  representa a área limitada pelo perfil de concentração no instante  $t$ , normalizada pelo valor máximo da concentração,

$$A(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \omega_a(x, t) - \frac{1}{2} \omega_{a0} \right| \frac{1}{\omega_{a0}} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} e^{-K^2 \mathcal{D} t} |\sin(Kx - Ku_{x0} t)| dx, \quad (6.66)$$

pela mudança de variáveis  $y = x - u_{x0} t$  obtém-se a integral

$$A(t) = \frac{1}{2} e^{-K^2 \mathcal{D} t} \int_{-\infty}^{\infty} |\sin(Ky)| dy = e^{-K^2 \mathcal{D} t} A(0), \quad (6.67)$$

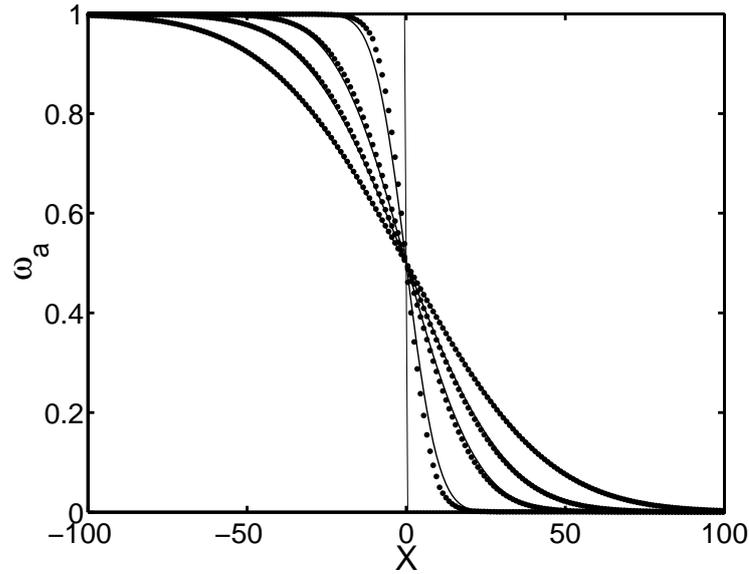


Figura 6.6: Difusão de massa em gases mecanicamente idênticos.  $t = [0, 10, 50, 100, 200]$ , rede  $D2V53a$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.63).

a qual é usada para escrever o coeficiente de difusão de maneira explícita como

$$\mathcal{D} = \frac{1}{K^2 t} \ln \frac{A(0)}{A(t)}. \quad (6.68)$$

Os valores de  $A(t)$  foram obtidos pela integração da solução numérica em todo o domínio através da regra do trapézio. As comparações entre o resultado da análise de Chapman-Enskog, Eq. (6.32), e as simulações mostram boa concordância, com erros máximos inferiores a 0.5%, mesmo nas simulações com concentração máxima unitária e velocidade inicial com componentes da ordem de 0.1.

A dependência entre coeficiente de difusão e a temperatura inicial foi verificada usando modelos de segunda até quinta ordem, em duas dimensões, e modelos de segunda e terceira ordem, em três dimensões, para diferentes combinações de parâmetros iniciais. Como exemplo desta comparação, os resultados para um sistema com os parâmetros da simulação da Fig. (6.7), com os coeficientes medidos pelos perfis de concentração nos instantes inicial e final da referida simulação, são apresentados na Fig. (6.8).

Em todas as simulações realizadas os erros não excederam 0.5%, mesmo com as redes de segunda ordem  $D2Q9$  e  $D3V19$ . As simulações com a rede de terceira ordem  $D2V17a$  divergem para valores do desvio de temperatura inferiores a  $-0.2$  na maioria dos casos, sendo mais sensíveis a este parâmetro conforme o valor do coeficiente de difusão binário decresce.

Simulações similares foram efetuadas para estabelecer a dependência do coeficiente de difusão com os restantes parâmetros. Através destas simulações verificou-se que o

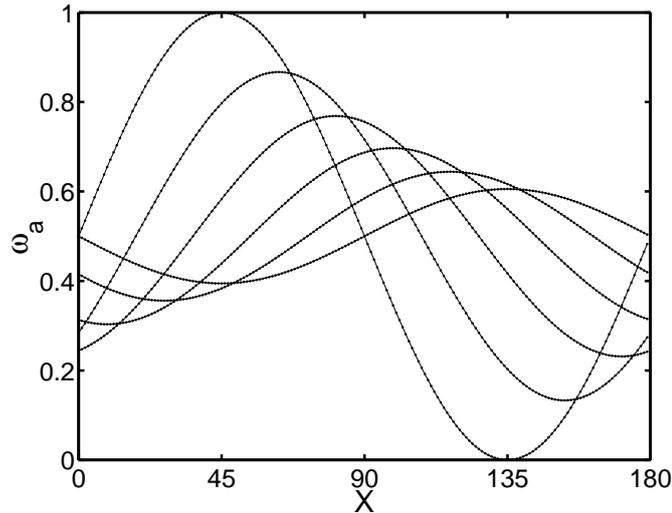


Figura 6.7: Decaimento de um perfil sinusoidal de concentração.  $t = [180, 360, 540, 720, 900]$ ,  $\nu_{aa} = 1.0$ ,  $\nu_{bb} = 0.7$ ,  $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 1.9$ ,  $\theta_{aa} = \theta_{ab} = 0.0$ ,  $n_a = n_b = 0.25$ ,  $\omega_{a0} = 1.0$ ,  $u_x = 0.1$ , Rede *D2V53a*. As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.65).

coeficiente de difusão binário é independente do valor das frequências de colisão  $\nu_{aa}$  e  $\nu_{bb}$ .

As combinações de densidades de número de partículas e frequências de colisão devem ser escolhidas de maneira a garantir a positividade das viscosidades e das condutividades térmicas por espécie e da mistura, de outra forma instabilidades numéricas aparecem, particularmente quando os desvios de temperatura são elevados.

## 6.2.4 Difusão de quantidade de movimento

A simulação de um caso similar ao empregado na determinação da viscosidade dinâmica de gases simples foi utilizada para averiguar a dependência da viscosidade dinâmica da mistura com as frequências de colisão, as densidades dos componentes e a temperatura da mistura. Diferentemente das simulações para o cálculo do coeficiente de difusão binário onde a relação de massas moleculares fica restrita à unidade, de forma a manter a pressão e a densidade total uniformes em todo o domínio, na simulação da difusão de quantidade de movimento numa mistura de concentração homogênea é possível utilizar gases de massas moleculares diferentes, mantendo quase constante o coeficiente de difusão na Eq. (5.55).

Um exemplo deste tipo de simulação, cuja evolução esta governada pela equação de advecção-difusão, na forma da Eq. (6.64), com o modelo tridimensional de terceira ordem *D3V39*, é apresentado na Fig. (6.9). Neste caso foi possível atingir uma relação de massas  $\mu_a/\mu_b = 5$  com todas as redes disponíveis, de terceira a quinta ordem, em duas e três dimensões, com exceção da rede *D2V17a*.

Experimentos similares foram realizados com diferentes combinações de parâmetros com excelente concordância com a solução analítica em todos os casos, incluindo os mo-

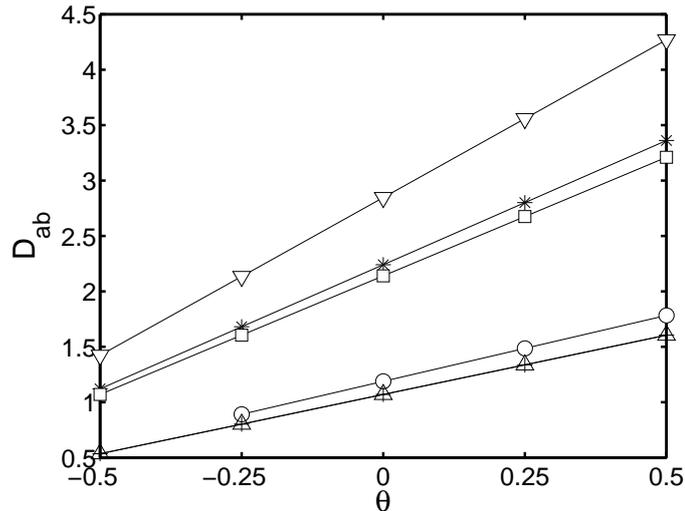


Figura 6.8: Coeficiente de difusão binário vs.  $\theta$ .  $\nu_{aa} = 1.0$ ,  $\nu_{bb} = 0.7$ ,  $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 1.9$ ,  $n_a = n_b = 0.25$ ,  $\omega_{a0} = 1.0$ ,  $u_x = 0.1$ . Rede  $D2Q9$  (+), Rede  $D2V17a$  (O), Rede  $D2V37$  (\*), Rede  $D2V53a$  ( $\nabla$ ), Rede  $D3Q19$  ( $\Delta$ ) e Rede  $D3V39$  ( $\square$ ). As linhas contínuas correspondem à solução analítica, Eq. (6.32).

delos de terceira ordem em simulações com velocidade até 0.1. Verificou-se também que a viscosidade nos modelos de segunda ordem é independente da temperatura e corresponde à calculada com a temperatura  $T_0$  em sistemas com massas moleculares iguais. Nos outros casos a diferença entre a viscosidade medida e a expressão Eq. (6.42), calculada usando  $T_0$ , se incrementa com a diferença de temperaturas  $T - T_0$  e a relação de massas moleculares.

### 6.2.5 Transferência de calor

O problema do degrau de temperatura foi simulado para verificar a expressão da condutividade térmica da mistura. A evolução da temperatura do sistema é regida pela Eq. (5.61), sempre que as distribuições de concentração e pressão sejam uniformes. O problema permite estudar a dependência da condutividade térmica com a relação de massas já que, na ausência de gradientes de pressão e concentração, a velocidade da mistura e os fluxos mássicos difusivos são nulos. A Figura (6.10) mostra um exemplo deste tipo de simulação com um modelo de quarta ordem em duas dimensões.

