

ALÉM DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES: EQUAÇÃO DISCRETA DE BOLTZMANN PARA NÚMERO DE KNUDSEN FINITO

Amaury Rainho Neto

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

Luiz Adolfo Hegele Junior

hegele@lmpt.ufsc.br

Resumo: O método de Boltzmann para redes tem se mostrado muito eficiente para a solução das equações da hidrodinâmica. Os diversos modelos são obtidos através da discretização da equação de Boltzmann, em conjunto com a adoção de um modelo cinético para o operador de colisão. As variáveis macroscópicas, como velocidade e pressão (e temperatura, para modelos térmicos), são obtidas através de médias da função distribuição de partículas. Neste trabalho, utiliza-se um operador do tipo BGK para o processo de colisão. A função distribuição de equilíbrio utilizada é obtida através de um processo de quadratura da distribuição de equilíbrio do contínuo. É estudado o problema de difusão de uma onda senoidal de velocidade para vários números de Knudsen, em modelos com diversos conjuntos de velocidades: 9, 17, 21 e 25. Observa-se que o coeficiente de viscosidade varia fortemente se a condição de Knudsen reduzido ($Kn \ll 1$) não for obedecida.

Palavras-chave: lattice Boltzmann, operador BGK, número de Knudsen.

1. INTRODUÇÃO

A solução de escoamentos, que envolvam a determinação de variáveis macroscópicas – velocidade, pressão e temperatura – é um dos principais problemas da engenharia contemporânea. Muitas vezes a solução analítica não é viável, não é trivial, ou ambos. Para contornar este empecilho, métodos numéricos de solução das equações de Navier-Stokes são uma opção.

A maioria dos métodos tenta resolver diretamente as equações da hidrodinâmica. O método de Boltzmann para redes, por outro lado, se utiliza da teoria cinética para obter a descrição da dinâmica dos fluidos.

O método de Boltzmann para redes (MacNamara & Zanetti, 1988) vem se tornando uma ferramenta extremamente útil para simulações em geometrias complexas, principalmente para escoamentos em microcanais, meio porosos e escoamentos multifásicos.

A equação de evolução do método busca a solução da distribuição de partículas. Para tanto, necessita-se também de uma distribuição de partículas no equilíbrio para um dado conjunto de variáveis macroscópicas: densidade, velocidade (e temperatura, para modelos térmicos). Tal distribuição é obtida através de um processo de quadratura da distribuição de equilíbrio do contínuo, a distribuição de Maxwell-Boltzmann. Quanto melhor for a discretização no processo de obtenção da função equilíbrio, maior será a precisão da solução.

Escoamentos isotérmicos incompressíveis regidos pelas equações clássicas da hidrodinâmica são caracterizados unicamente pelo número de Reynolds. Quando o livre caminho médio ℓ das moléculas do fluido em questão torna-se comparável em relação a um comprimento característico macroscópico L do problema, ou seja, quando o número de Knudsen ($Kn = \ell/L$) não é mais desprezível, as equações de Navier-Stokes não mais conseguem descrever adequadamente o escoamento. As equações de Grad, ou Método dos Treze Momentos, são uma tentativa de descrição desse tipo de regime. Estas equações, no entanto, são de difícil tratamento e tem a sua aplicação bastante limitada. Deste modo, a equação de Boltzmann na rede surge como um método alternativo para solucionar este tipo de problema.

Neste trabalho, procura-se descrever um caso simples de escoamento a número de Knudsen não nulo através da equação de Boltzmann na rede. Diversas classes de modelos são estudadas de forma a capturar a física do problema. Dentro dessas classes, diversos parâmetros são alterados de modo a verificar a consistência da solução.

