

## UMA NOVA CONDIÇÃO DE CONTORNO PARA MODELO TÉRMICO DE LATTICE BOLTZMANN

### Thiago Luiz Merlo

LMPT, Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC  
Trindade, Florianópolis, Santa Catarina  
CEP 88040-900, Caixa Postal 476  
thiago@lmpt.ufsc.br

### Diogo Nardelli Siebert

diogo@lmpt.ufsc.br

### Paulo Cesar Philippi

philippi@lmpt.ufsc.br

**Resumo:** O trabalho aborda a utilização de um método numérico baseado no modelo lattice Boltzmann para escoamentos térmicos quase incompressíveis que descreve tanto processos difusivos como convectivos. Adicionalmente é estudado um conjunto alternativo de condições de contorno para imposição de velocidade e temperatura prescritas na parede. As seguintes simulações foram realizadas para comprovação da validade do método: escoamento de Couette, um problema de dissipação de energia cisalhante e uma convecção natural.

**Palavras-chave:** lattice Boltzmann, duas distribuições, Couette, convecção natural, escoamento incompressível.

## 1. INTRODUÇÃO

O estudo da dinâmica dos fluidos tem sido um assunto que desperta a atenção da comunidade científica. Métodos como diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos têm sido amplamente estudados a fim de que, através destes, se possa determinar soluções numéricas para as equações da mecânica dos fluidos.

Neste contexto, foi desenvolvido recentemente um novo método numérico para descrição da dinâmica dos fluidos conhecido como *lattice Boltzmann method* (LBM). Historicamente, o método foi sugerido como um aprimoramento do método *lattice gas automata* (LGA), sendo que este tinha como idéia principal simular um mundo microscópico simplificado, onde as variáveis densidade e velocidade do fluido são calculadas através de médias. Resumidamente, o LGA consiste em discretizar a velocidade de cada partícula em um número finito de direções e fazer com que estas partículas se colidam e se propaguem de sítio em sítio.

Posteriormente, He e Luo (1997) demonstraram que alguns modelos utilizados em LBM podem ser obtidos discretizando a já conhecida equação de Boltzmann para gases, onde as derivadas são resolvidas numericamente através de diferenças finitas e as integrais através de quadraturas, já que esta é uma equação integro-diferencial.

Este método tem sido utilizado com êxito para simular escoamentos em micro canais, escoamento em meios porosos, escoamentos multifásicos e escoamento com reações químicas, por ser um método de fácil implementação, além de ter como característica redes regulares que podem ser ajustadas facilmente a geometrias complexas.

Como originalmente elaborado, o método restringia-se a escoamentos isotérmicos. Alguns autores desenvolveram novos modelos capazes de simular problemas térmicos. Para que tal melhoramento seja realizado modificações no LBM são necessárias. Alexander, Chen e Sterling (1993) propõe aumentar o numero de velocidade discretas para que a equação de balanço de energia também seja satisfeita. Estes primeiros modelos conhecidos, como *multispeed*, sofreram graves problemas de instabilidade numérica o que tornou os modelos ineficazes em se tratando de problemas práticos. Sendo assim, alguns métodos alternativos foram desenvolvidos como o de Luo (2003) que propõem separar a parte hidrodinâmica, resolvida com lattice Boltzmann, da parte termodinâmica resolvida com diferenças finitas aplicadas diretamente a equação de balanço da energia.

Um dos modelos mais utilizados em LBM para problemas térmicos foi o proposto por He, Chen e Doolen (1989), que utiliza duas funções distribuições, uma encarregada do campo de velocidades e outra do campo de temperatura. Neste trabalho faremos uso deste modelo juntamente com condições de contorno propostas por D’Orazio (2003) para solução de problemas de convecção natural e escoamentos do tipo Couette com gradiente de temperatura.

