



TUBO DE CHOQUE NUMÉRICO UTILIZANDO MÉTODO DE BOLTZMANN PARA REDES

Julian Machado Carboni

Universidade Federal de Santa Catarina – Florianópolis – Santa Catarina – Brasil
julian@lmpt.ufsc.br

Rodrigo Surmas

surmas@lmpt.ufsc.br

Paulo Cesar Philippi

philippi@lmpt.ufsc.br

Resumo: *O modelo de Boltzmann para redes é um modelo computacional baseado na teoria cinética para simulações de escoamentos de fluidos. Recentemente, a discretização das velocidades foi obtida de modo a conseguir o menor número de velocidades discretas para uma dada ordem de aproximação da distribuição de equilíbrio. Uma análise de Chapman-Enskog mostra que a distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann deve ser aproximada pela sua expansão em polinômios de Hermite de até terceira ordem a fim de obter as equações de Navier-Stokes. Desta forma obtém-se uma rede com dezessete velocidades. Se, além disso, a conservação da energia é requerida, alguns polinômios de quarta ordem devem ser mantidos na expansão da distribuição de equilíbrio, obtendo-se assim uma rede com vinte e cinco velocidades. O conjunto completo dos polinômios de Hermite de quarta ordem resulta em redes com trinta e sete velocidades. Neste trabalho essas redes são analisadas através do problema do tubo de choque, onde duas câmaras com diferentes pressões são separadas por uma membrana, a qual é retirada para o início da simulação. Os resultados encontrados estiveram de acordo com os analíticos e outros trabalhos.*

Palavras-chave: *tubo de choque, Lattice-Boltzman.*

1. INTRODUÇÃO

Os experimentos em tubos de choque são utilizados em estudos de fenômenos de curta duração em aerodinâmica, química ou física; além de serem empregados em estudos da teoria cinética dos gases. O aparato é composto de um duto liso com dois compartimentos divididos por uma fina membrana, nos quais impõe-se uma diferença de pressão. Retirando-se a fina membrana abruptamente, dá-se origem a duas ondas de choque, uma de compressão e outra de expansão viajando em direções opostas.

O *lattice Boltzmann method* (LBM) ou modelo de Boltzmann para redes (LBM) é uma técnica relativamente nova em simulação numérica, que tem sua principal aplicação em sistemas fluidos complexos como escoamento em meios porosos. O que atraiu interesse no ramo da física computacional. Contudo, o LBM possui certas dificuldades em lidar com problemas térmicos reais (escoamentos compressíveis), e aumento da velocidade local. Problemas esses que acabam acarretando em instabilidades numéricas.

Os resultados que aqui serão expostos consistem nos cálculos da velocidade de propagação das ondas de choque no meio fluido, e dos efeitos causados pelas ondas sobre a densidade, temperatura e pressão do fluido sobre o qual essa onda propaga.

2. MÉTODO DE BOLTZMANN PARA REDES

O método Boltzmann para redes (Y. H. Qian, D. d'Humières e P. Lallemand, 1992) é um método mesoscópico para a descrição de um sistema mecânico de partículas. Embora, historicamente, tenha sido originado de Autômatos Celulares, como o Lattice-Gas Automata (U. Frisch, B. Hasslacher e Y. Pomeau, 1986), recentemente foi mostrado (X. He and L. S. Luo, 1997) que o LBM pode ser considerado como uma forma discreta da equação de Boltzmann para gases diluídos. Seguindo a teoria cinética dos gases, a equação de Boltzmann é uma equação de evolução para a função de distribuição de partículas $f_i(x; t)$. Como a equação de Boltzmann, os modelos de Boltzmann para redes são formulados na escala mesoscópica, na qual a descrição do sistema não é feita diretamente a partir das partículas individuais, mas através da função distribuição de partículas $f_i(x; t)$, que representa o valor esperado do número de partículas com velocidade c_i no sítio x e no tempo t , onde $i = 0 \dots b$ representa o espaço discretizado em $b+1$ velocidades.