O coeficiente de difusão pode ser considerado constante em todo o domínio quando a diferença inicial de temperatura é uma pequena porcentagem do valor médio, assim, os erros na comparação entre a solução analítica, com o calor específico da mistura dado por  $\bar{c}_p = \sum_k \omega_k c_{pk}$ , e os resultados das simulações com modelos de quarta e quinta ordem são inferiores a 0.5%. As simulações foram repetidas usando modelos de quarta e quinta ordem, com resultados satisfatórios, para varias combinações de parâmetros, com erros da mesma ordem de grandeza em todos os casos.

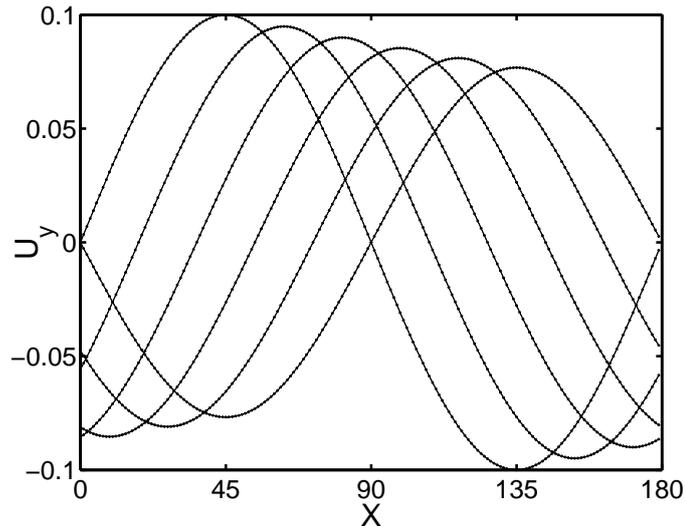


Figura 6.9: Decaimento de um perfil sinusoidal de velocidade.  $t = [0, 180, 360, 540, 720, 900]$ ,  $\nu_{aa} = 1.1$ ,  $\nu_{bb} = 0.7$ ,  $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 1.0$ ,  $\mu_a/\mu_b = 5$ ,  $n_a = 0.5$ ,  $n_b = 0.5$ ,  $\theta_a = -2/3$ ,  $\theta_b = 2/3$ ,  $u_{y0} = u_{x0} = 0.1$ , Rede D3V39. As linhas contínuas correspondem à solução analítica.

Problemas similares, com composição inicial e pressão uniformes, mas com *temperaturas* dos componentes ligeiramente diferentes, foram resolvidos com resultados igualmente satisfatórios. Uma simulação deste tipo, cuja evolução está governada pela equação de advecção-difusão, é apresentada na Fig. (6.11). Nesta simulação em particular, a temperatura de gases com massas moleculares diferentes foi imposta inicialmente usando o mesmo valor para o desvio de energia interna  $\theta_{k0} = 0$ . De acordo com a Eq. (6.3) esta escolha estabelece que as componentes possuam *temperaturas* diferentes cuja relação é igual ao inverso da relação de massas. A figura mostra a evolução do sistema, com velocidade  $u_{x0} = 0.05$ , a cada 900 passos de tempo.

A condutividade térmica nas simulações com modelos de terceira ordem coincide com a Eq. (6.50) apenas em sistemas de massas moleculares simétricas com desvio de energia interna nulo. Nos outros casos o erro aumenta com o aumento da relação de massas moleculares e com o desvio de energia interna inicial.

## 6.2.6 Discussão

As simulações realizadas permitem concluir que o modelo de Boltzmann para misturas, implementado através da equação de Boltzmann para gases em rede, possibilita simular corretamente processos de difusão de massa, quantidade de movimento e energia, de acordo com as equações macroscópicas obtidas pela análise de Chapman-Enskog no contínuo, com a adição de termos espúrios cuja forma explícita é conhecida e que, portanto, podem ser incluídos nos coeficientes de transporte. Estas características particulares

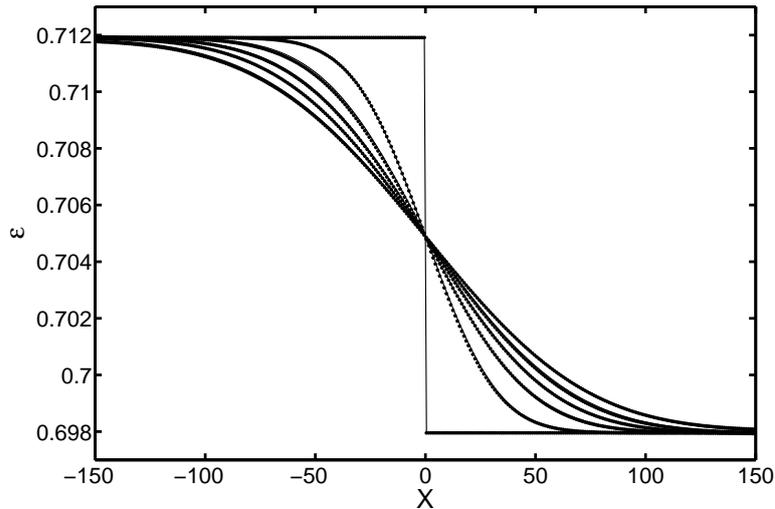


Figura 6.10: Decaimento de um degrau de temperatura.  $t = [0 - 1000]$ ,  $\nu_{aa} = 0.7$ ,  $\nu_{bb} = 0.5$ ,  $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 0.9$ ,  $\mu_a/\mu_b = 1.5$ ,  $n_a = 0.2$ ,  $n_b = 0.3$ ,  $\theta_a = -0.2$ ,  $\theta_b = 0.2$ ,  $\Delta\theta = 0.02$ , Rede *D2V37*. As linhas contínuas correspondem à solução analítica.

transformam a Eq. (6.1) num esquema de solução de segunda ordem para a termohidrodinâmica de misturas.

A análise de Chapman-Enskog mostrou que o modelo representa corretamente o transporte de massa, com difusão promovida pelo gradiente de concentração molar, e pelo gradiente de pressão em gases com massas moleculares diferentes. Igualmente, o tensor pressão e o vetor fluxo não-convectivo de energia possuem as mesmas formas dos obtidos pela análise multiescala com o operador integral de colisão completo [Chapman e Cowling, 1970]. Por ser um modelo para moléculas de Maxwell, os termos que correspondem à difusão térmica não aparecem nas equações de balanço de massa das espécies e não há fluxo não-convectivo de energia associado à força difusiva. O modelo BGK implementado permite ajustar o coeficiente de difusão binário independentemente das viscosidades e das condutividades térmicas dos componentes, possibilitando assim escolher o número de Reynolds independentemente do número de Schmidt ou do número de Lewis, dependendo de sua importância no tipo de problema.

Por sua relativa simplicidade no tratamento das interações entre partículas, o modelo pode ser tomado como base para o desenvolvimento de modelos para fluidos imiscíveis [Santos et al., 2003] ou para escoamentos com reações químicas [Succi, 2001].

Verificou-se que os efeitos espúrios devidos à não-indiferenciabilidade de gases com propriedades mecânicas idênticas tem um efeito mínimo na solução da equação de difusão e que tal influência se reduz consideravelmente nas situações em que os gradientes das propriedades macroscópicas são contínuos.

A estabilidade do método numérico depende da ordem do modelo e da rede utilizada

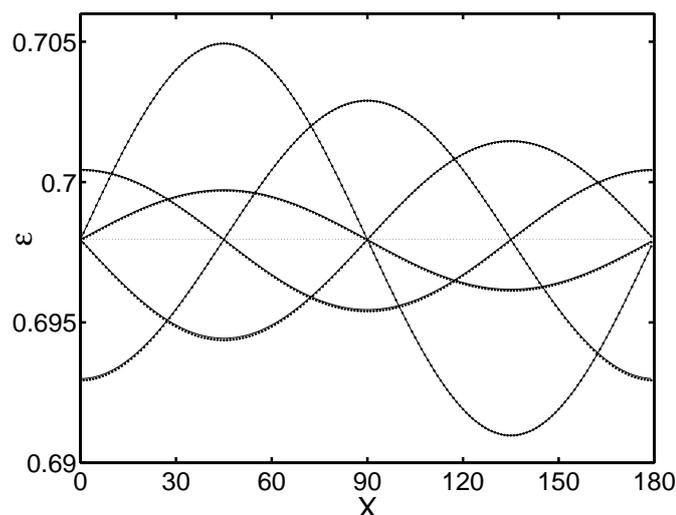


Figura 6.11: Decaimento de um perfil sinusoidal de temperatura.  $t = [0 - 3600]$ ,  $\nu_{aa} = 1.0$ ,  $\nu_{bb} = 0.7$ ,  $\nu_{ab} = \nu_{ba} = 1.5$ ,  $\mu_a/\mu_b = 0.7/0.3$ ,  $n_a = 0.4$ ,  $n_b = 0.6$ ,  $\theta_a = \theta_b = 0.0$ ,  $u_{x0} = 0.05$ , Rede  $D2V37$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica.

e está limitada pelos valores dos coeficientes de transporte, os desvios de temperatura, os gradientes das propriedades macroscópicas e a relação de massas moleculares. Observou-se que em simulações como as apresentadas, onde os gradientes das propriedades macroscópicas são contínuos, a estabilidade está condicionada fortemente pela amplitude dos desvios de energia interna. A amplitude da faixa de valores de  $\theta_k$  que preservam a estabilidade do método decresce com os coeficientes de transporte e, com exceção da rede de terceira ordem  $D2V17a$ , esta é difícil de manter em problemas com desvios de energia interna fora do intervalo  $\theta_k \in [-0.5 \quad 0.5]$ .