O presente artigo está organizado da seguinte maneira: no capítulo dois descreve-se a equação de Boltzmann em sua forma contínua apresentando também o conceito de uma segunda distribuição encarregada da evolução da energia interna do fluido, para então discutir sobre os modelos discretos que provem destas equações contínuas processo. No capítulo três estuda-se uma condição de contorno proposta por D’Orazio (2003) e por fim são apresentados resultados das simulações realizadas com o uso deste modelo: escoamento de Couette com gradiente de temperatura, decaimento de onda de cisalhamento e convecção natural.

## 2. MÉTODO LATTICE BOLTZMANN COM DUAS DISTRIBUIÇÕES DE EQUILÍBRIO

A teoria cinética descreve as variáveis que caracterizam os fluidos a partir de seu comportamento microscópico como uso de uma abordagem probabilística. Dentro desta teoria uma das equações fundamentais é a equação de Boltzmann que descreve a dinâmica dos fluidos através da função distribuição. Devido à forma complexa desta equação, comumente se utiliza formassimplificadas desta, sendo a mais conhecida a proposta por Bhatnagar, Gross e Krook (1994):

$$\partial_t f + (\varepsilon \cdot \nabla) f = -\frac{f - f^{eq}}{\tau_v} + (G \cdot \nabla_\varepsilon) f \quad (1)$$

onde  $f$  é a função distribuição de partículas,  $\varepsilon$  é a velocidade microscópica do fluido,  $f^{eq}$  é a distribuição de equilíbrio,  $\tau_v$  é o tempo de relaxação que pode ser relacionado com a viscosidade cinemática através de uma análise multiescala por  $\nu = \tau_v RT$  e por fim temos que  $G$  é dado como a força externa por unidade de massa.

A função distribuição de partículas é uma função de  $2D+1$  variáveis  $f(\vec{x}, \vec{\varepsilon}, t)$ , sendo  $D$  a dimensão do espaço. Ela pode ser entendida como a fração de partículas do fluido que ocupam a posição  $\vec{x}$ , com velocidade  $\vec{\varepsilon}$  no tempo  $t$ . Utilizando esta interpretação podemos relacionar as variáveis macroscópicas como médias ou momentos desta função distribuição:

$$\rho = \int f d\varepsilon \quad (2)$$

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

$$\rho e = \frac{1}{2} \int f (\varepsilon - \vec{u})^2 d\varepsilon \quad (4)$$

A distribuição de equilíbrio é obtida da equação de Boltzmann e resulta na distribuição de Maxwell-Boltzmann que tem a forma:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)} \exp\left[-\frac{(\varepsilon - \bar{u})^2}{2RT}\right] \quad (5)$$

A fim de simular as equações descritas acima, temos de discretizar o espaço de velocidades. Espera-se obter uma rede regular composta pelas nove velocidades (D2Q9) e que em cada passo de tempo as duas distribuições de velocidades propaguem para um ponto da rede. Para isso usa-se a quadratura de Gauss-Hermite. A figura 1 apresenta as nove velocidades e suas direções  $\vec{c}_i$ :

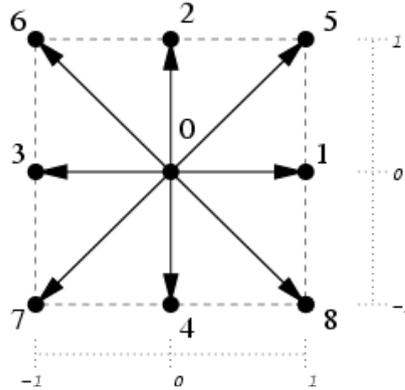


Figura 1: Discretização das velocidades na rede D2Q9

Para discretizar a equação (1) integra-se ela de um tempo  $t$  até  $t+\delta t$ . Com isso obtemos a equação discreta de evolução da função  $f$ .

$$\tilde{f}(\bar{x} + \vec{c}_i \delta t, t + \delta t) - \tilde{f}(\bar{x}, t) = -\frac{\delta t}{\tau_v + 0,5\delta t} [\tilde{f}(\bar{x}, t) - f^{eq}(\bar{x}, t)] + \frac{\tau_v G(\varepsilon - u) f^{eq} \delta t}{(\tau_v + 0,5\delta t) RT} \quad (6)$$

