

Nesta Lista vamos considerar o método de *Lattice Boltzmann* (LB), que é um método que utiliza conceitos baseados em *autômatos celulares* (AC) aliados à equação de Boltzmann, a qual define a evolução de distribuição de velocidades local para um sistema com muitas partículas. O método LB é considerado bastante geral e possui grande apelo prático uma vez que ele permite simular sistemas descritos na escala mesoscópica, incluindo a dinâmica de fluidos em diferentes regimes, interfaces sólido-líquido, líquidos imiscíveis e sob ação da aceleração da gravidade, transporte de massa e de calor, etc [1].

Assim como no caso dos AC, o sistema é discretizado em uma rede com  $N$  sítios localizados em posições  $\vec{r}_k$ . Para cada sítio a quantidade fundamental é a **função de distribuição de velocidades**  $f_k^i(t) = f(\vec{r}_k, \vec{c}_i, t)$ , a qual determina o número de partículas com velocidade  $\vec{c}_i$  no  $k$ -ésimo sítio. Uma característica básica do método LB é que o conjunto de valores assumidos pelas velocidades é finito e discreto, *i.e.* depende do número de direções  $z$  considerado, tal como mostra a Figura ao lado. Dadas as distribuições  $f_k^i(t)$  é possível determinar para o  $k$ -ésimo sítio tanto uma densidade de partículas

$$\rho_k = \rho(\vec{r}_k, t) = \sum_{i=0}^z f_k^i(t) \quad , \quad (1)$$

quanto um vetor densidade de momento linear

$$\vec{j}_k = \rho_k \vec{u}_k = \rho(\vec{r}_k, t) \vec{u}(\vec{r}_k, t) = \sum_{i=0}^z f_k^i(t) \vec{c}_i \quad . \quad (2)$$

Em geral, as grandezas observáveis nas simulações são  $\rho_k$  e a velocidade local  $\vec{u}_k = \vec{j}_k / \rho_k$ .

A evolução temporal da distribuição  $f_k^i$  após um intervalo de tempo  $\Delta t$  é determinada segundo uma versão discretizada da equação de Boltzmann [2], que é dada por

$$f_{k_i}^i(t + \Delta t) - f_k^i(t) = \Omega_k^i \quad , \quad (3)$$

onde  $\Omega_k^i$  é o chamado *operador colisão* (o qual define como são as interações entre as partículas do sistema), o índice  $k_i$  denota o vizinho do  $k$ -ésimo sítio localizado na direção da velocidade  $\vec{c}_i$ , isto é, localizado em  $\vec{r}_{k_i} = \vec{r}_k + \vec{c}_i \Delta t$ , sendo  $f_{k_i}^i(t) = f(\vec{r}_{k_i}, \vec{c}_i, t)$ . Usualmente este operador é definido pela expressão de Bhatnagar, Gross e Krook (BGK):

$$\Omega_k^i = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_k^i - f_k^{i,(\text{eq})}] \quad , \quad (4)$$

onde  $f_k^{i,(\text{eq})}$  é uma distribuição de equilíbrio e  $\tau$  é um tempo de relaxação. Na prática, o que é feito no método LB-BGK é um *streaming* dos valores do sítio  $k$  para os vizinhos  $k_i$ , isto é,

$$f_{k_i}^i(t + \Delta t) = f_k^i(t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_k^i - f_k^{i,(\text{eq})}] \quad . \quad (5)$$

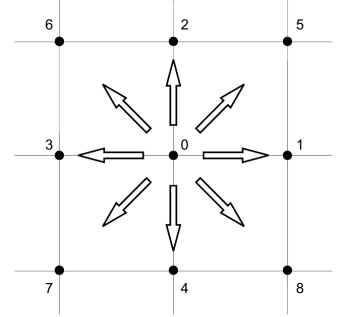
A vantagem desse método é que ele permite incorporar uma distribuição de equilíbrio dada, por exemplo, pela distribuição de Maxwell-Boltzmann. A partir de uma abordagem via maximização de entropia, encontra-se que [2]

$$f_k^{i,(\text{eq})} = w_i \rho_k \left[ 1 + 3 \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{u}_k}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u}_k)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{(\vec{u}_k \cdot \vec{u}_k)}{c^2} \right] \quad , \quad (6)$$

onde os pesos  $w_i$  são dados por  $w_0 = 4/9$ ,  $w_{1,2,3,4} = 1/9$  e  $w_{5,6,7,8} = 1/36$ , sendo  $\sum_{i=0}^z w_i = 1$  para a rede D2Q9 ( $z = 8$ ). É possível mostrar que essa escolha satisfaz as equações de conservação de massa e de momento de Navier-Stokes para líquidos incompressíveis na ausência de campo gravitacional externo [2].

Em termos de implementação, o algoritmo de simulação do método de LB-BGK consiste simplesmente em:

0. definir as distribuições iniciais  $f_k^i(t) = f(\vec{r}_k, \vec{c}_i, t)$  (*i.e.* todas as direções em todos os sítios) para  $t = 0$ ;
1. calcular  $\rho_k$ ,  $\vec{j}_k$  e  $\vec{u}_k$  através das eqs. 1 e 2;
2. calcular  $f_{k_i}^{i,(\text{eq})}$  com a eq. 6;
3. obter  $f_{k_i}^i(t + \Delta t)$  a partir de  $f_k^i(t)$  utilizando a eq. 5;
4. retornar ao passo 1.