A influência dos erros nas equações de balanço introduzidos pelas aproximações de baixa ordem foi verificada experimentalmente obtendo as seguintes conclusões. A evolução de distribuição da densidade num sistema formado por gases com massas moleculares iguais, na forma da Eq. (6.30), é representada sem erros apreciáveis pelos modelos de segunda ordem e superiores. Na solução dos problemas de advecção-difusão estudados, não se observou relação entre o desvio inicial de temperatura, a magnitude da velocidade da mistura e o erro em relação à solução analítica. Isto se deve a que, nos modelos de segunda ordem, os termos acrescentados à equação de difusão da massa, da ordem do número de Mach ao cubo, são proporcionais ao fator  $(T_{ak} - T)/T$ , que só é apreciável quando os gases possuem *temperaturas* ou velocidades hidrodinâmicas muito diferentes.

A equação de balanço da quantidade de movimento é representada adequadamente por modelos de terceira ordem e superiores, sendo que os modelos de segunda ordem apresentam discrepâncias com relação a Eq. (6.40) e à expressão para a viscosidade dinâmica Eq. (6.42), que dependem do desvio de temperatura e da relação de massas moleculares. Em

sistemas de massas moleculares simétricas, a viscosidade dos modelos de segunda ordem corresponde a aquela calculada com a temperatura de referência  $T_0$ , como no caso dos gases ideais simples. Em sistemas de massas moleculares assimétricas, a comparação entre as soluções analítica da equação de difusão e os resultados das simulações apresenta erros que aumentam conforme a diferença entre a temperatura da mistura e a temperatura de referência,  $T - T_0$ , aumenta. Os erros introduzidos pelos modelos de terceira ordem não aparecem nas simulações realizadas devido a que são proporcionais ao fator  $(T_{ak} - T)/T$  e, possivelmente, de alta ordem no número de Mach.

Os modelos de quarta ordem e superiores satisfazem a equação de balanço da energia na forma da Eq. (6.48), como foi verificado pela simulação de degraus de temperatura em sistemas com massas moleculares diferentes. A condutividade térmica nas simulações com redes de terceira ordem,  $D2V17a/b$  e  $D3V39$ , coincide com a Eq. (6.50) apenas em sistemas de massas moleculares simétricas com desvio nulo de energia interna.

Embora na dedução da expressão para a condutividade térmica da mistura tenha sido avaliado o momento de quinta ordem, o modelo de quarta ordem com rede  $D2V37$  apresenta apenas pequenos erros, da mesma ordem de grandeza dos apresentados pelo modelo de quinta ordem, na comparação entre as simulações e a Eq. (6.48). Estes erros são pouco sensíveis à diferença de *temperaturas* dos componentes ou à velocidade inicial da mistura, indicando que são proporcionais a potências elevadas do número de Mach. Aparentemente, sempre que a diferença de *temperaturas* dos componentes seja pequena, às aproximações de baixa ordem aplicam-se os mesmos critérios que aos modelos para gases simples. Isto é, a equação de conservação da massa é representada pelos modelos de segunda ordem, a equação de balanço da quantidade de movimento pelos modelos de terceira ordem e a equação de balanço da energia pelos de quarta ordem e superiores.

## Capítulo 7

# Solução da EBVD por diferenças finitas de alta ordem

Nos capítulos anteriores foi apresentado um esquema de discretização espacial e temporal da equação de Boltzmann com velocidades discretas, para gases simples e misturas binárias, conhecido como LBE. Embora simples de implementar, econômico em termos computacionais e com resolução espacial e temporal de segunda ordem na solução da hidrodinâmica, o método possui algumas características que limitam a sua aplicação quando se requer simular escoamentos com baixas viscosidades e com gradientes pronunciados das propriedades macroscópicas. Além disso, o número de vetores necessários para representar exatamente as equações de Navier-Stokes-Fourier é elevado, por utilizar apenas redes formadas por polígonos cujos vértices correspondem a uma malha cartesiana regular. A primeira destas limitações pode ser contornada utilizando outros esquemas de discretização espacial e temporal, que permitam modificar o número de Courant de maneira a garantir a estabilidade numérica e a convergência e aumentar a resolução espacial e temporal da solução [Cao et al., 1997, Sofonea e Sekerka, 2003]. A segunda limitação pode ser parcialmente amenizada utilizando as soluções ao problema de quadratura, Eq. (4.19), que não satisfazem as condições particulares necessárias na LBE.

Neste capítulo são apresentados e discutidos brevemente alguns exemplos de solução da Eq. (4.20) que empregam conjuntamente as duas técnicas mencionadas. Utilizando uma discretização na qual o espaço e a velocidade não estejam acoplados é possível: diminuir o número de Courant de acordo com as exigências do problema, resolver numericamente a equação de Boltzmann com velocidades discretas com ordens de truncamento superiores e, o que é muito importante para reduzir o custo computacional, utilizar soluções ao problema de quadratura com um número reduzido de elementos para a mesma ordem de aproximação.

Apenas esquemas que preservem as características explícitas do LBE são apresentados. Isto devido a que com algoritmos deste tipo a solução das equações de evolução para  $f_i$  depende apenas dos valores desta função nos locais mais próximos e portanto sua

implementação em paralelo é relativamente simples. Igualmente, por simplicidade, só são discutidas as discretizações em malhas cartesianas uniformes, esclarecendo que esta não é uma limitação do método, que pode ser utilizado igualmente em outros sistemas de coordenadas e com espaçamentos não-uniformes, com o mesmo conjunto de abscissas no espaço de velocidades moleculares.

## 7.1 Discretização espacial e temporal

Os esquemas de discretização empregados no método de Boltzmann para gases em rede são o de Euler de primeira ordem

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t)}{\Delta t}, \quad (7.1)$$

e as diferenças espaciais a montante de primeira ordem

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} = \frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x} - \Delta x_\alpha, t)}{\Delta x_\alpha}, \quad (7.2)$$

cujos erros de truncamento podem ser incorporados na análise multiescala e absorvidos pelos coeficientes de transporte. Esta possibilidade foi explorada por Sofonea e Sekerka [2003] usando o modelo de segunda ordem  $D2Q9$ . Na formulação destes autores, a discretização espacial é feita sobre as direções dos vetores de velocidade, o que permite escrever expressões similares à Eq. (5.4) e, após a análise de Chapman-Enskog, determinar a viscosidade como função do passo de tempo e da separação entre sítios. Nas redes não-regulares as projeções das velocidades moleculares não passam pelos sítios vizinhos mais próximos, razão pela qual não é possível adotar esta estratégia e, por isto, o produto da velocidade molecular com o gradiente da função distribuição será avaliado explicitamente num sistema de coordenadas cartesianas. A forma dos erros de truncamento na análise multiescala não permite a obtenção de uma expressão simples para os coeficientes de transporte e, portanto, para manter a ordem de precisão do LBM será necessário empregar esquemas de discretização espaciais e temporais de segunda ordem.

O esquema de segunda ordem por diferenças centrais no tempo

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t - \Delta t)}{2\Delta t}, \quad (7.3)$$

não acrescenta termos espúrios à análise multiescala em segunda ordem de Knudsen, mas, pelo fato da função  $f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t)$  estar parcialmente desacoplada de  $f_i(\mathbf{x}, t)$ , dependendo do esquema de discretização espacial, podem desenvolver-se duas soluções independentes, o que resulta em oscilações temporais das grandezas macroscópicas.

No esquema de Runge-Kutta de segunda ordem a função  $f_i$  é calculada como

$$f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \Delta t R_i\left(\mathbf{x}, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (7.4)$$

usando a estimativa do valor de  $f_i$  no meio do intervalo  $\Delta t$

$$f_i\left(\mathbf{x}, t + \frac{\Delta t}{2}\right) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{2} R_i(\mathbf{x}, t), \quad (7.5)$$

e a função  $R_i$ , que corresponde à discretização dos termos restantes na equação de Boltzmann com velocidades discretas

$$R_i(\mathbf{x}, t) = c_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha}\bigg|_{\mathbf{x}, t} - J_i(\mathbf{x}, t). \quad (7.6)$$

Como na LBE, o operador de colisão será avaliado localmente. Para a discretização das derivadas espaciais podem ser utilizados os esquemas de diferenças a montante de segunda ordem, dado por

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} = \frac{3f_i(\mathbf{x}, t) - 4f_i(\mathbf{x} - \Delta x_\alpha, t) + f_i(\mathbf{x} - 2\Delta x_\alpha, t)}{\Delta x_\alpha}, \quad (7.7)$$

quando  $c_{i\alpha} \geq 0$  e

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} = \frac{-3f_i(\mathbf{x}, t) + 4f_i(\mathbf{x} + \Delta x_\alpha, t) - f_i(\mathbf{x} + 2\Delta x_\alpha, t)}{\Delta x_\alpha}, \quad (7.8)$$

quando  $c_{i\alpha} < 0$ , e o de diferenças centrais, dado por,

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} = \frac{f_i(\mathbf{x} + \Delta x_\alpha, t) - f_i(\mathbf{x} - \Delta x_\alpha, t)}{2\Delta x_\alpha}. \quad (7.9)$$

Estes dois esquemas possuem características dispersivas, isto é, acrescentam oscilações artificiais à solução em regiões com gradientes pronunciados [Tannehill et al., 1997]. Em condições como estas, como no caso da simulação do tubo de choque, a derivada espacial será discretizada usando o esquema de diferenças a montante de terceira ordem, dado por

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} = \frac{2f_i(\mathbf{x} + \Delta x_\alpha) + 3f_i(\mathbf{x}) - 6f_i(\mathbf{x} - \Delta x_\alpha) + f_i(\mathbf{x} - 2\Delta x_\alpha)}{6\Delta x_\alpha}, \quad (7.10)$$

quando  $c_{i\alpha} \geq 0$  e

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} = \frac{-2f_i(\mathbf{x} - \Delta x_\alpha) - 3f_i(\mathbf{x}) + 6f_i(\mathbf{x} + \Delta x_\alpha) - f_i(\mathbf{x} + 2\Delta x_\alpha)}{6\Delta x_\alpha}, \quad (7.11)$$

quando  $c_{i\alpha} < 0$ .