2. MODELO DE BOLTZMANN PARA REDES DISCRETAS

O modelo de Boltzmann para redes (LBM) consiste de um método de solução de diferenças finitas para a equação de Boltzmann, conjuntamente com a adoção de um modelo cinético para o operador de colisão. No LBM as partículas encontram-se distribuídas nos vértices de uma rede discretizada e, nesse caso, regular. As partículas são, a cada passo, reordenadas através de dois processos: i) colisão, conservando o número de partículas e a quantidade de movimento de cada sítio (e a energia, para modelos térmicos); e ii) propagação, que é a mudança de posição das partículas na rede segundo a direção de sua velocidade. Este processo pode ser representado pela seguinte equação de evolução,

$$f_i(X + c_i \Delta T, T + \Delta T) - f_i(X, T) = \Omega_i, \quad (1)$$

onde f_i é a função distribuição de partículas, que indica o valor esperado do numero de partículas em uma posição X , no tempo T ; c_i representa o vetor velocidade, e Ω_i é o operador de colisão.

A interação entre as partículas que compõe o fluido é representada pelo operador de colisão. Um operador muito utilizado devido principalmente a sua simplicidade e eficiência foi proposto por Bhatnagar, Gross & Krook (BGK) em 1951 e possui a seguinte forma:

$$\Omega_i = \frac{f_i^{eq} - f_i}{\tau}, \quad (2)$$

onde τ é o tempo necessário para que as partículas sejam levadas ao equilíbrio e está relacionado à viscosidade do fluido e f_i^{eq} é a função distribuição de equilíbrio

Uma escolha adequada de f_i^{eq} , que pode ser encontrada em Philippi et al. (2006) leva a um comportamento macroscópico descrito pelas equações da hidrodinâmica:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0, \quad (3)$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = \partial_\alpha p + \nu \partial_\beta \partial_\beta (\rho u_\alpha). \quad (4)$$

onde as variáveis macroscópicas, densidade ρ e quantidade de movimento ρu são definidas da seguinte maneira

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (5)$$

$$\rho u = \sum_i f_i c_i . \tag{6}$$

É essencial que os primeiros momentos, ou os de mais baixa ordem, da distribuição f_i^{eq} sejam iguais ao da distribuição de Maxwell-Boltzmann. A conservação de momentos até 3ª ordem na velocidade – ou seja, u^3 – da distribuição de equilíbrio tem influência direta na dinâmica macroscópica. Philippi et al.(2006) obtiveram modelos de diversas ordens através do método das abscissas prescritas. Modelos de segunda ordem(D2Q9), terceira ordem (D2V17) e quarta ordem (não completa) (D2V25) são mostrados nas figuras abaixo:

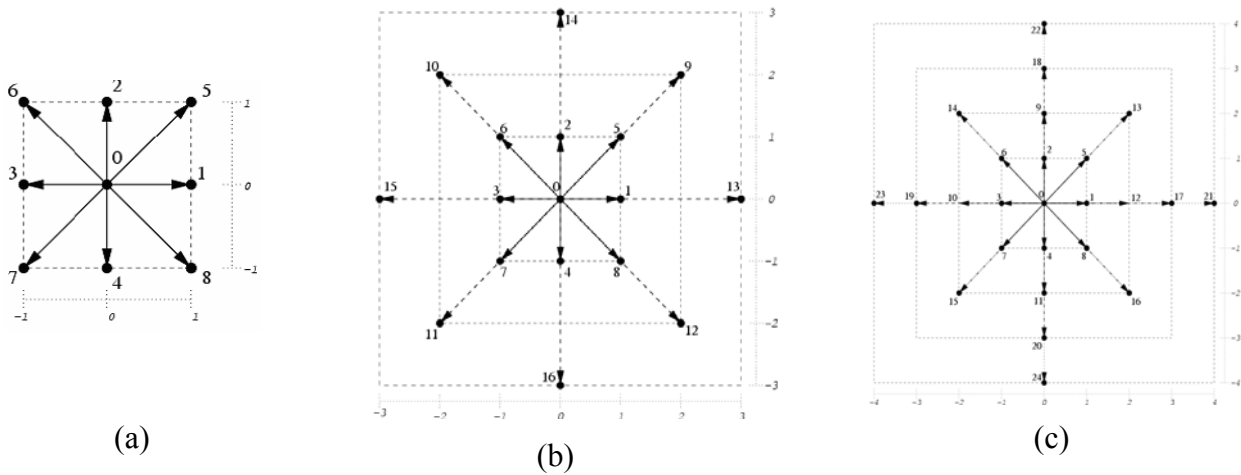


Figura 1. Diversas redes. a) D2Q9, b) D2V17, c) D2V25

Como exemplo, a distribuição de equilíbrio de segunda ordem, para a rede D2Q9, pode ser assim escrita