Onde  $\tilde{f}$  é dado por:

$$\tilde{f} = f + \frac{\partial t}{2\tau_v} (f - f^{eq}) - \frac{\partial t}{2} 3G(\varepsilon - u) f^{eq} \quad (7)$$

A fim de simplificar a distribuição de equilíbrio usa-se uma expansão em série de Taylor para a equação (5) desprezando os termos de velocidade de terceira ordem, impondo energia interna constante e igual a  $1/3$ :

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[ 1 + 3(\vec{c}_i \cdot \bar{u}) + 4,5(\vec{c}_i \cdot \bar{u})^2 - 1,5 \bar{u}^2 \right] \quad (8)$$

onde  $w_i = 4/9$ , para  $i = 0$ ;  $w_i = 1/9$ , para  $i = 1, 2, 3, 4$ ;  $w_i = 1/36$ , para  $i = 5, 6, 7, 8$ ;

De modo análogo, podemos obter as variáveis macroscópicas que descrevem o fluido discretizando as equações (2) e (3).

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i = \sum_{i=0}^8 \tilde{f}_i \quad (9)$$

$$\rho \bar{u} = \sum_{i=0}^8 f_i c_i = \sum_{i=0}^8 \tilde{f}_i c_i + \frac{\rho G \delta t}{2} \quad (10)$$

Através desta distribuição podemos determinar a densidade e o campo de velocidade, deixando a tarefa de calcular o campo temperatura para uma segunda função distribuição, conforme veremos a seguir. Utilizando uma análise de multiescala conhecida como análise de Chapmann-Enskog é possível obter as equações diferenciais que regem a dinâmica do fluido:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{u}) = 0 \quad (11)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} = \nu(\nabla \cdot \Pi) + \bar{g} \quad (12)$$

onde  $\Pi$  é o tensor tensão.

A fim de calcularmos o campo de temperatura incorporamos uma segunda distribuição, sendo que esta fica responsável pelo cálculo da energia interna do fluido, que é definida por:

$$\mathbf{g} = \frac{(\varepsilon - u)^2}{2} f \quad (13)$$

De maneira análoga esta nova distribuição deve ser discretizada. Empregando a mesma rede usada anteriormente (D2Q9) obtemos a sua equação de evolução no tempo:

$$\tilde{g}(\bar{x} + \bar{c}_i \delta t, t + \delta t) - \tilde{g}(\bar{x}, t) = -\frac{\partial t}{\tau_c + 0,5 \delta t} [\tilde{g}(\bar{x}, t) - g^{eq}(\bar{x}, t)] + \frac{\tau_c f(x, t) q(x, t) \delta t}{\tau_c + 0,5 \delta t} \quad (14)$$

Onde  $\tau_c$  é um segundo tempo de relaxação que é relacionado com a condutividade térmica ( $\chi$ ) pela equação  $\chi = 2\tau_c RT$ . Os termos  $q$ ,  $\tilde{g}$  são iguais a:

$$q = [c_i - u(\bar{x}, t)] \cdot \frac{[\bar{u}(\bar{x} + \bar{c}_i \delta t, t + \delta t) - u(\bar{x}, t)]}{\delta t} \quad (15)$$

$$\tilde{g} = g + \frac{\delta t}{2\tau_c} (g - g^{eq}) - \frac{\partial t}{2} f q \quad (16)$$

A distribuição de equilíbrio pode ser encontrada de maneira análoga à feita para a primeira distribuição e também se faz necessária a simplificação desta, que se resume então a:

$$g_0^{eq} = -\frac{2}{3} \rho e \bar{u}^2 \quad (17a)$$

$$g_{1,2,3,4}^{eq} = \frac{\rho e}{9} [1,5 + 1,5(\bar{c}_i \cdot \bar{u}) + 4,5(\bar{c}_i \cdot \bar{u})^2 - 1,5 \bar{u}^2] \quad (17b)$$

$$g_{5,6,7,8}^{eq} = \frac{\rho e}{36} [3 + 6(\bar{c}_i \cdot \bar{u}) + 4,5(\bar{c}_i \cdot \bar{u})^2 - 1,5 \bar{u}^2] \quad (17c)$$