## 7.2 Resultados numéricos e discussão

As simulações de teste realizadas nos capítulos 5 e 6 foram repetidas para verificar a implementação e estabelecer as vantagens do método de solução por diferenças finitas de alta ordem. A ampliação dos limites de estabilidade foi testada pela simulação do tubo de choque, com diferenças iniciais de pressão e temperatura elevadas. Por exemplo, a Fig. (7.1) mostra a comparação entre uma simulação com o modelo tridimensional de quarta ordem *D3V53* e a solução analítica das equações de Euler [Anderson Jr., 2003].

Da mesma forma que no capítulo 5, utilizou-se uma frequência de colisão constante em todo o domínio. As discrepâncias nos valores da densidade, a temperatura e a velocidade, particularmente nas proximidades da superfície de contato, se devem ao valor finito dos coeficientes de transporte: viscosidade, coeficiente de autodifusão e condutividade térmica. Imediatamente após a ruptura da membrana que separa as massas de gás a diferentes pressões, se estabelece uma diferença de temperatura entre as regiões 2 e 3 e, como consequência do valor não-nulo da condutividade térmica, a transferência de calor através da superfície de contato<sup>1</sup>. Sendo a pressão igual nos dois lados desta interface, a densidade na região 3 diminui, promovendo o fluxo mássico no sentido positivo do eixo  $x$ , como se observa no gráfico de velocidade  $u_x$ . Esta hipótese se verifica facilmente pela comparação do perfil de temperatura, nas proximidades da superfície de contato, com a solução ao problema do degrau de temperatura, apresentado na seção 5.3.3. Com a condutividade térmica calculada usando a temperatura média das duas regiões, os erros na comparação dos perfis foram inferiores a 1%.

Por outro lado, as oscilações na frente da onda de choque são devidas aos efeitos parcialmente dispersivos do esquema de diferenciação espacial. Mesmo com pequenas relações de pressão, o esquema de diferenças centrais mostrou-se instável. O esquema de diferenças a montante permitiu simular problemas com relações de pressão ligeiramente maiores, diminuindo o número de Courant, calculado com o maior módulo dos vetores da rede correspondente. Embora as simulações permaneçam estáveis, as oscilações introduzidas pela discretização de segunda ordem, nas proximidades das descontinuidades, alteram consideravelmente a solução. O esquema de diferenças a montante de terceira ordem mostrou-se o mais apropriado nestas condições, permitindo atingir relações de pressão de 10 : 1.

Por ser uma rede com vetores de comprimento menor, a rede *D3V53*, empregada na simulação da Fig. (7.1), possui limites de estabilidade mais amplos do que a rede da mesma ordem com 52 velocidades, e comparáveis com os das redes bidimensionais de quarta ordem *D2V19/20*.

As características hidrodinâmicas foram avaliadas pela simulação de problemas de advecção-difusão. Os erros introduzidos na Eq. (4.20) pelas discretizações espaciais e temporais de segunda ordem e superiores não tem influência sobre a análise de Chapman-

---

<sup>1</sup>A nomenclatura para as regiões do tubo de choque é mesma empregada na seção 5.3.1

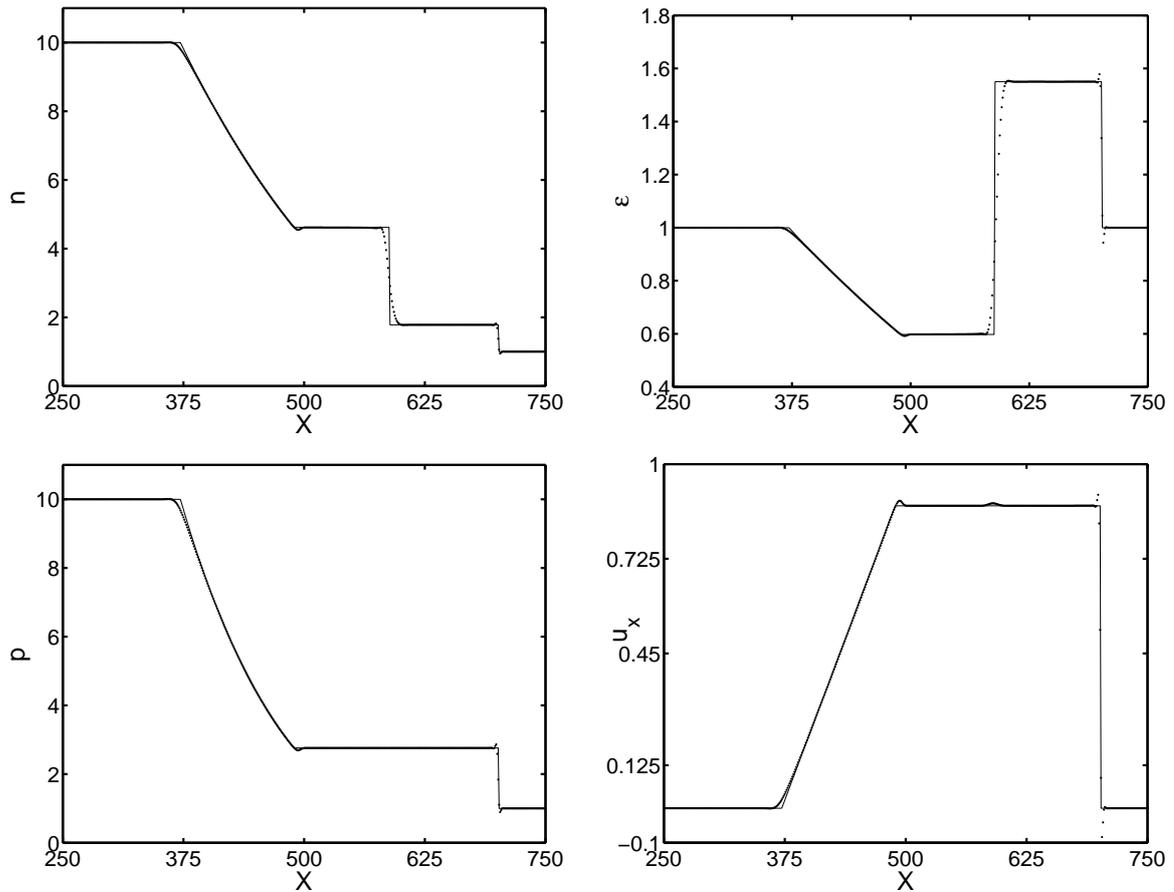


Figura 7.1: Resultados da simulação do tubo de choque, com relação inicial de densidades 10 : 1 após 1000 passos de tempo, temperatura inicial homogênea  $\theta = 0.0$ ,  $\tau = 0.00008$  e  $\Delta t = 0.0001$ , usando a rede de quarta ordem *D3V53a*. As linhas contínuas correspondem à solução analítica das equações de Euler.

Enskog em primeira e segunda ordem de Knudsen, razão pela qual os coeficientes de transporte para gases simples correspondem aproximadamente as expressões Eqs. (3.118) e (3.119). Da mesma forma, o coeficiente de difusão binário, a viscosidade da mistura e a condutividade térmica da mistura estão dadas pelas Eqs. (3.130), (3.131) e (3.132). A correspondência entre o modelo e estas expressões foi verificada nos casos de difusão de quantidade de movimento e energia. A Figura (7.2) mostra a comparação entre a simulação com os esquemas de diferenças centrais e Runge-Kutta de segunda ordem e a solução analítica do problema bidimensional, similar aos discutidos no capítulo 5, conhecido como vórtices de Taylor, cuja evolução é dada pelas expressões

$$u_x(\mathbf{x}, t) = -u_0 \exp(-\mathcal{D}(K_1^2 + K_2^2)t) \cos(K_1x) \sin(K_2y), \quad (7.12)$$

$$u_y(\mathbf{x}, t) = u_0 \exp(-\mathcal{D}(K_1^2 + K_2^2)t) \sin(K_1x) \cos(K_2y), \quad (7.13)$$

onde  $K_1$  e  $K_2$  são os números de onda e  $\mathcal{D}$  a viscosidade cinemática, calculada com os

valores iniciais das propriedades do fluido. Em todos os casos, os erros máximos, com diferenças centrais e a montante de segunda ordem e aproximações de terceira ordem e superiores à função distribuição Maxwelliana, foram inferiores a 1%. Nas simulações com modelos de segunda ordem, como a da figura citada anteriormente, a viscosidade é independente da temperatura e corresponde à calculada com a temperatura  $T_0$ .

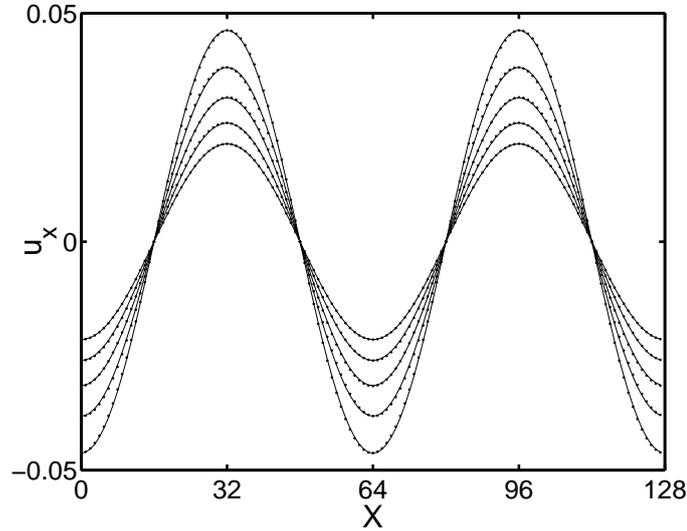


Figura 7.2: Evolução do perfil de velocidade horizontal num vórtice de Taylor.  $t = [50 - 450]$ ,  $y = 16$ ,  $\Delta t = 0.1$ ,  $\Delta x = 1.0$ ,  $\nu = 1.0$ ,  $\theta = 0.0$ ,  $n = 1.0$ ,  $u_0 = 0.05$ ,  $K_1 = 4\pi/L_x$ ,  $K_2 = 2\pi/L_y$ , Rede  $D2V7$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica.