$$f_i^{eq,2} = \rho \omega_i [1 + a^2 c_{i,\alpha} u_\alpha + \frac{a^4}{2} (c_{i,\alpha} u_\alpha)^2 - \frac{a^2}{2} (u_\alpha u_\alpha)] \tag{7}$$

É importante frisar a presença do fator de escala a na equação, que tem por função transformar as variáveis de rede em variáveis físicas. ω_i são constantes de cada vetor velocidade denominados pesos, escolhidos de maneira a garantir a isotropia da rede. Por questões de simetria, os pesos correspondentes a vetores velocidades que podem ser obtidos por rotação ou reflexão de outros vetores devem ser iguais.

Tanto o fator de escala quanto os pesos diferem de um modelo de rede para outro, além do que, em modelos de ordens superiores a função distribuição de equilíbrio é expandida através da adição dos termos referentes à ordem de momentos que estão sendo conservados.

3. RESULTADOS – DECAIMENTO DE ONDA DE CISALHAMENTO

O problema de decaimento de onda de cisalhamento pode ser entendido como um decaimento de energia cinética devido a dissipação viscosa. Nele, uma onda senoidal (Fig. 2) é formada pelos vetores velocidades através da relação:

$$u(x, t = 0) = u_0 \sin(kx) , \tag{8}$$

onde k é o número de onda ($k \equiv 2\pi/L$).

A solução é dada por

$$u = u_0 e^{-vk^2 t}, \quad (9)$$

onde v é a viscosidade cinemática do fluido.

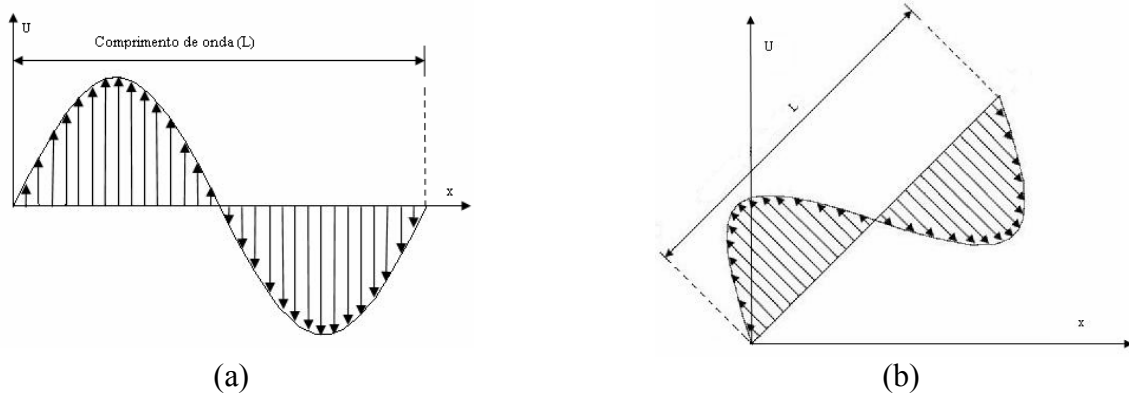


Figura 2: Ondas senoidal: a) Normal , b) Diagonalizada

Apesar de simples, o problema é uma importante ferramenta para a análise de métodos numéricos. Um simples exemplo mostra que o decaimento de onda não deve depender da orientação dos sítios, no entanto, isso não é observado em algumas redes devido a anisotropia.