Com isto obtemos a forma discreta da equação que calcula a variável energia interna dada por:

$$\rho e = \sum_{i=0}^8 g_i = \sum_{i=0}^8 \tilde{g}_i + \frac{\partial t}{2} \sum_{i=0}^8 f_i q_i \quad (18)$$

Diante disto temos que o novo modelo também satisfaz a equação de balanço de energia:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \vec{u}) + \rho e \nabla \cdot \vec{u} = -\nabla \cdot (\chi \nabla e) + \nabla u : \Pi \quad (19)$$

### 3. CONDIÇÃO DE CONTORNO ADOTADA

Já que o campo de velocidade e temperatura são determinados por distribuições distintas, podemos também separar o problemas de impor condições de contorno.

Na maior parte das simulações que usam lattice Boltzmann, em geral em meio porosos, se utiliza a condição de contorno o *bounce back*, onde as distribuições são refletidas ao caírem em um sitio de contorno, o que acarreta velocidade nula no contorno, ou se usa condição periódica, onde tudo que sai de um lado entra do outro, criando uma placa infinita.

Neste trabalho torna-se necessária a busca por uma nova forma de condição de contorno que possibilite impor velocidade diferente de zero na parede assim como temperatura, devido a isto algumas condições de contorno foram estudadas.

Em seu artigo He, Chen e Doolen (1989) usa uma condição de contorno para a temperatura baseado na condição de bounce back parte de não equilíbrio da função distribuição, ou seja se impõe que as distribuições de não equilíbrio em sentidos opostos são iguais. Além de impor velocidade ou densidade e temperatura.

Conforme pode ser visto na figura 2 as distribuições relativas a algumas direções são desconhecidas, pois são refletidas da parede. D'Orazio (2003) propõem em sua tese determiná-las utilizando uma distribuição de equilíbrio com uma energia  $e'$  que é escolhida de modo a impor a temperatura desejada.

Exemplo: na parede norte do escoamento observa-se que as direções não conhecidas após a propagação são 4,7,8 como representados na figura 2:

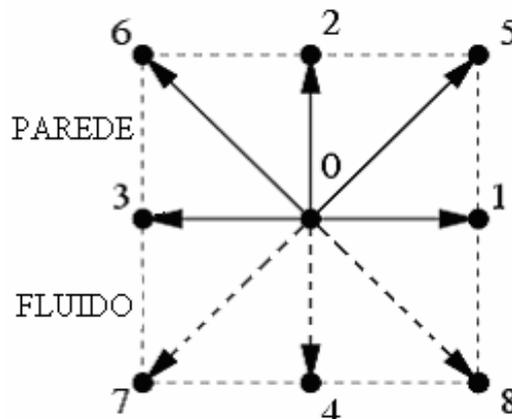


Figura 2: Direções de um sitio da parede norte

Assim sendo, temos o valor das outras seis direções: 0,1,2,3,4,6 e precisamos calcular o valor de energia que imposta na distribuição de equilíbrio imponha a temperatura almejada, para calcular a condição de contorno da função  $g$ . Ou seja:

$$g_{4,7,8} = g^{eq}(\rho, \bar{u}, e') \quad (20)$$

Para o calculo de  $e'$  usamos a equação (18), e assim obtemos qual a forma deste:

$$e' = \frac{3f_i q_i - 6S + 4\rho e + 3\rho e u_y - 3\rho e u_y^2}{\rho(2 - 3u_y + 3u_y^2)} \quad (21)$$

onde S é o somatório das distribuições conhecidas, no caso o somatório das seis direções mencionadas anteriormente.