A Figura (7.3) apresenta a comparação entre a solução analítica ao problema do degrau de temperatura, Eq. (5.61), e o resultado de uma simulação com o modelo de quarta ordem e a rede  $D2V20$ , usando diferenças a montante de segunda ordem. Neste tipo de simulações observaram-se oscilações durante os estágios iniciais, nas proximidades da descontinuidade de densidade e temperatura. Estas oscilações, embora de amplitude muito menor, também aparecem nas simulações com o LBM e se explicam em parte pelo caráter dispersivo dos esquemas de discretização espacial, como foi verificado pelo testes em idênticas condições e o esquema de diferenças a montante de terceira ordem. As comparações entre a solução analítica e as simulações com o modelo de terceira ordem com as redes  $D2V12$  e  $D3V27$  foram igualmente satisfatórias quando a condutividade térmica foi calculada usando a expressão Eq. (5.54) sem os termos proporcionais a  $\Delta t/2$ .

O modelo para misturas binárias com operador de colisão BGK foi verificado pela simulação do problema de relaxação homogênea, com diferentes combinações de parâmetros. As constantes de decaimento correspondem as expressões calculadas na seção 6.2.1, sem os termos proporcionais a  $\Delta t/2$ . Nos problemas de misturas de gases com moléculas idênticas e no mesmo estado termodinâmico, os três esquemas de ordem superior apresentaram oscilações de amplitude maior do que as observadas com o LBM, portanto, com os restantes parâmetros constantes, é necessário aumentar a fração de partículas da espécie

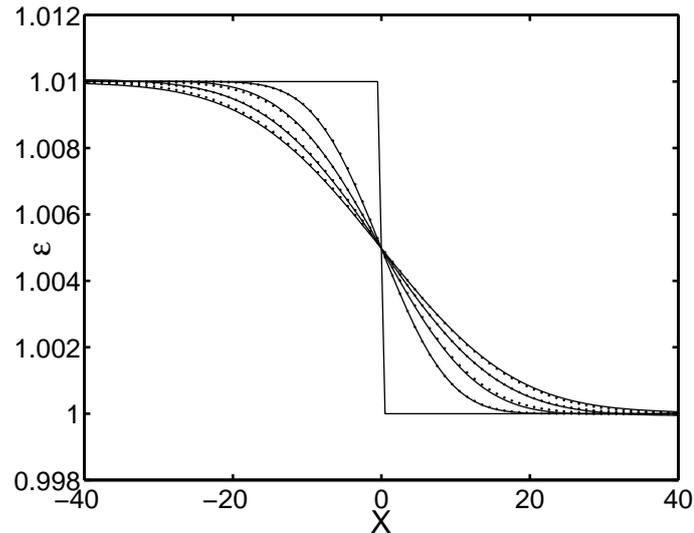


Figura 7.3: Evolução do perfil de energia interna.  $t = [0 - 2000]$ ,  $\Delta t = 0.1$ ,  $\Delta x = 1.0$ ,  $\nu = 2.0$ ,  $\Delta \varepsilon = 0.01$ ,  $n = 1.0$ , Rede  $D2V20$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica.

$a$  nas regiões de maior concentração da espécie  $b$ , e vice-versa, para manter a estabilidade numérica do método, mesmo com pequenos passos de tempo.

Os problemas de difusão de massa, quantidade de movimento e energia em misturas foram repetidos com excelente concordância com as soluções analíticas da equação de advecção-difusão. As conclusões obtidas no capítulo anterior com relação à validade das expressões para os coeficientes de transporte em modelos de baixas ordens de aproximação são igualmente válidas. Os modelos de segunda ordem representam apropriadamente a equação de difusão de massa com pequenos erros, como mostra a Fig. (7.4). Esta simulação corresponde à evolução do perfil de concentração num sistema de massas idênticas e desvio de temperatura nulo, após quatro intervalos de tempo, nos quais o perfil de concentração percorreu todo o domínio. O coeficiente de difusão binário foi calculado de acordo com a Eq. (3.130).

Da mesma forma, simulações do decaimento de perfis de velocidade sinusoidais e vórtices de Taylor foram realizadas com boa concordância com as soluções analíticas em modelos de terceira ordem e superiores. A viscosidade nos modelos de segunda ordem coincide com a expressão obtida pela análise multiescala apenas nos casos de massas moleculares iguais e desvio nulo de temperatura.

Resultados igualmente satisfatórios foram obtidos nos casos de difusão de energia, em misturas de gases com massas moleculares diferentes, com o modelo de quarta ordem e as redes  $D2V19/20$  e  $D3V52/53$  e com o modelo de quinta ordem e a rede  $D2V28b$ , com apenas pequenas diferenças entre eles. A Figura (7.5) apresenta um exemplo das simulações deste tipo, usando a rede  $D2V19$ , num sistema de partículas com relações de massas moleculares de  $19 : 1$  e o esquema de diferenças a montante de terceira ordem.

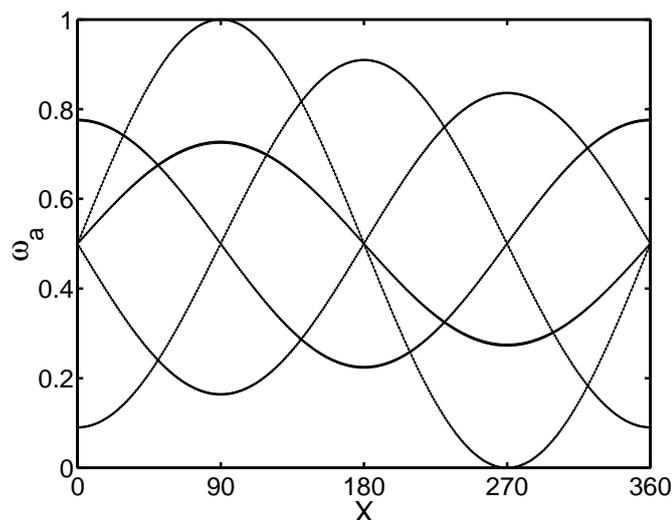


Figura 7.4: Evolução do perfil de concentração.  $t = [0 - 3600]$ ,  $\Delta t = 0.1$ ,  $\Delta x = 1.0$ ,  $\nu_{ab} = 2.0$ ,  $\Delta\omega_a = 1.0$ ,  $\theta_a = 0.1$ ,  $\theta_b = 0.1$ ,  $u_{x0} = 0.1$ , Rede  $D3V13$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica.

As vantagens dos esquemas de diferenças finitas apresentados aqui, em relação ao método de Boltzmann para gases em rede, consistem em aumentar a estabilidade numérica pelo ajuste do número de Courant e a diminuição do número de vetores de rede e distribuições de velocidade  $f_i$  necessárias para representar o estado de um sítio. Esta última vantagem é mais clara em duas dimensões onde o número de vetores das redes para modelos de quarta e quinta ordens é quase a metade das equivalentes utilizadas no LBM. A liberdade na escolha do passo de tempo permite simular gases com relações de massas

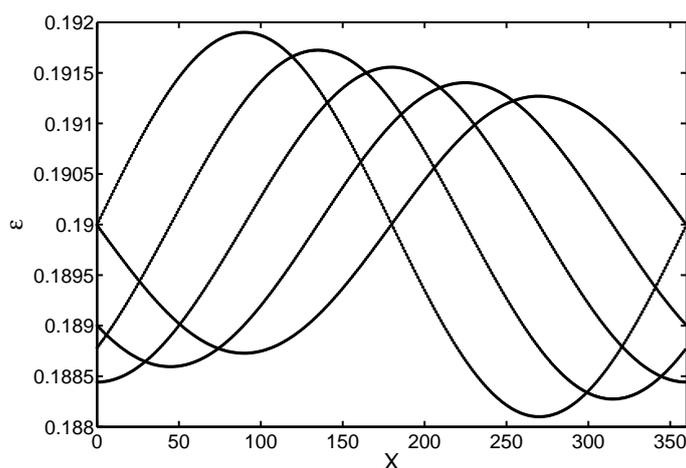


Figura 7.5: Evolução do perfil de energia interna.  $t = [0 - 3600]$ ,  $\Delta t = 0.1$ ,  $\Delta x = 1.0$ ,  $\nu_{aa} = 1.0$ ,  $\nu_{bb} = 1.5$ ,  $\nu_{ab} = 2.0$ ,  $\theta_a = -0.9$ ,  $\theta_b = 0.9$ ,  $\mu_a/\mu_b = 0.95/0.05$ ,  $u_{x0} = 0.1$ , Rede  $D2V19$ . As linhas contínuas correspondem à solução analítica.

superiores a 20, como foi verificado nas simulações, ao custo de um maior número de operações requeridas pelo esquema de discretização espacial e do temporal de três níveis.

A consistência com a hidrodinâmica nos modelos para gases simples é completa, dado que os modelos com redes  $D2V19/20/21$  e  $D3V52/53$  representam exatamente os momentos de quarta ordem requeridos na análise multiescala de Chapman-Enskog, a diferença de outros modelos como os propostos por Watari e Tsutahara [2006], cujas distribuições de equilíbrio são ajustadas heurísticamente e cujas redes possuem um número maior de velocidades.