Dois simulações, similares às sugeridas por Zang et al. (2006), são propostas. Na primeira simulação, uma onda senoidal de comprimento (L) 128 é simulada em uma malha 128x128. No segundo caso, é feita uma reorientação da onda senoidal, rotacionando-a em $\frac{\pi}{4}$ rad, e a malha passar a ter uma dimensão 181x181. A velocidade inicial u_0 é definida como 0,01 n.u. (unidades de rede), a fim de garantir um número de Mach baixo. Malhas de outros tamanhos também foram testadas e os resultados se mostraram inalterados. Deste modo, consideramos os resultados apenas para a malha de 128 sítios.

Para a resolução do problema diferentes redes foram utilizadas: a rede D2Q9, que conserva somente momentos até segunda ordem; as redes D2V17 E D2V21 que conservam momentos de terceira ordem; e a rede D2V25, uma rede térmica que conserva alguns momentos de até quarta ordem. Simulações rotacionadas estão com a indicação “diag” nas figuras.

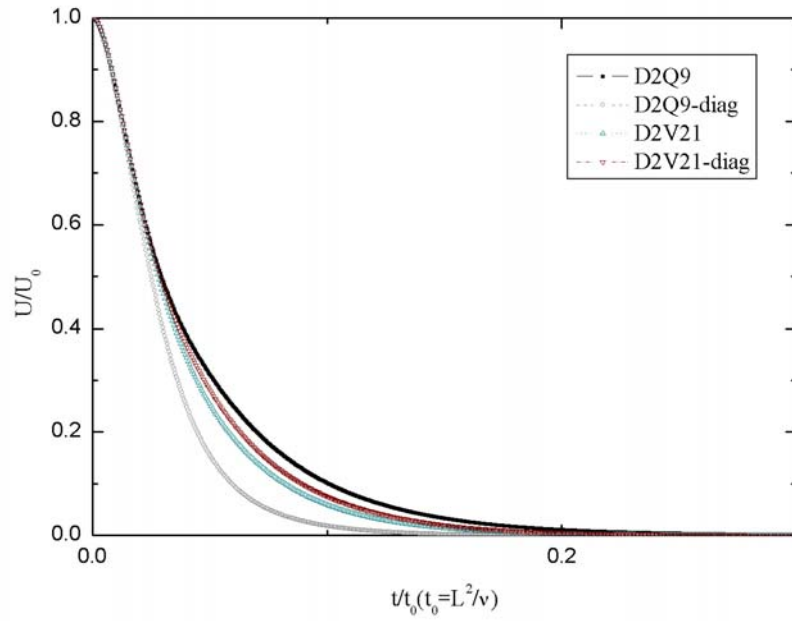


Figura 3: Decaimento de onda de cisalhamento em modelos D2Q9 e D2V21 a número de Knudsen igual a 0,2.

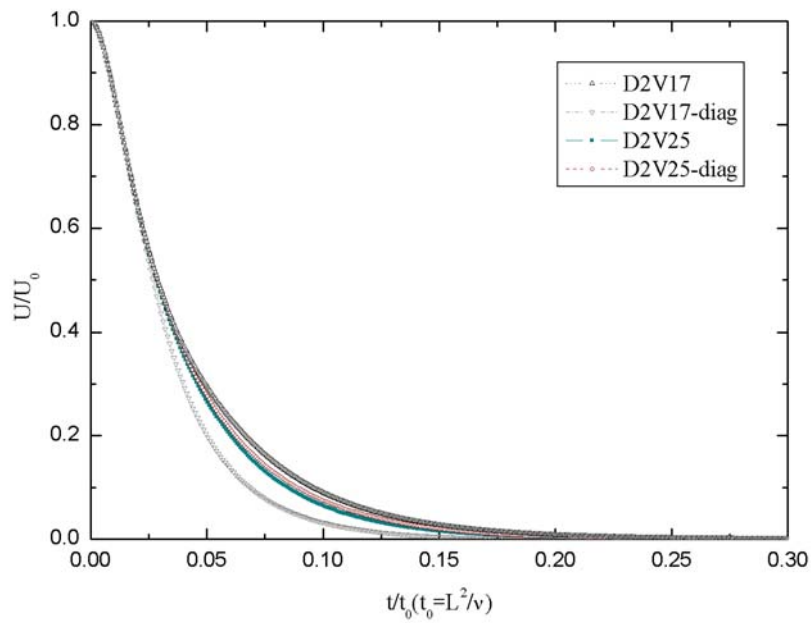


Figura 4: Decaimento de onda de cisalhamento em modelos D2V17 e D2V25 a número de Knudsen igual a 0,2.