Exemplo de possíveis direções para as velocidades  $\vec{c}_i$ . Rede D2Q9 em duas dimensões com  $z = 8$ :  $\vec{c}_0 = (0, 0)$ ,  $\vec{c}_1 = (c, 0)$ ,  $\vec{c}_2 = (0, c)$ ,  $\vec{c}_3 = (-c, 0)$ ,  $\vec{c}_4 = (0, -c)$ ,  $\vec{c}_5 = (c, c)$ ,  $\vec{c}_6 = (-c, c)$ ,  $\vec{c}_7 = (-c, -c)$ ,  $\vec{c}_8 = (c, -c)$

**Exercício 1.** Implemente um programa utilizando o método LB-BGK descrito acima para um sistema bidimensional com  $N = L^2$  sítios (*i.e.* caixa de simulação quadrada de lado  $L$ ) utilizando condições de contorno periódicas. Considerando que cada sítio  $k$  possa ser identificado pela sua posição  $(l, m)$  na rede, utilize uma condição inicial onde existem apenas partículas em repouso porém que estão em uma situação fora do equilíbrio onde há uma diferença de concentração em uma parte da caixa de simulação, *e.g.* para qualquer valor de  $m$ , têm-se  $f_k^0(0) = 0.8$  se  $120 \leq l \leq 180$  e  $f_k^0(0) = 0.4$  para  $l$  fora desse intervalo (para todos os outros valores de  $i$  e  $k$ , assumamos  $f_k^i(0) = 0$ ). Por simplicidade, considere os seguintes parâmetros:  $L = 200$ ,  $\Delta t = 1$ ,  $\tau = 1$  e  $c = 1$ .

- Faça gráficos do perfil da densidade  $\rho_k = \rho_{l,m}$  versus  $l$  considerando  $m = L/2$  em diferentes tempos para descrever a evolução temporal do sistema<sup>1</sup>.
- Faça gráficos bidimensionais da densidade  $\rho_k$  para diferentes tempos de simulação (utilize escalas de cores para distinguir os diferentes valores de densidade).
- Faça gráficos do mapa vetorial<sup>2</sup> das velocidades  $\vec{u}_k$  para os diferentes tempos de simulação mostrados no item anterior.
- Utilize o perfil de densidades e o mapa de densidades para mostrar que o estado “final”, *i.e.* para tempos muito longos ( $\sim 2 \cdot 10^4$ ), corresponde aproximadamente à situação de equilíbrio onde a densidade do sistema é homogênea, *i.e.*  $\rho_k = \rho_0 \forall k$ . Discuta se há ou não conservação da quantidade de partículas no sistema.

**Exercício 2.** Potenciais de interação entre as partículas do sistema podem ser incorporados no método LG-BGK através da seguinte alteração na velocidade dos sítios<sup>3</sup>,

$$\vec{u}_k = \frac{1}{\rho_k} ( \vec{j}_k + \tau \vec{F}_k ) ,$$

onde, por exemplo,  $\vec{F}_k$  descreve a força de coesão entre as moléculas, a qual pode ser definida como [1,3]

$$\vec{F}_k = -\varphi_k \sum_{i=0}^z G_i \varphi_{k_i} \vec{c}_i$$

com  $G_i = 2\xi$  para  $i = 1, 2, 3, 4$  e  $G_i = \xi$  para  $i = 5, 6, 7, 8$ ; e a função de interação pode ser escolhida como  $\varphi_k = \varphi(\vec{r}_k) = 1 - e^{-\rho_k}$ . Note que na expressão acima temos que  $\vec{r}_{k_i} = \vec{r}_k + \Delta t \vec{c}_i$ .

- Faça uma adaptação do programa implementado no Exercício 1 utilizando  $L = 200$ ,  $\Delta t = 1$ ,  $\tau = 1$  e  $c = 1$  para incluir a força de coesão considerando  $\xi = -0.22$ .
- Refaça os itens do Exercício 1 porém agora utilizando o programa implementado no item anterior e utilizando condições iniciais definidas por:  $f_k^i(0) = 0.3 + \delta$  para  $i = 0$  e  $\forall k$ , com o valor de  $\delta$  distribuído aleatoriamente no intervalo  $[-0.02, 0.02]$  (representando flutuações na densidade); e  $f_k^i(0) = 0.07$  para  $i \neq 0$  e  $\forall k$ .

[1] F. G. Wolf, L. O. E. dos Santos, P. C. Philippi. Rev. Bras. Ens. Fís. 28 (2006) 167-175.

[2] D. A. Wolf-Gladrow. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction (Springer, 2000).

[3] Shan & Chen. Phys. Rev. E 47 (1993) 1815.

<sup>1</sup>Opcionalmente poderia ser feito um vídeo da evolução temporal.

<sup>2</sup>Veja em: <http://www.gnuplotting.org/vector-field-from-data-file/>.

<sup>3</sup>Também é possível utilizar um procedimento análogo para incluir a força gravitacional [1].