# Capítulo 8

## Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um procedimento de discretização da equação de transporte de Boltzmann que permite resolver numericamente, mediante a técnica das diferenças finitas, as equações da hidrodinâmica, em gases simples e misturas binárias de gases ideais. O procedimento está baseado na aproximação da função distribuição de partículas por uma expansão em polinômios tensoriais de Hermite, em torno do equilíbrio global. A ordem de truncamento mínima na expansão polinomial, requerida para obter as equações de Navier-Stokes-Fourier, foi determinada com base na análise de Chapman-Enskog.

A expansão em torno do equilíbrio global permite a discretização do espaço de velocidades através do cálculo exato dos momentos hidrodinâmicos de baixa ordem por uma quadratura, cujas abscissas são constantes com relação ao estado macroscópico local do gás, e por isto podem ser usadas na solução de problemas com efeitos térmicos e em misturas de gases com massas moleculares diferentes. O resultado desta discretização é o conjunto de equações diferenciais chamado de equação de Boltzmann com velocidades discretas.

Soluções do problema de quadratura, em duas e três dimensões, foram apresentadas. Dois tipos principais de soluções foram discutidos: as soluções formadas por polígonos cujos vértices pertencem a uma rede cartesiana regular, utilizadas na construção do método de Boltzmann para gases em rede (LBM), e as soluções não-regulares, com um número menor de elementos, para uma determinada ordem de precisão, utilizadas na construção de um esquema de solução da equação de Boltzmann discreta pelo método das diferenças finitas.

Os dois métodos foram aplicados à simulação de escoamentos de gases simples e misturas binárias, empregando o modelo BGK para o operador de colisão. Os modelos de colisão implementados permitem a escolha independente das viscosidades ou das condutividades térmicas das espécies e do coeficiente de difusão binário através de três parâmetros de relaxação. A discretização proposta foi verificada satisfatoriamente pela simulação do problema de relaxação homogênea e do decaimento dos perfis de concentração, velocidade e temperatura, regidos pela equação de advecção-difusão. As características térmicas e

compressíveis do modelo foram testadas pela simulação da propagação de ondas de pressão e pela simulação do tubo de choque. Os resultados destas simulações foram comparados com a solução analítica das equações de Euler, para gases ideais monoatômicos, com excelente concordância.

A principal limitação do método de Boltzmann para redes, com aproximações de alta ordem da função distribuição Maxwelliana, é a estabilidade numérica, determinada principalmente pelo valor dos coeficientes de transporte e da magnitude dos gradientes das propriedades macroscópicas. Esta restrição tem origem no valor fixo do número de Courant e se torna mais pronunciada no tratamento de misturas de gases com massas moleculares muito diferentes.

A solução da equação de Boltzmann discreta usando esquemas de diferenças finitas de segunda ordem ou superiores incrementa consideravelmente os limites de estabilidade, como foi demonstrado pela simulação do tubo de choque, com altas relações de pressão, e de fenômenos difusivos em misturas de gases com relações de massas moleculares elevadas. Além disso, o menor número de velocidades moleculares das soluções do problema de integração por quadratura, sem as restrições impostas pelo método de Boltzmann para gases em rede, reduz os custos de memória computacional.

O incremento na amplitude das faixas de estabilidade, produzido pelo desacoplamento das discretizações espacial e temporal, permite reduzir o valor dos coeficientes de transporte. Esta característica é particularmente útil na simulação de escoamentos com elevado número de Reynolds.

A simplicidade dos algoritmos envolvidos e a equivalência entre os modelos propostos e as equações macroscópicas para o escoamento de gases no regime hidrodinâmico, expostas nos casos abordados nesta tese, mostram que a equação de Boltzmann discreta é uma ferramenta promissora para a simulação do transporte simultâneo de massa, quantidade de movimento e energia em escoamentos transientes de gases multicomponentes, em duas e três dimensões. A capacidade dos procedimentos de discretização apresentados não se limita aos casos expostos e podem ser utilizados na formulação de outros tipos de modelos, ou na adaptação dos já existentes no âmbito do método LBM.

Vários aspectos precisam ser abordados futuramente para ampliar a capacidade do método e viabilizar a sua aplicação em problemas de engenharia. Os mais relevantes são:

- A adaptação de modelos cinéticos linearizados, com múltiplos parâmetros de relaxação, que permitam a simulação de escoamentos de fluidos com números de Prandtl, Lewis e Schmidt ajustáveis.
- O desenvolvimento de condições de contorno independentes do processo de discretização espacial e consistentes com a hidrodinâmica, particularmente nos modelos com grande número de velocidades moleculares.
- A inclusão consistente do termo de força de corpo.

- A análise linear de estabilidade e de convergência dos esquemas empregados, para estabelecer seus limites e sua conexão com os parâmetros de relaxação e a relação de massas moleculares.

# Referências Bibliográficas

ABE, T. Derivation of the lattice Boltzmann method by means of the discrete ordinate method for the Boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, v. 131, p. 241–46, 1997.

ALEXANDER, F. J.; CHEN, S.; STERLING, J. D. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics. *Physical Review E*, v. 47, p. R2249, 1993.

Anderson Jr., J. D. *Modern Compressible Flow with Historical Perspective*. Third edition. [S.l.]: McGraw Hill, 2003.

ASINARI, P. Viscous coupling based lattice Boltzmann model for binary mixtures. *Physics of Fluids*, v. 17, p. 067102, 2005.

BATCHELOR, G. K. *An introduction to fluid mechanics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1967.

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 system. *Phys. Rev.*, v. 94, n. 3, p. 511, 1954.

CAO, S. et al. Physical symmetry and lattice symmetry in the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, v. 55, p. R21, 1997.

CERCIGNANI, C. *Mathematical methods in kinetic theory*. 2nd. ed. New York: Plenum Press, 1990.

CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. *The mathematical theory of non-uniform gases*. 3rd. ed. [S.l.]: Cambridge University Press., 1970.

CHEN, H.; CHEN, S.; MATTHAEUS, W. H. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. *Physical Review A*, v. 45, n. 8, p. R5339–5342, 1992.

CHEN, S.; DOOLEN, G. D. Lattice Boltzmann methods for fluid flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, v. 30, p. 329, 1998.

- CHEN, S.; MARTINEZ, D.; MEI, R. On boundary conditions in lattice Boltzmann methods. *Physics of Fluids*, v. 8, n. 9, p. 2527–36, 1996.
- CHEN, Y.; OHASHI, H.; AKIYAMA, M. Thermal lattice Bhatnagar-Gross-Krook model without nonlinear deviations in macrodynamic equations. *Physical Review E*, v. 50, p. 2776, 1994.
- CHOPARD, B.; DROZ, M. *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*. Cambridge, 341 pp.: Cambridge University Press, 1998.
- CORNUBERT, R.; D'HUMIÈRES, D.; LEVERMORE, D. A Knudsen layer theory for lattice gases. *Physica D*, v. 47, p. 241–259, 1991.
- D'HUMIÈRES, D. Generalized lattice Boltzmann equations. *Prog. Aeronaut. Astronaut.*, v. 159, p. 450, 1992.
- FACIN, P. C.; PHILIPPI, P. C.; SANTOS, L. O. E. dos. A non-linear lattice-Boltzmann model for ideal miscible fluids. *Future Generation Computer Systems*, v. 20, p. 945, 2004.
- FERZIGER, J. H.; KAPER, H. G. *Mathematical theory of transport processes in gases*. [S.l.]: North-Holland, 1972.
- FILIPPOVA, O.; HAENEL, D. Grid refinement for lattice BGK models. *Journal of Computational Physics*, v. 147, p. 219, 1998.
- FLEKKOY, E. G. Lattice Bhatnagar-Gross-Krook for imiscible fluids. *Physical Review E*, v. 47, p. 4247, 1993.
- FOTI, E.; SUCCI, S. Three-dimensional flows in complex geometries with the lattice Boltzmann method. *Europhysics Letters*, v. 10, n. 5, p. 433, 1989.
- FRISCH, U. et al. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems*, v. 1, p. 649–707, 1987.
- GENABEEK, O. van; ROTHMAN, D. H. Macroscopic manifestation of microscopic flows through porous media: Phenomenology from simulation. *Annual Review of Earth and Planetary Science*, v. 24, p. 63–87, 1996.
- GOLDMAN, E.; SIROVICH, L. Equations for gas mixtures. *Physics of Fluids*, v. 10, p. 1928, 1967.
- GRAD, H. Note on n-dimensional Hermite polynomials. *Commun. Pure Appl. Maths*, v. 2, p. 325, 1949.

GRAD, H. On the kinetic theory of rarefied gases. *Commun. Pure Appl. Maths*, v. 2, p. 331, 1949.

GROSS, E. P.; JACKSON, E. A. Kinetic models and the linearized Boltzmann equation. *Physics of Fluids*, v. 2, p. 432, 1959.

GROSS, E. P.; KROOK, M. Model for collision processes in gases: Small-amplitude oscillation of charged two-component systems. *Physical Review*, v. 102, p. 593, 1956.

GRUNAU, D.; CHEN, S.; EGGERT, K. A lattice Boltzmann model for multi-phase fluid flows. *Physics of Fluids A*, v. 5, p. 2557–2562, 1993.

GUNSTENSEN, A. K.; ROTHMAN, D. H. Lattice-Boltzmann studies of two-phase flow through porous media. *J. Geophys. Res.*, v. 98, p. 6431–41, 1993.

GUNSTENSEN, A. K. et al. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids. *Physical Review A*, v. 43, p. 4320, 1991.

HAMEL, B. B. Kinetic model for binary gas mixtures. *Physics of Fluids*, v. 8, p. 418, 1965.