Para os modelos de Boltzmann na rede, o número de Knudsen é definido como $Kn=2\tau c_s/L$, em que c_s é a velocidade do som na rede. Nas figuras 3 e 4 são apresentados o decaimento de onda cisalhante com $Kn = 0,2$, onde $\nu = c_s^2(\tau - 1/2)$ é a viscosidade cinemática do fluido. Nota-se que, enquanto as taxas de decaimento nas redes D2V29 e D2V21 mantêm-se praticamente iguais nas redes rotacionadas, as taxas de decaimento nas redes D2Q9 e D2V17 diferem sensivelmente de suas similares diagonalizadas. A razão para isso está na conservação dos momentos da função distribuição de partículas no equilíbrio. Momentos de ordens superiores contêm anisotropia que se refletem diretamente nos resultados das simulações. Duas ordens de momentos (D2Q9) garantem apenas a recuperação das equações hidrodinâmicas de Navier-Stokes; em modelos que conservam momentos de ordem maiores que dois, a anisotropia dos momentos de ordem superiores atua de forma bem menos acentuada, não alterando a isotropia da rede. No entanto, a rede D2V17, apesar de conservar momentos de terceira ordem, como o modelo D2V21, não possui isotropia em um número de Knudsen igual a 0,2; devido ao fato de o modelo D2V21 possuir a variável fator de escala livre, podendo assim alterar toda a distribuição de pesos na rede e, eventualmente, otimizar o modelo. Zang et al. também verificaram uma anisotropia na rede D2Q9 além do modelo D2Q21, e propuseram a eliminação de tal através de uma regularização da rede. No modelo proposto por Philippi et al., a rede D2V21 tem sua isotropia garantida mesmo sem um processo de regularização.

O número de Knudsen tem uma relação direta com a manutenção da isotropia da rede. Quanto maior o número de Knudsen, maior a dependência de momentos de ordens superiores na rede. Aumentando o Knudsen, verifica-se que até o modelo D2V25, que conserva momentos de quarta ordem, apresenta anisotropia. A faixa de transição de Knudsen de um comportamento isotrópico para um anisotrópico varia de acordo com o modelo, sendo, por ordem crescente de nosso estudo, $D2Q9 < D2V17 < D2V21 < D2V25$.

Ao se traçar um gráfico semi-log velocidade *versus* tempo a diferentes números de Knudsen, mantendo-se $Kn \ll 1$, as inclinações das retas deveriam ser *iguais*. Entretanto, quando o número de Knudsen aumenta, as equações que regem o fenômeno não são mais as da hidrodinâmica. Essas equações – Burnett e super-Burnett – não apresentam coeficientes analíticos de viscosidade, mas seu efeito pode ser observado nas figuras 5-8. Ou seja, adimensionalizando a velocidade e o tempo na forma proposta nas figuras 3 e 4, as retas a números de Knudsen diferentes deveriam ter a mesma inclinação. No entanto, como regra geral, isto é válido somente para $Kn < 0,1$. Conforme visto nas figuras 5-8, a viscosidade aparente difere da teórica em valores de $Kn > 0,1$. Reforçando, o comportamento e as propriedades não são agora afetados tão e somente pelas equações de Navier-Stokes.

Apesar de as equações de Navier-Stokes não estarem mais regendo o escoamento, era esperado a ocorrência de resultados iguais para as diferentes redes a números de Knudsen maiores que 0,1. No entanto, analisando as figuras 5-8, conclui-se que os resultados são dependentes do modelo de rede, principalmente a números de Knudsen onde haja oscilações no decaimento de onda senoidal. Verifica-se até uma estabilização dos resultados entre as redes D2V21 e D2V25 a números de Knudsen inferiores a 0,4, porém, os resultados passam a divergir um pouco a um número de Knudsen 0,8, onde estão presentes oscilações. Os resultados obtidos sugerem uma nova etapa de estudos, com finalidade de implementar modelos de redes diferentes afim de verificar a quantidade de momentos que devem ser conservados para que a altos Knudsen não haja mais uma discrepância entre os resultados dos modelos.