Devido ao efeito das colisões, a função distribuição de partículas, $f_i(x; t)$, é modificada em cada sítio da rede durante o intervalo de tempo Δt , obedecendo o modelo de colisão BGK (Bhatnagar, P. L.; Gross, E. P.; Krook, M, 1954) introduzido por Qian et al.(1992) e Chen et al.(1992). A equação de evolução com o operador BGK é dada pela Equação 1, onde τ e $f_i^{(eq)}$ são o tempo de relaxação e a distribuição de equilíbrio local de partículas, respectivamente. Sendo a relação de τ com a viscosidade(ν) estabelecida pela equação 2 (Philippi et al, 2006).

$$\partial_t f_i + c_i \cdot \nabla f = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{(eq)}) \quad (1)$$

$$\nu = RT(\tau - 0,5) \quad (2)$$

As propriedades macroscópicas locais como densidade ρ e quantidade de movimento ρu , e seus respectivos fluxos são expressos através dos momentos da função de distribuição. Dos primeiros momentos obtém-se (Equação 3, 4 e 5):

$$\int f dc = \sum_{i=0}^b f_i \quad (3)$$

$$\int f c_\alpha dc = \sum_{i=0}^b f_i c_{i,\alpha} \quad (4)$$

$$\int f c_\alpha c_\beta dc = \sum_{i=0}^b f_i c_{i,\alpha} c_{i,\beta} \quad (5)$$

Uma análise de Chapman-Enskog da equação com o operador BGK (Philippi et al, 2006) mostra que é necessário expandir até a segunda ordem dos polinômios de Hermite para recuperar a densidade. Para isso, em duas dimensões o espaço das velocidades é discretizado em nove direções (D2Q9). Para atingir a conservação da quantidade de movimento, necessita-se recuperar os polinômios até terceira ordem. Desta forma é necessário aumentar o número de velocidades discretas para 17.

Aumentando o número de velocidades para 25, consegue-se a preservação de alguns polinômios de quarta ordem, atingindo dessa maneira a conservação da energia (Equação 6). Aumentando ainda mais o número de velocidades discretas para 37, consegue-se recuperar todos os polinômios de Hermite de quarta ordem (Equação 7), recuperando também a equação da energia. Nesse trabalho essas redes serão analisadas quanto à conservação das propriedades macroscópicas citadas acima.

A discretização do espaço de velocidades pode ser visto em Philippi et al, 2006, onde se partindo da equação de Boltzmann no contínuo chega-se ao meio discreto utilizando polinômios de Hermite. Atingindo redes como D2Q9, D2V17, D2V25(W1), D2V25(W6) e D2V37, Philippi mostra uma forma em que o espaço de velocidades pode ser discretizado.

$$\int f c_{\alpha} c_{\beta} c_{\gamma} c_{\delta} dc = \sum_{i=0}^b f_i c_{i,\alpha} c_{i,\beta} c_{i,\gamma} c_{i,\delta} \quad (6)$$

$$\int f c_{\alpha}^2 c_{\gamma} c_{\delta} dc = \sum_{i=0}^b f_i c_{i,\alpha}^2 c_{i,\beta} c_{i,\gamma} \quad (7)$$

Como também pode ser visto em Philippi et al (2006), definiu-se T_0 como uma temperatura de referência da rede (constante) e T como temperatura, dessa forma o desvio de temperatura é dado então como Θ Equação 8, onde:

$$\Theta = \frac{RT}{RT_0} - 1 \quad (8)$$

3. TUBO DE CHOQUE

Os tubos de choque são usados para estudar a dinâmica do choque dos gases, testes de equilíbrios e estudos cinéticos.

Também são usados em estudos do crescimento da camada limite térmica e reflexão de ondas de choque. Pode-se utilizar o escoamento induzido do fluido imediatamente após a onda de compressão em testes aerodinâmicos como se fosse um túnel de vento, permitindo o estudo de escoamentos de fluidos a temperaturas e pressões que seriam difíceis de serem alcançadas em túneis de vento.

O tubo de choque funciona com dois compartimentos em um duto liso separados inicialmente por uma membrana fina. Nessas câmaras, como condição inicial, é imposta uma diferença de pressão (Fig. 1). Nesse experimento a membrana é retirada repentinamente permitindo que o fluido de maior pressão entre em contato com o de menor pressão dando origem a duas ondas de choque. O rompimento da membrana gera uma onda de compressão na direção do fluido de baixa pressão e uma de expansão da direção contrária.