HAZLETT, R. D.; CHEN, S. Y.; SOLL, W. E. Wettability and rate effects on immiscible displacement: Lattice Boltzmann simulation in microtomographic images of reservoir rocks. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 20, p. 167–175, 1998.

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, p. 282, 1998.

HE, X.; LUO, L. S. A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*, v. 55, p. 6333–36, 1997.

HE, X.; LUO, L. S. Theory of lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*, v. 56, n. 6, p. 6811–6817, 1997.

HE, X. et al. Analytic solutions of simple flow and analysis of non-slip boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Journal of Statistical Physics*, v. 87, p. 115–36, 1997.

HE, X. Y.; LUO, L. S.; DEMBO, M. Some progress in lattice Boltzmann method .1. nonuniform mesh grids. *Journal of Computational Physics*, v. 129, p. 357, 1996.

- HIGUERA, F.; JIMENEZ, J. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *Europhysics Letters*, v. 9, p. 663, 1989.
- HIGUERA, F.; SUCCI, S. Simulating the flow around a circular cylinder with a lattice Boltzmann equation. *Europhysics Letters*, v. 8, p. 517, 1989.
- HIGUERA, F.; SUCCI, S.; BENZI, R. Lattice gas dynamics with enhanced collisions. *Europhysics Letters*, v. 9, p. 345–49, 1989.
- HIRSCHFELDER, J. O.; CURTISS, C. F.; BIRD, R. B. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1964.
- HOLME, R.; ROTHMAN, D. H. Lattice-gas and lattice-Boltzmann models of miscible fluids. *Journal of Statistical Physics*, v. 68, p. 409, 1992.
- KREMER, G. M. *Uma Introdução à Equação de Boltzmann*. [S.l.]: EDUSP, 2005.
- LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, v. 61, p. 6546, 2000.
- LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Hybrid finite-difference thermal lattice Boltzmann equation. *International Journal of Modern Physics B*, v. 17, p. 41, 2003.
- LUO, L. S.; GIRIMAJI, S. S. Theory of the lattice Boltzmann method: Two-fluid model for binary mixtures. *Physical Review E*, v. 67, p. 036302, 2003.
- MAIER, R.; BERNARD, R.; GRUNAU, D. Boundary conditions for the lattice Boltzmann method. *Physics of Fluids*, v. 8, n. 7, p. 1788–1801, 1996.
- MARTYS, N. S.; CHEN, H. Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, v. 53, n. 1, p. 743–750, 1996.
- MARTYS, N. S. et al. Large scale simulations of single and multi-component flow in porous media. In: INTERNATIONAL SOCIETY FOR OPTICAL ENGINEERING. *SPIE Conference on Developments in X-Ray Tomography II*. Denver, 1999.
- MCCRACKEN, M. E.; ABRAHAM, J. Lattice Boltzmann methods for binary mixtures with different molecular weights. *Physical Review E*, v. 71, p. 046704, 2005.
- MCNAMARA, G.; ALDER, B. Analysis of the lattice Boltzmann treatment of hydrodynamics. *Physica A*, v. 194, p. 218, 1993.
- MCNAMARA, G.; ZANETTI, G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters*, v. 61, p. 2332–35, 1988.

- 
- MEI, R.; LUO, L. S.; SHYY, W. An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method. *Journal of Computational Physics*, v. 155, p. 307, 1999.
- MORSE, T. F. Energy and momentum exchange between nonequipartition gases. *Physics of Fluids*, v. 6, p. 1420, 1963.
- MORSE, T. F. Kinetic model equations for a gas mixture. *Physics of Fluids*, v. 7, p. 2012, 1964.
- PAN, C.; PRINS, J. F.; MILLER, C. T. A high-performance lattice Boltzmann implementation of multiphase flow in porous media. *Computer Physics Communications*, v. 158, n. 2, p. 89–105, 2004.
- PHILIPPI, P. C. et al. From the Boltzmann to the lattice-Boltzmann equation: beyond BGK collision models. *International Journal of Modern Physics C*, v. 18, p. 556, 2007.
- PHILIPPI, P. C. et al. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. *Physical Review E*, v. 73, p. 056702, 2006.
- PICO, C. E.; SANTOS, L. O. E. dos; PHILIPPI, P. C. Lattice-Boltzmann simulation of two-phase fluid flow through porous media. In: *Proceedings of COBEM 2005*. [S.l.: s.n.], 2005.
- PICO, C. E.; SANTOS, L. O. E. dos; PHILIPPI, P. C. A two-fluid BGK lattice Boltzmann model for ideal mixtures. *International Journal of Modern Physics C*, v. 18, p. 566, 2007.
- QIAN, Y. H.; D'HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equations. *Europhysics Letters*, v. 17, n. 6, p. 479–484, 1992.
- RAPAPORT, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- ROTHMAN, D. H.; KELLER, J. M. Immiscible cellular-automaton fluids. *Journal of Statistical Physics*, v. 52, p. 1119–1127, 1988.
- ROTHMAN, D. H.; ZALESKI, S. *Lattice-Gas Cellular Automata - Simple Models of Complex Hydrodynamics*. Cambridge, 297 pp.: Cambridge University Press, 1997. 297 p.
- ROWLINSON, J. S.; WIDOM, B. *Molecular Theory of Capillarity*. 2nd. [S.l.]: Dover Publications, 2002.
- SANTOS, L. O. E.; FACIN, P. C.; PHILIPPI, P. C. Lattice-Boltzmann model based on field mediators for immiscible fluids. *Physical Review E*, v. 68, p. 056302, 2003.

- 
- SANTOS, L. O. E. dos et al. Prediction of intrinsic permeabilities with lattice-Boltzmann method. In: *Proceedings of COBEM 2005*. [S.l.: s.n.], 2005.
- SANTOS, L. O. E. dos; WOLF, F. G.; PHILIPPI, P. C. Dynamics of interface displacement in capillary flow. *Journal of Statistical Physics*, v. 121, p. 197, 2005.
- SHAN, X.; CHEN, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, v. 47, n. 3, p. 1815–1819, 1993.
- SHAN, X.; DOOLEN, G. Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction. *Journal of Statistical Physics*, v. 81, n. 1/2, p. 379–393, 1995.
- SHAN, X.; DOOLEN, G. Diffusion in a multicomponent lattice Boltzmann equation model. *Physical Review E*, v. 54, p. 3614, 1996.
- SHAN, X.; HE, X. Discretization of the velocity space in solution of the Boltzmann equation. *Physical Review Letters*, v. 80, p. 65, 1998.
- SHAN, X.; YUAN, X.-F.; CHEN, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier-Stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 550, p. 413, 2006.
- SIROVICH, L. Kinetic modeling of gas mixtures. *Physics of Fluids*, v. 5, p. 908, 1962.
- SKORDOS, P. A. Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, v. 48, n. 6, p. 4823–41, 1993.
- SOFONEA, V.; SEKERKA, R. F. BGK models for diffusion in isothermal binary fluid systems. *Physica A*, v. 229, p. 494, 2001.
- SOFONEA, V.; SEKERKA, R. F. Viscosity of finite difference lattice Boltzmann models. *Journal of Computational Physics*, v. 184, p. 422, 2003.
- STERLING, J. D.; CHEN, S. Stability analysis of lattice Boltzmann methods. *Journal of Computational Physics*, v. 123, p. 196–206, 1996.
- STROUD, A. H. *Approximate Calculation of Multiple Integrals*. [S.l.]: Prentice-Hall, 1971.
- SUCCI, S. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford, 288 pp.: Oxford University Press, 2001.
- SWIFT, M. R. et al. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. *Physical Review E*, v. 54, n. 5, p. 5041–5052, 1996.

---

SWIFT, M. R.; OSBORN, W. R.; YEOMANS, J. M. Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids. *Physical Review Letters*, v. 75, n. 5, p. 830–833, 1995.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 2nd. ed. Philadelphia: Taylor and Francis, 1997.

WATARI, M.; TSUTAHARA, M. Supersonic flow simulations by a three-dimensional multispeed thermal model of the finite difference lattice Boltzmann method. *Physica A*, v. 364, p. 129, 2006.

WOLF-GLADROW, D. *Lattice gas cellular automata and lattice Boltzmann models: An introduction*. Berlin, 308 pp.: Springer-Verlag, 2000.

WOLFRAM, S. Cellular automaton fluids 1: Basic theory. *Journal of Statistical Physics*, v. 45, n. 3/4, p. 471–526, 1986.

XU, A. Finite-difference lattice-Boltzmann methods for binary fluids. *Physical Review E*, v. 71, p. 066706, 2005.

ZIEGLER, D. Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations. *Journal of Statistical Physics*, v. 71, p. 1171–77, 1993.

## APÊNDICES

# Apêndice A

Neste apêndice são apresentadas soluções ao problema de quadratura, Eq. (4.19), em duas e três dimensões e para varias ordens de precisão. Nos casos em que há varias soluções foram escolhidas aquelas com menor número de elementos e pesos positivos ou as que possuem algum aspecto conveniente, o qual será justificado em cada caso. As quadraturas conhecidas e utilizadas na literatura foram omitidas, tal é o caso das redes de segunda ordem  $D3Q15/19/27$  e de algumas das soluções compiladas por Philippi et al. [2006], que não foram empregadas no corpo da tese. Nos casos em que o sistema de equações resultante foi resolvido numericamente os valores são apresentados com 32 dígitos de precisão.

## Quadraturas em duas dimensões

### D2V7

Não-regular - Segunda ordem. Formada por um hexágono regular e o vetor nulo.