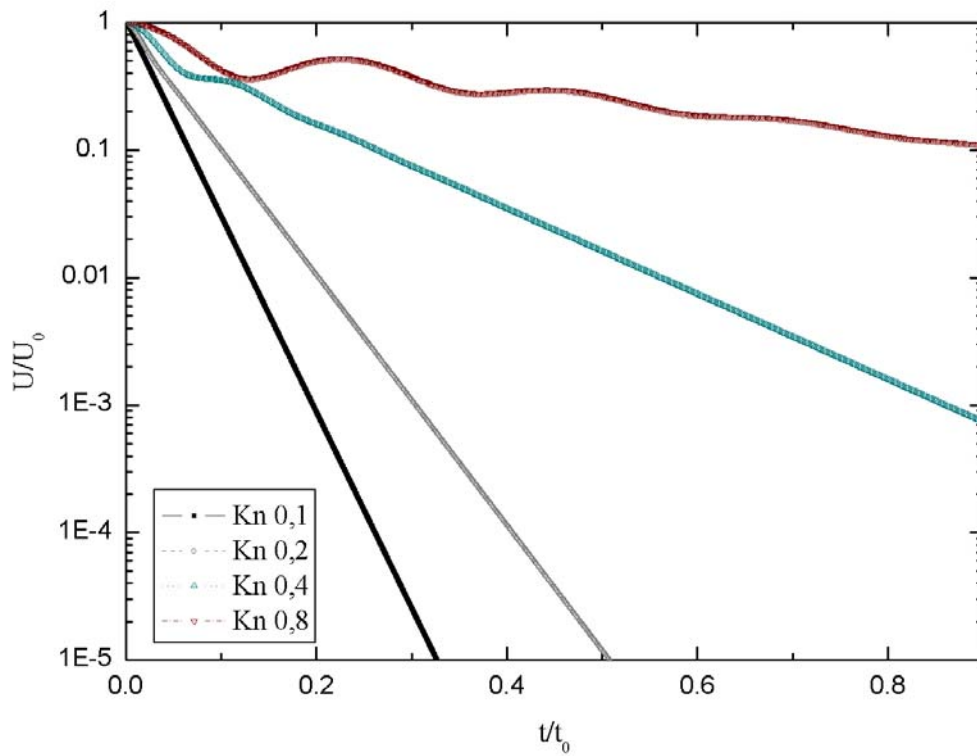


Figura 5: Decaimento de onda de cisalhamento ($Kn \geq 0,1$) em rede D2Q9

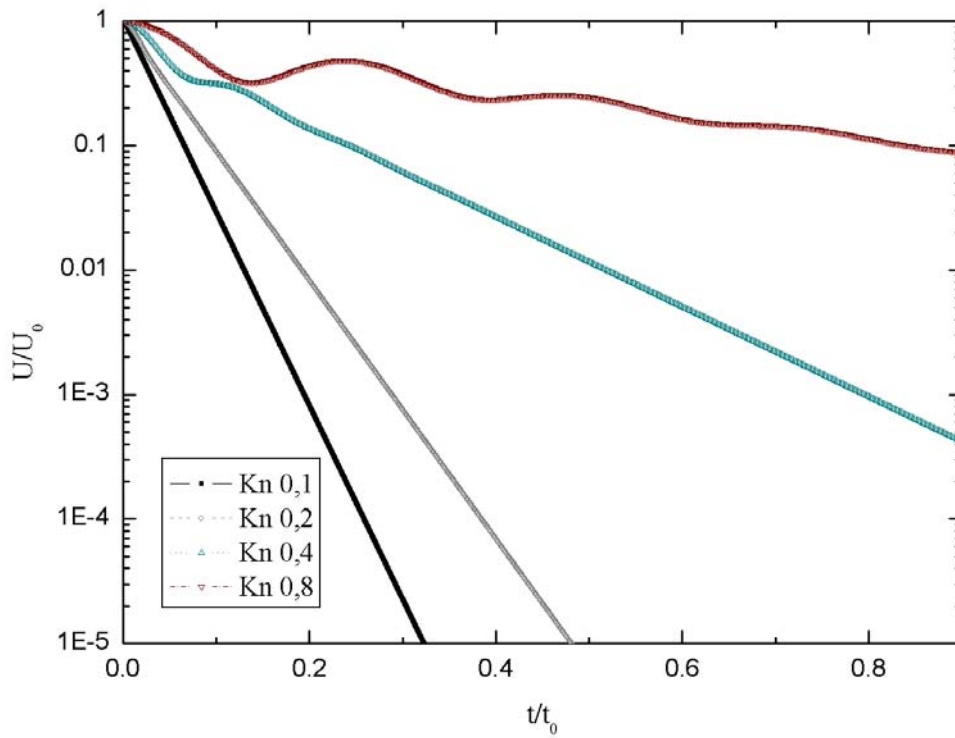