A velocidade de propagação das duas ondas de choque formadas será diferente, dado que a velocidade do som na rede depende da temperatura do fluido. Contudo, quando existir uma variação infinitesimal de pressões entre as câmaras, ambas as ondas irão propagar na velocidade do som (C_s).



Figura 1: Tubo de choque.

4. TUBO DE CHOQUE (SIMULAÇÃO NUMÉRICA)

Para resolver o tubo de choque numericamente foi empregada uma rede de 20.000 x 1 sítios, ou seja, o meio discreto constitui-se de 20.000 sítios na direção 'x' e 1 sítio na direção 'y'. O emprego de uma condição de contorno periódica em todas as fronteiras fez com que a simulação fosse basicamente 1D, apesar de estar sendo utilizada uma rede 2D permitindo a avaliação da rede. Na figura abaixo (Figura 2), podem ser observadas as velocidades discretizadas:

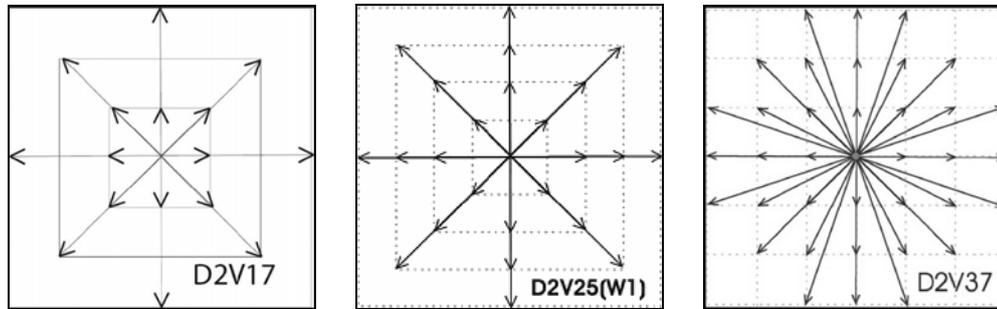


Figura 2: Redes D2V17, D2V25(W1) e D2V37.

A fim de impor a condição inicial de um degrau de pressão, foi conferida a metade da rede um valor maior de densidade, estabelecendo assim as condições iniciais (passo de tempo $t=0$). Conforme os passos de tempo vão progredindo, as duas ondas vão propagando em direção as extremidades do tubo.

5. CÁLCULO DOS PATAMARES DAS VARIÁVEIS

Os valores de temperatura (T), velocidade(V), densidade(ρ) e pressão(p) nas zonas 2 e 3 (Figura 3), por onde já passaram as ondas de choque podem ser calculados analiticamente a partir das equações 9, 10, 11 e 12. A zona 1 representa a região jusante da onda de compressão, zona 2 a região montante da onda de compressão. Zona 3, montante da onda de expansão e 4 representa a região jusante da onda de expansão.

$$P = \rho RT \quad (9)$$

$$V_1 \rho_1 = V_2 \rho_2 \quad (10)$$

$$p_1 + \rho_1 V_1^2 = p_2 + \rho_2 V_2^2 \quad (11)$$

$$h_1 + V_1^2 / 2 = h_2 + V_2^2 / 2 \quad (12)$$

Na figura 3 são mostrados o resultado analítico e o numérico após 50 passos de tempo para a rede D2V37. Os resultados para: velocidade, temperatura, densidade e pressão, referentes as zonas 2 e 3, calculados a partir das equações acima foram comparados com os resultados das simulações numéricas realizadas encontrando erros da ordem 10^{-4} , demonstrando bom desempenho do modelos para encontrar os patamares.