$\{\mathbf{c}_i\}$	No	$W_i$
$(0, 0)$	1	$\frac{1}{2}$
Hexágono $r = 2$	6	$\frac{1}{12}$

### D2V12

Não-regular - Terceira ordem

$\{\mathbf{c}_i\}$	No	$W_i$
$(r_1, 0)_s$	4	$\frac{1}{36}$
$(r_2, r_2)_s$	4	$\frac{1}{45} (5 - 2\sqrt{5})$
$(r_3, r_3)_s$	4	$\frac{1}{45} (5 + 2\sqrt{5})$

$$r_1 = \sqrt{6}, \quad r_2 = \frac{1}{2}\sqrt{3(3 - \sqrt{5})}, \quad r_3 = \frac{1}{2}\sqrt{3(3 + \sqrt{5})}.$$



$$\begin{aligned}
 r_1 &= 2.0681360611211866542982387592838, \\
 r_2 &= 1.8616199350188947262170687752153, \\
 r_3 &= 0.84919384990874735429339064621937, \\
 r_4 &= 1.1386549808474148993413927742791.
 \end{aligned}$$

### D2V37

Cartesiana regular - Quarta ordem.

$\{c_i\}$	No	$W_i$
$(0, 0)$	1	0.2331506691323525022865067040668499509961
$(c_L, 0)_s$	4	0.1073060915422190024124642871831399358510
$(c_L, c_L)_s$	4	$(-1)0.5766785988879488203006921539333941471077$
$(2c_L, 0)_s$	4	$(-1)0.1420821615845075026469894234413445497342$
$(2c_L, c_L)_s$	8	$(-2)0.5353049000513775232731501662188493535094$
$(2c_L, 2c_L)_s$	4	$(-2)0.1011937592673575475410908506639114714701$
$(3c_L, 0)_s$	4	$(-3)0.24530102775771734546591664326784446388389$
$(3c_L, c_L)_s$	8	$(-3)0.28341425299419821740052529419488023347919$

$$c_L = 1.19697977039307435897238846385327$$

### D2V28a

Não-regular - Quinta ordem.

$\{c_i\}$	No	$W_i$
$(r_1, 0)_s$	4	$(-3)0.26027071995894302263952482664246$
$(r_2, 0)_s$	4	$(-1)0.13888888888888888888888888888889$
$(r_3, 0)_s$	4	0.17103602557633735327365677146965
$(r_4, r_5)_s$	8	$(-2)0.11574074074074074074074074074$
$(r_6, r_7)_s$	8	$(-1)0.31250000000000000000000000000000$

$$\begin{aligned}
 r_1 &= 3.9001413501215540670370404836388, \\
 r_2 &= 2.4494897427831780981972840747059, \\
 r_3 &= 0.88819899182110166013876361675375,
 \end{aligned}$$



$(4c_L, c_L)_s$	8	$(-4)0.23735924329952816934380784505459$
$(3c_L, 3c_L)_s$	4	$(-4)0.31364487158941339647312653960533$
$(5c_L, 0)_s$	4	$(-6)0.60703805309421738777036266574888$

$$c_L = 1.062013780610965089020397898531013447236$$

### D2V53b

Cartesiana regular - Quinta ordem.

$\{c_i\}$	No	$W_i$
$(0, 0)$	1	0.18955634713466447806134485803699
$(c_L, 0)_s$	4	$(-1)0.99132557804898790867662698168848$
$(c_L, c_L)_s$	4	$(-1)0.61164169930989878676174788754267$
$(2c_L, 0)_s$	4	$(-1)0.19853784336793138563012961549256$
$(2c_L, c_L)_s$	8	$(-2)0.88600413008550070333117374853297$
$(2c_L, 2c_L)_s$	4	$(-2)0.23585015800464102029131393204335$
$(3c_L, 0)_s$	4	$(-3)0.75464903458927344850925039010995$
$(3c_L, c_L)_s$	8	$(-3)0.78235933218962830011659737674253$
$(4c_L, c_L)_s$	8	$(-4)0.18144218942954916795103414850186$
$(3c_L, 3c_L)_s$	4	$(-4)0.25588405362935827478621646113851$
$(5c_L, 0)_s$	4	$(-6)0.57241967827239846544910788019279$

$$c_L = 1.07598402152652819203148177110914.$$

### D2V81

Cartesiana regular - Sexta ordem.

$\{c_i\}$	No	$W_i$
$(0, 0)$	1	0.15381368561993327480016393281047
$(c_L, 0)_s$	4	$(-1)0.90384577224030353970110793990574$
$(c_L, c_L)_s$	4	$(-1)0.60915016936039058587330050442833$
$(2c_L, 0)_s$	4	$(-1)0.24220944974510589141089950751189$
$(2c_L, c_L)_s$	8	$(-1)0.13146486542344190495356324906071$
$(2c_L, 2c_L)_s$	4	$(-2)0.39625069477690272922236887885447$
$(3c_L, 0)_s$	4	$(-2)0.18542634450575202709475751515719$
$(3c_L, c_L)_s$	8	$(-2)0.16035095499280095678252396104990$

$(3c_L, 2c_L)_s$	8	$(-3)0.22249142091157323504661073542771$
$(4c_L, 0)_s$	4	$(-3)0.10005397521768470189938663937331$
$(4c_L, c_L)_s$	8	$(-4)0.34398327658314507198424339434788$
$(3c_L, 3c_L)_s$	4	$(-4)0.54494804327695595496419138458347$
$(4c_L, 2c_L)_s$	8	$(-4)0.18837067344235864954995520362633$
$(5c_L, 0)_s$	4	$(-5)0.24044498210975877359724801422179$
$(5c_L, 2c_L)_s$	8	$(-6)0.43501093550340618099459555348285$

$$c_L = 0.97000849873939472756690119064088.$$

## Quadraturas em três dimensões

### D3V13

Não-regular - Segunda ordem.

$\{c_i\}$	No	$W_i$
$(0, 0, 0)$	1	$\frac{2}{5}$
$(\pm r_1, \pm r_2, 0)$	12	$\frac{1}{20}$
$(0, \pm r_1, \pm r_2)$		
$(\pm r_2, 0, \pm r_1)$		

$$r_1 = \sqrt{\frac{1}{2}(5 - \sqrt{5})}, \quad r_2 = \sqrt{\frac{1}{2}(5 + \sqrt{5})}.$$

### D3V27

Não-regular - Terceira ordem.

$\{c_i\}$	No	$W_i$
$(0, 0, 0)$	1	$\frac{8(90 \pm \sqrt{15})}{2205}$
$(r_1, 0, 0)_s$	6	$\frac{2(135 \mp 23\sqrt{15})}{15435}$
$(r_2, r_2, 0)_s$	12	$\frac{162 \pm 41\sqrt{15}}{6174}$
$(r_3, r_3, r_3)_s$	8	$\frac{783 \mp 202\sqrt{15}}{24696}$

$$r_1 = \sqrt{\frac{1}{2}(15 \pm \sqrt{15})}, \quad r_2 = \sqrt{6 \mp \sqrt{15}}, \quad r_3 = \sqrt{9 \pm 2\sqrt{15}}.$$

### D3V52

Não-regular - Quarta ordem. Esta solução é formada pela superposição de 2 octaedros, 2 hexaedros e um icosaedro em duas posições.

$\{c_i\}$	No	$W_i$
$(r_1, 0, 0)_s$	6	$(-3)0.13396328411554715819343900565630$
$(r_2, 0, 0)_s$	6	$0.11897414255926717878460218002074$
$(r_3, r_3, r_3)_s$	8	$(-6)0.211251050125327341012185425910911$
$(r_4, r_4, r_4)_s$	8	$(-1)0.23323030354067151203216594532434$
$(\pm r_5, \pm r_6, 0)$ $(0, \pm r_5, \pm r_6)$ $(\pm r_6, 0, \pm r_5)$	12	$(-2)0.41152263374485596707818930041152$
$(\pm r_6, \pm r_5, 0)$ $(0, \pm r_6, \pm r_5)$ $(\pm r_5, 0, \pm r_6)$	12	

$$\begin{aligned}
 r_1 &= 3.9686018616042420070444156354776, \\
 r_2 &= 1.2602433217164873796927821906668, \\
 r_3 &= 5.4701527781812974908729728265315, \\
 r_4 &= 1.3127046003483395961563956868375, \\
 r_5 &= 2.6642215019313457864822937892544, \\
 r_6 &= 1.3791025301429491829329020297135.
 \end{aligned}$$

### D3V53

Não-regular - Quarta ordem. Esta variante da solução anterior utiliza o vetor de comprimento nulo e uma relação entre as componentes de um octaedro e um hexaedro para obter um conjunto de vetores mais homogêneo e compacto, com elementos de menor comprimento.

$\{c_i\}$	No	$W_i$
$(0, 0, 0)$	1	$0.1604535473439741616518245597548714233661$
$(r_1, 0, 0)_s$	6	$(-4)0.2610831279157132807406170157709466736349$
$(r_2, 0, 0)_s$	6	$(-1)0.7174934857267238907082160091715666723467$
$\frac{1}{2}(r_1, r_1, r_1)_s$	8	$(-3)0.2449589724438005243798616502219997140917$
$(r_4, r_4, r_4)_s$	8	$(-1)0.3852107593311577995762464240402307192628$

$(\pm r_5, \pm r_6, 0)$	12	$(-2)0.4115226337448559670781893004115226337449$
$(0, \pm r_5, \pm r_6)$		
$(\pm r_6, 0, \pm r_5)$		
$(\pm r_6, \pm r_5, 0)$	12	
$(0, \pm r_6, \pm r_5)$		
$(\pm r_5, 0, \pm r_6)$		

$$r_1 = 4.817887162654899300006953315132177111404,$$

$$r_2 = 1.452391666954027804949791054821548185498,$$

$$r_4 = 1.122678018690520302079501161609284563438,$$

$$r_5 = 2.664221501931345786482293789254365412035,$$

$$r_6 = 1.379102530142949182932902029713485900373.$$