Figura 6: Decaimento de onda de cisalhamento ($Kn \geq 0,1$) em rede D2V17.

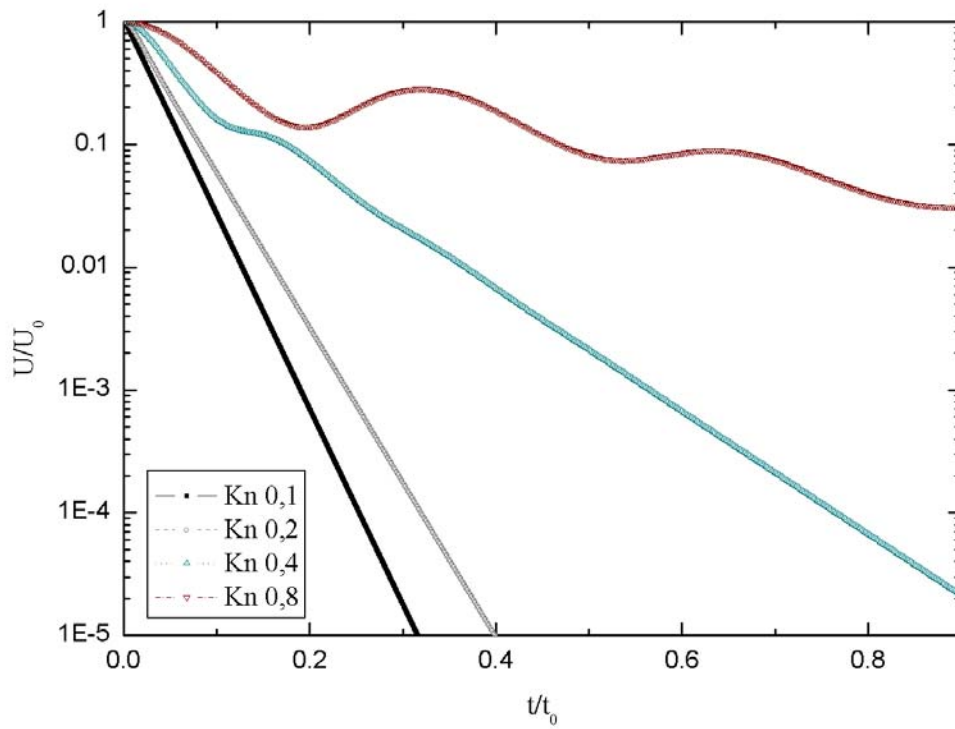


Figura 7: Decaimento de onda de cisalhamento ($Kn \geq 0,1$) em rede D2V21.