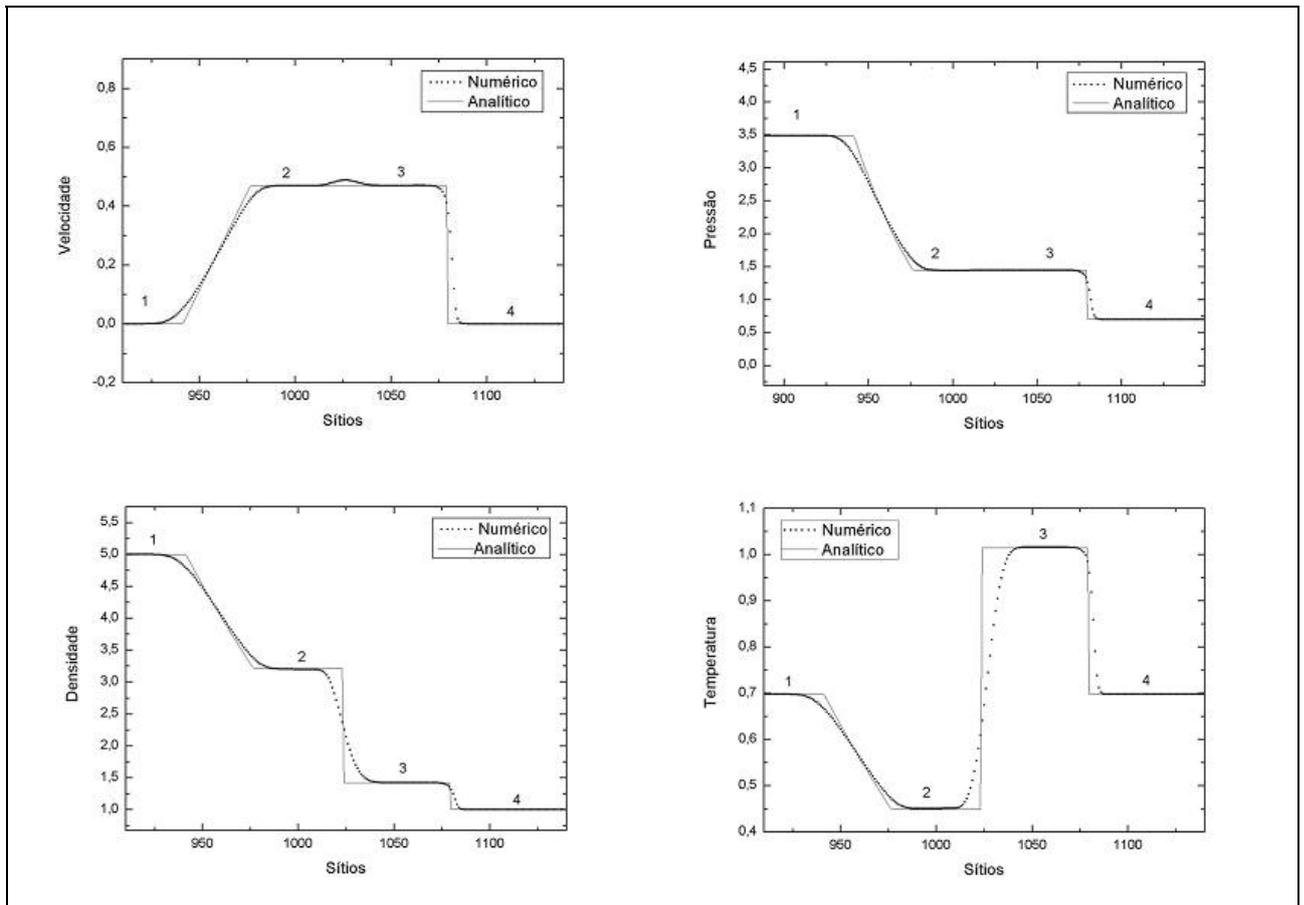


Figura 3: Variáveis.

6. VELOCIDADE DE PROPAGAÇÃO DAS ONDAS DE CHOQUE

Observando as zonas 1 e 2 da Figura 3, com o intuito de calcular a velocidade da onda de compressão, a propagação da onda será analisada em dois referenciais.

O primeiro (Figura 4) tem a zona 2 como referencial, e o segundo (Figura 5), tem a onda de compressão como referencial. Onde:

V_w = velocidade da onda.

W = velocidade do fluido na jusante da onda de choque.

$W - V_2$ = velocidade do fluido na montante da onda de choque.