Como temos que a velocidade em y é nula na parede norte, ou seja não a movimento normal a área, temos que a equação pode ser simplificada:

$$e' = \frac{3f_i q_i - 6S + 4\rho e}{2\rho} \quad (22)$$

Agora para calcular a condição de contorno da função f utilizamos a seguinte equação baseada na condição *bouce back*:

$$f_2^{neq} = f_4^{neq} \quad (23)$$

Com o uso das equações (9), (10) e (23) podemos calcular as distribuições desconhecidas, o que faz com que estas direções sejam dadas por:

$$f_4 = f_2 - \frac{2}{3}\rho u_y \quad (24)$$

$$f_7 = f_5 + \frac{(f_1 - f_3)}{2} - \frac{1}{6}\rho u_y - \frac{1}{2}\rho u_x \quad (25)$$

$$f_8 = f_6 - \frac{(f_1 - f_3)}{2} - \frac{1}{6}\rho u_y + \frac{1}{2}\rho u_x \quad (26)$$

## 4. RESULTADOS

Com o propósito de testar a condição de contorno proposta foram simulados três problemas e cujos resultados foram comparados a suas respectivas soluções analíticas.

### 4.1. Escoamento de Couette com gradiente de temperatura

O problema do Couette com gradiente de temperatura é uma boa forma de testar o modelo, visto que apresenta uma solução analítica que pode ser comparada à obtida numericamente. O problema consiste em um escoamento incompressível entre placas onde uma delas fica estática com uma temperatura  $T_0$  enquanto a outra se movimenta com velocidade U e possui temperatura  $T_1$ .

Utilizando a equação de balanço de energia (19) juntamente com as equações de Navier Stokes, considerando o problema proposto tem-se que:

$$\frac{T - T_0}{T_1 - T_0} = \frac{y}{H} + \frac{\text{Pr} Ec}{2} \frac{y}{H} \left(1 - \frac{y}{H}\right) \quad (27)$$

onde o numero de Prandtl é dado por  $\nu/\chi$ , o numero de Eckert=  $U^2/(e_1 - e_0)$ ,  $e$  é dado por  $e_i = RT_i$  e H é a distancia entre as placas,.

Foram simulados casos alterando o número de Prandtl (Pr) e comparou-se o resultado numérico ao analítico. Os resultados destas comparações são apresentados na figura 3:

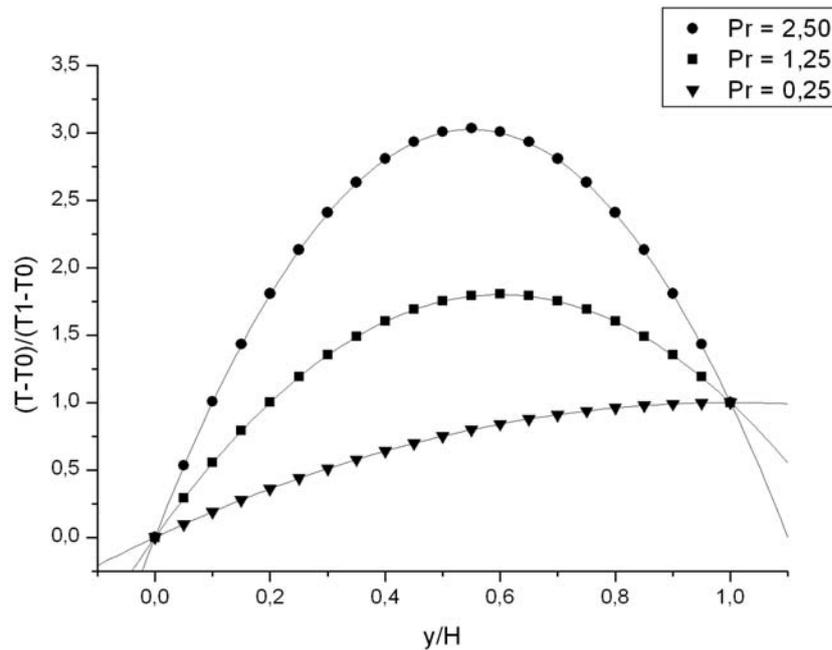


Figura 3: Perfil de temperatura em um Couette simulado e analítico para diferente número de Pr

Nota-se que os resultados numéricos estão de acordo com a solução analítica, mesmo utilizando malhas pequenas, como o caso da figura 3 onde foram simulados casos com uso de 20 sítios, o que comprova a viabilidade do método assim como a condição de contorno adotada.