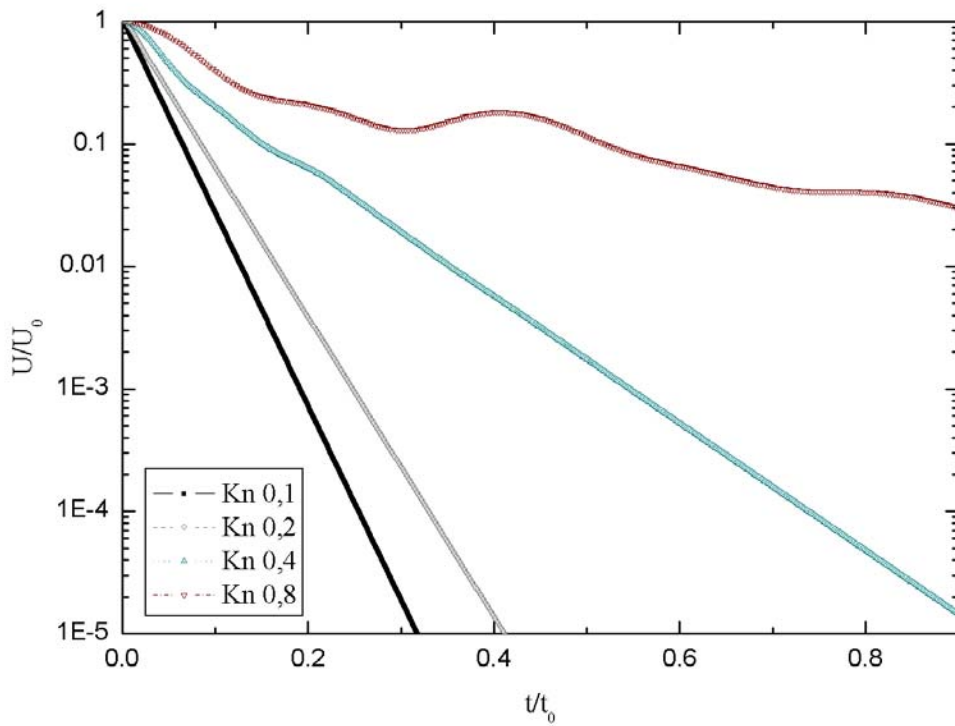


Figura 8: Decaimento de onda de cisalhamento ($Kn \geq 0,1$) em rede D2V25.

4. REFERÊNCIAS

- Bhatnagar, P.L., Gross, E.P. and Krook, M., 1954, “A model for collision process in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component system ”, American Physical Society, Vol. 94, pp 511-525.
- McNamara G. G. and Zanetti G., 1988, “Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata”, Physical Review Letters, Vol. 61, pap 2332-2335.
- Philippi P. C., Hegele L. A. J., dos Santos L. O. E. and Surmas R., 2006, “ From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models” , Physical Review E, Vol. 73, 056702.
- Zangh R., Shan X. and Chen H., 2006, “Efficient kinetic method for fluid simulation beyond the Navier-Stokes equation”, Physical Review E, Vol. 74, 046703.

BEYOND NAVIER-STOKES EQUATIONS: LATTICE-BOLTZMANN EQUATION FOR FINITE KNUDSEN NUMBER

Amaury Rainho Neto

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

Luiz Adolfo Hegele Junior

hegele@lmpt.ufsc.br

Abstract: *The lattice Boltzmann method (LBM) has been shown much of its efficiency in solving the macroscopic hydrodynamic equations for complex flows. Several LBM can be obtained through the discretization of the Boltzmann equation, with an additional adoption of a kinetic model for the collision operator. The macroscopic variables, such as velocity and pressure (and temperature for thermal models) are obtained averaging the particle distribution function. In this paper we use a BGK model for the collision process. The equilibrium distribution function is obtained through a quadrature process from the continuous equilibrium distribution, the Maxwell-Boltzmann distribution. The diffusion of a sinusoidal wave in the velocity is studied in detail for a wide range of Knudsen numbers, for various LBM, with a different number of velocities: 9, 17, 21 e 25 (in two dimensions). One observes that the viscosity coefficient has a strong dependency if the condition of small Knudsen number ($Kn \ll 1$) is not satisfied.*

Keywords: *lattice Boltzmann, BGK operator, equilibrium distribution, Knudsen number.*