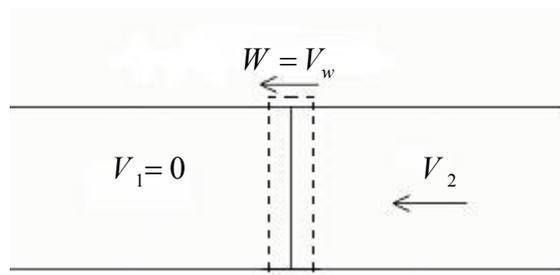


Figura 4: Referencial 1

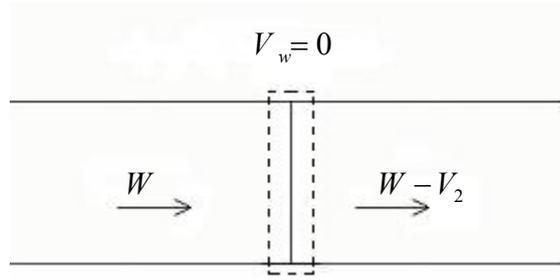


Figura 5. Referencial 2.

Aplicando a equação da continuidade (Equação 10) no volume de controle mostrado na figura 5.

$$W = \frac{V_2 \rho_2}{(\rho_2 - \rho_1)} \quad (13)$$

Voltando ao primeiro referencial, onde $W = V_w$, tem-se a equação da velocidade da onda:

$$V_w = \frac{V_2 \rho_2}{(\rho_2 - \rho_1)} \quad (14)$$

De modo similar, nas zonas 3 e 4, a velocidade da onda de compressão pode ser obtida.

$$V_w = \frac{V_3 \rho_3}{(\rho_3 - \rho_4)} \quad (15)$$

Voltando as equações 11 e 12:

$$p_1 + \rho_1 W^2 = p_2 + \rho_2 (W - V_2) \quad (16)$$

$$h_1 + W^2/2 = h_2 + (W - V_2)^2/2 \quad (17)$$

Em um gás ideal a velocidade do som é dada por:

$$c_s = \sqrt{\gamma RT} \quad (18)$$

Através de algumas manipulações algébricas das equações 16, 17 e 18; chega-se a uma relação entre a velocidade de propagação da onda e a velocidade do som no fluido (Equação 19).

$$V_w = C_s \sqrt{\frac{\gamma + 1}{2\gamma} \left(\frac{p_2}{p_1} - 1 \right) + 1} \quad (19)$$

As simulações foram realizadas para as redes D2V17, D2V25(W6) e D2V37 com valores iniciais de Θ de 0,25 até -0,25. Os resultados das simulações numéricas se mostram de acordo com os resultados analíticos. No entanto, o modelo D2V17 apresentou instabilidade ao simular com um valor de Θ inicial = -0,25 (Diogo Siebert, 2007). Por outro lado, essa instabilidade não apareceu nos modelos que recuperam momentos de equilíbrio de quarta ordem.

Sendo assim, pelos resultados encontrados, apesar do modelo de terceira ordem ter se mostrado mais instável que os de quarta ordem, os modelos utilizados mostraram bons resultados no cálculo da velocidade da onda de choque com erros da ordem 10^{-6} .

7. DIFUSIVIDADE TÉRMICA

Durante a análise do gráfico da velocidade (Figura 3), observou-se uma perturbação entre as zonas 2 e 3 como pode ser melhor visualizado na Figura 6.

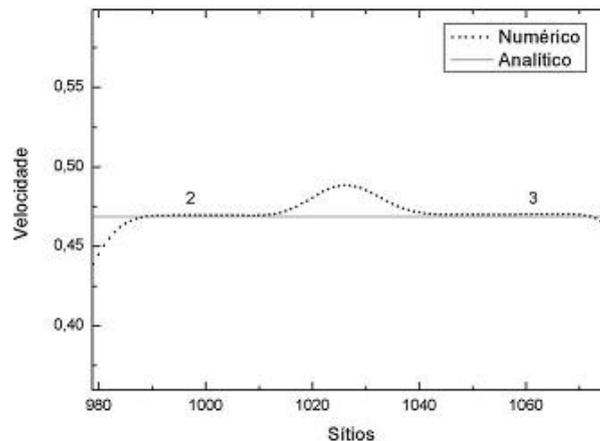


Figura 6: Velocidade $t = 50$, rede D2V37.