#### 4.2. Convecção Natural

A convecção natural é gerada a partir de um gradiente de densidade do fluido provocado por uma diferença de temperatura entre duas placas planas paralelas que, na presença de uma força de corpo faz com que apareçam regiões de circulação. Assim, a partir de uma certa diferença de temperatura e altura do sistema, medida pelo número de Rayleigh  $= \beta \Delta T g_0 H^3 / \nu \chi$ , é possível a convecção. Porém é necessária uma perturbação para que esta se inicie.

Para simular este problema foi construído um meio retangular com diferença de temperatura entre as placas superior e inferior e condição de contorno periódica nas fronteiras laterais. A distribuição inicial de temperatura no fluido é linear na direção perpendicular as placas.

Para aplicar a força de campo foi empregada a aproximação de Boussinesq, ou seja, todas as propriedades do fluido são constantes durante a convecção exceto a densidade, que varia linearmente com a temperatura. Diante disto o termo de força é resultante do peso do fluido e esta dada por:

$$G = \beta g_0 (T - T_1) \quad (28)$$

onde  $\beta$  é o coeficiente de expansão térmica.

A fim de começar a convecção na simulação se faz necessária uma perturbação, isto é conseguido na distribuição inicial de pressão, acarretando convecção de imediato. Os resultados são apresentados nas figuras 4a e 4b:

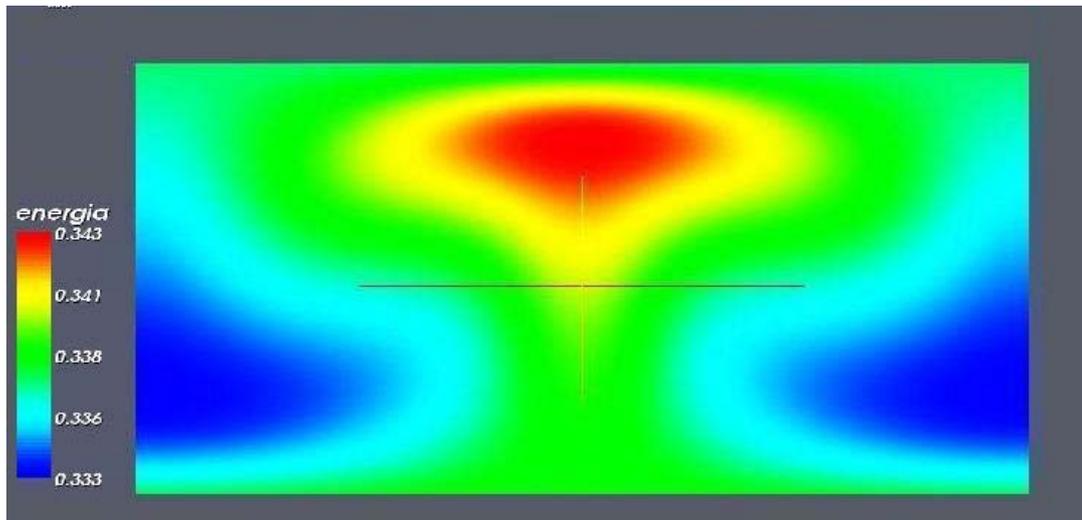


Figura 4a: Campo de energia interna

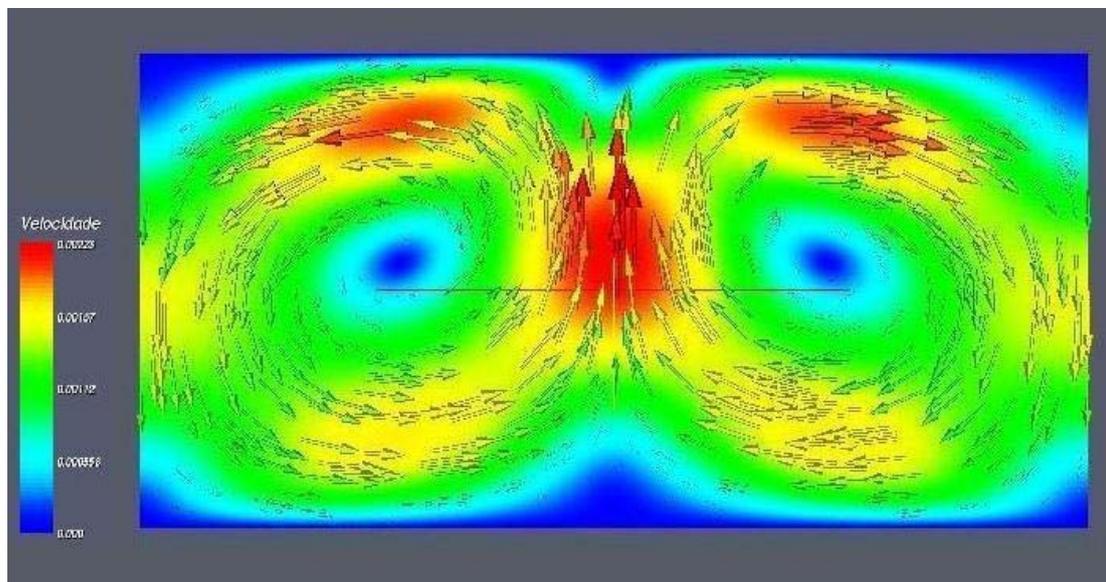


Figura 4b: Campo de Velocidades

Além dos bons resultados qualitativos apresentados nas figuras 4a e 4b obtiveram-se números de Rayleigh crítico\*, usando redes pequenas (3200 sítios), com erro de aproximadamente 1% e caso se aumente a rede conseguem-se erros ainda menores. Isto qualifica os resultados quantitativamente o que chama a atenção dada a complexidade do problema Como critério de avaliação o número de Rayleigh crítico foi obtido pela teoria da estabilidade linear.

### 4.3. Decaimento de onda cisalhante

O decaimento de onda cisalhante é um problema de geração de energia interna por meio de energia cinética do fluido. Neste problema o fluido começa com uma velocidade na forma senoidal ao longo de um duto e por efeito de dissipação viscosa o fluido é freado até parar.

Considerando um fluido que apresenta velocidade nula na direção x, sem gradiente de pressão e sem gradiente de velocidade na direção x, obtém-se a partir da equação de Navier Stokes a seguinte expressão para componente y da velocidade:

$$u_y(x, y) = u_0 e^{-\frac{\nu 2\pi^2 t}{L}} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right). \quad (29)$$

\*Rayleigh crítico: número que expressa o limite em que se inicia a convecção.

Substituindo a equação da energia cinética pela equação (29) e integrando ao longo de todas as posições temos que a energia cinética decai exponencialmente segundo a equação:

$$Ec = \frac{L\rho u_0^2}{2} e^{-2v\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 t} \quad (30)$$

Como a energia do sistema permanece constante, a energia interna aumenta na mesma taxa da energia cinética. Sendo assim podemos comparar a simulação com o resultado analítico, o que pode ser visualizado na figura 5:

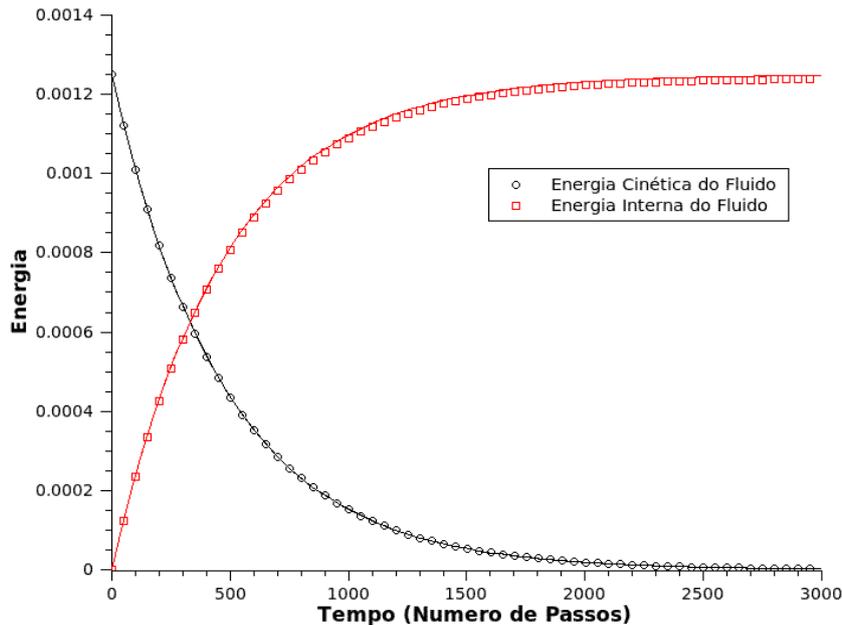


Figura 5: Evolução da energia interna e cinética do fluido com o tempo

Analisando a figura encontramos uma distorção pequena entre as duas soluções apresentadas, o que sustenta ainda mais o modelo térmico proposto. Verifica-se então que o termo de dissipação térmica é coerente.

## 5. CONCLUSÃO

O LBM para modelos térmicos com duas distribuições tem como característica a separação da parte hidrodinâmica do problema à parte térmica, sendo que cada parte possui sua própria distribuição. O método se comporta com maior estabilidade comparado aos modelos antigos de LBM térmicos. A condição de contorno proposta por D’Orazio (2003) se adaptou aos problemas propostos e alcançou resultados muito precisos quando comparados a suas resoluções analíticas.

## 6. REFERÊNCIAS

- Alexander, F.J., Chen, S., Sterling, J.D. 1993 “Lattice Boltzmann Thermohydrodynamics”, Phys. Rev. E, Los Alamos, New Mexico.
- Bhatnagar, P.L., Gross, E.P. and Krook, M., “A model for collision process in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component system, Phys. Rev.94
- D’Orazio, A., “Kinetic schemes for fluids flows with heat transfer”, Roma, Italia, University of Rome “La Sapienza”, Roma 2003.

- He, X. Chen, S., Doolen, G.D., 1989, “A novel Thermal Model for the Lattice Boltzmann Method in Incompressible Limit”, Journal of Computation Physics, Los Alamos, New Mexico, pp 282-299
- He, X., Luo, L. 1997. “Theory of the lattice Boltzmann method: from the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation”. *Phys. Rev. E* 56.
- Lallemand, P., Luo, L.S. 2003 Hybrid finite-difference thermal lattice Boltzmann equation, Int. J. Mod. Phys. B 17 pp 41-47.

## **A NEW BOUNDARY CONDITION FOR THERMAL LATTICE BOLTZMANN METHOD**

### **Thiago Luiz Merlo**

LMPT, Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC  
Trindade, Florianópolis, Santa Catarina  
CEP 88040-900, Caixa Postal 476  
thiago@lmpt.ufsc.br

### **Diogo Nardelli Siebert**

diogo@lmpt.ufsc.br

**Abstract:** The present work addresses some applications of a lattice Boltzmann method for thermal flows which describes diffusive, convective and dissipative processes. It used a different set of boundary conditions to require prescribed velocity and temperatures at the boundaries. Results of simulations of a Couette flow, a shear wave decay and a natural convection problem are presented, in order to demonstrate the validity of the present method.

**Keywords:** *lattice Boltzmann, two distributions, Couette, Natural Convection, incompressible flow.*