Essa perturbação no gráfico da velocidade deve-se ao fato de ocorrer nesse local um fluxo de calor entre as zonas 2 e 3 (difusividade térmica) alterando o valor da temperatura como pode ser observado no gráfico da Figura 7. Para que a pressão seja equilibrada, a densidade na zona 3 próxima a essa região começa a diminuir; enquanto que a densidade na zona 2 próxima ao local em questão começa a aumentar, correndo um fluxo de massa da zona 3 para a zona 2 nessa região. Isso causa a perturbação observada no gráfico da velocidade Figura 7.

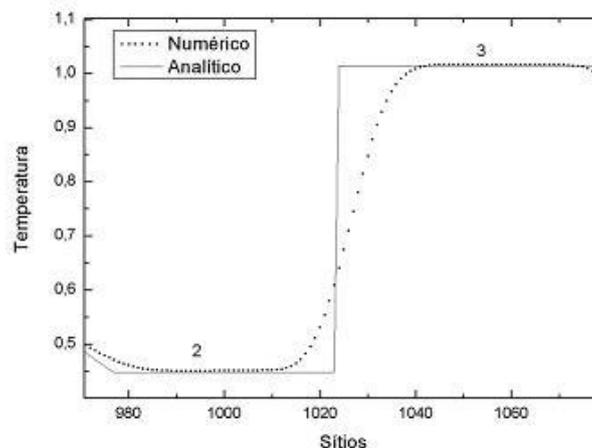


Figura 7: Temperatura $t = 50$, rede D2V37.

Devido à natureza do método (Philippi et al, 2006), essa difusividade térmica não pode ser retirada como em CFD. Dessa forma, com o intuito de comprovar a existência dessa difusividade física e não numérica, calculou-se a difusividade térmica (α) entre as zonas 2 e 3 (Figura 7) utilizando a Equação 20 de transferência de calor.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \quad (20)$$

Para resolver a equação diferencial (Equação 20), foram analisados três valores de temperaturas (Figura 7), onde:

t: corresponde ao passo de tempo da simulação;

x: corresponde à posição (sítio), sendo a posição de Tw a referência (posição = 0) .

Tw: corresponde ao valor de temperatura média entre as zonas 2 e 3, o qual corresponde ao valor da temperatura de referência da rede;

To: corresponde ao valor de temperatura da zona 3 sem sofrer efeitos de difusão térmica;

T: corresponde a um ponto da zona 3 que sofreu os efeitos da difusão térmica.

A comparação dos resultados de difusividade térmica numéricos com os resultados analíticos para diferentes valores de θ inicial, podem ser visualizados nas Tabelas 1 à 3 abaixo.

Rede	Θ_{ini}	RT_ini	Difusividade		Erro %
			Analítica	Numérica	
D2V17	0	0.37025186	0.18512593	0.186279	0.622857101
D2V17	0.25	0.462815	0.2314075	0.149066	35.58290029
D2V17	-0.25	0.277689	0.1388445	#	#

Tabela 1: difusividade térmica, rede D2V17.

Rede	Θ_{ini}	RT_ini	Difusividade		Erro %
			Analítica	Numérica	
D2V25(w6)	0	0.864356777	0.432178388	0.432325	0.033923846
D2V25(w6)	0.25	1.080445971	0.540223	0.537746	0.458514354
D2V25(w6)	-0.25	0.648267583	0.324134	0.323614	0.160427478

Tabela 2: difusividade térmica, rede D2V25(W6).

Rede	Θ_{ini}	RT_ini	Difusividade		Erro %
			Analítica	Numérica	
D2V37	0	0.697953322	0.348976661	0.349514	0.153975624
D2V37	0.25	0.872442	0.436221	0.436346	0.0286552
D2V37	-0.25	0.523465	0.2617325	0.262519	0.300497645

Tabela 3: difusividade térmica, rede D2V17.

Como pode ser observado acima, as redes de quarta ordem se mostraram melhores que a de terceira ordem. Na Tabela 1, além da instabilidade em $\Theta_{ini} = -0,25$, podem ser vistos erros de até 35% no cálculo da difusividade térmica na rede D2V17. Por outro lado, as redes de quarta ordem mostraram bons resultados para difusividade térmica, com erros na casa de 0.1%. Sendo esses erros justificados pelas simplificações feitas na escolha das condições de contorno

8. CONCLUSÕES

De acordo com os resultados analíticos, a modelação numérica de tubos de choque utilizando um modelo térmico de Boltzmann para redes mostrou-se bastante adequado na simulação de ondas de choque. Também mostrou que é necessária a conservação dos momentos de até quarta ordem

para realizar simulações térmicas, pois com modelos de até terceira ordem ocorrem instabilidades e erros expressivos. Também demonstrou que tanto a distribuição de equilíbrio da rede D2V25(W6) como a distribuição do modelo D2V37 mostraram-se eficazes na simulação do tubo de choque utilizando LBM.

Como pôde ser visto nas tabelas 2 e 3, os erros encontrados foram muito baixos; os quais não comprometeriam uma análise do fenômeno físico baseando-se nos resultados simulados computacionalmente. Dessa forma, para faixas de variáveis compatíveis com as limitações do método de Boltzmann para redes (Philippi et al, 2006), é possível analisar os efeitos de ondas de choque, com o modelo numérico aqui mostrado, conseguindo bons resultados.

9. AGRADECIMENTOS

O autor gostaria de agradecer a CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), FINEP (Financiadora de Estudos e Projetos), ANP(Agência Nacional do Petróleo) e ao LMPT (Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas).

10. REFERÊNCIAS

- Bhatnagar, P. L.; Gross, E. P.; Krook, M. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 94, n. 3, p. 511–525, May 1954.
- Diogo Siebert. “Análise de formas discretas da equação de Boltzmann para problemas térmicos bi-dimensionais”. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.
- H. Chen, S. Chen, and W. H. Matthaeus. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. *Physical Review A*, 45(8):R5339_5342, 1992.
- Mathematical Methods in Kinetic Theory / Carlos Cercignani – 2nd ed. 1990.
- Modern Compressible Flow: with historical perspective / John D. Anderson – 3rd ed. 2003.
- Paulo C. Philippi et al. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. *PHYSICAL REVIEW E* 73, 056702 2006.
- U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau. Lattice-gas automata for the navier-stokes equations. *Physical Review Letters*, 56(14):1505_1508, 1986.
- X. He and L. S. Luo. Theory of lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*, 56(6):6811_6817, 1997.
- Y. H. Qian, D. d’Humières, and P. Lallemand. Lattice BGK models for Navier-Stokes equations. *Europhy-sics Letters*, 17(6):479_484, 1992.

NUMERICAL SHOCK TUBE WITH LATTICE BOLTZMANN METHOD

Julian Machado Carboni

Federal University of Santa Catarina – Florianópolis – Santa Catarina - Brazil
julian@lmpt.ufsc.br

Rodrigo Surmas

Federal University of Santa Catarina – Florianópolis – Santa Catarina - Brazil
surmas@lmpt.ufsc.br

Paulo Cesar Philippi

Federal University of Santa Catarina – Florianópolis – Santa Catarina - Brazil
philippui@lmpt.ufsc.br

Abstract: Abstract. *The lattice Boltzmann model is a kinetic theory based computational model for fluid flow simulations. Recently, the velocity discretization step was performed in order to obtain the minimal discrete velocity set for a given order of approximation of the equilibrium distribution. A Chapman-Enskog analysis shows that the Maxwell-Boltzmann equilibrium distribution must be approximated in Hermite polynomials expansions up to the third order for the purpose of obtain the Navier-Stokes equations, defining a lattice with seventeen velocities. If, in addition, the energy equation must be retained, some fourth order polynomials must be kept in the Hermite expansion of the equilibrium distribution function, and a lattice with twenty-five velocities is obtained. The complete set of the Hermite polynomials in the fourth order defines lattices with thirty-seven velocities. In this work these lattices were analysed in the shock tube problem, where two chambers with different temperatures or densities are separated by a membrane, which bursts at the beginning of the simulatio). The results were in very good agreement with analytical results and other works.*

Keywords: *shock tube, Lattice Boltzmann.*