

Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Escola de Ciências e Tecnologias

## **Análise dinâmica de escoamento de fluídos**

Tese de Doutoramento em  
Engenharia Eletrotécnica e de Computadores

**Maria Manuela Jorge Martins Ferreira**

Orientador: Professor Doutor José António Tenreiro Machado

Co-orientador: Professor Doutor José Boaventura Ribeiro da Cunha

Co-orientador: Professora Doutora Teresa Paula Azevedo Perdicoulis



Vila Real, 2016



Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Escola de Ciências e Tecnologias

## **Análise dinâmica de escoamento de fluídos**

Tese de Doutoramento em  
Engenharia Eletrotécnica e de Computadores

**Maria Manuela Jorge Martins Ferreira**

Orientador: Professor Doutor José António Tenreiro Machado

Co-orientador: Professor Doutor José Boaventura Ribeiro da Cunha

Co-orientador: Professora Doutora Teresa Paula Azevedo Perdicóúlis

Composição do júri:

Presidente: Professor Doutor Joaquim Bernardino de Oliveira Lopes

Vogais:

Professor Doutor Josenalde Barbosa de Oliveira

Professor Doutor Manuel José Cabral dos Santos Reis

Professor Doutor Abel Ilah Rouboa

Professor Doutor José António Tenreiro Machado

Professor Doutor José Carlos Lourenço Quadrado

Professor Doutor Alexandre Manuel Moutela Nunes da Mota

Professora Doutora Teresa Paula Azevedo Perdicóúlis

Professor Doutor António Manuel Ferreira Mendes Lopes

Vila Real, 2016



# Resumo

As equações de Navier-Stokes constituem uma descrição clássica da dinâmica de fluídos. No entanto, estas equações revelam problemas para se obter uma solução analítica geral restando essencialmente a sua análise através de simulações numéricas.

O método de *lattice* Boltzmann é um algoritmo numérico da Dinâmica de Fluídos Computacional (CFD) que aproxima as equações de Navier-Stokes no limite incompressível. Este método tem ganho crescente popularidade na comunidade científica, para a resolução de escoamento de fluídos.

O presente trabalho tem como objetivo analisar e desenvolver este tipo de modelo através da implementação computacional, com a finalidade de resolver um problema de referência, o escoamento de Poiseuille.

É abordado e implementado o modelo LBGK (*Lattice Boltzmann Bhatnagar-Gross-Krook*), que resulta da combinação da equação de *lattice* Boltzmann com a aproximação do operador de colisão de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK), para as equações de Navier-Stokes. O modelo de *lattice* utilizado é o *D2Q9*, de dimensão 2 com 9 velocidades discretas. São apresentadas e implementadas condições de fronteira para o problema em estudo.

Os resultados dos modelos são comparados com a solução analítica do escoamento de Poiseuille e as soluções do problema apresentam uma boa concordância, sendo mais elevada a do modelo com as condições de fronteira do tipo *half-bounceback*.

Os resultados obtidos com o método de *lattice* Boltzmann para escoamento de fluídos confirmam a sua consistência e são promissores para trabalho futuro.

**Palavras Chave:** Equações de Navier-Stokes, equação de Boltzmann contínua, equação de Boltzmann discreta, equação de *lattice* Boltzmann, método de *lattice* Boltzmann, implementação computacional.



# Abstract

The Navier-Stokes equations are a classic description of fluid dynamics. However, these equations reveal problems when trying to obtain general analytical solution, remaining essentially its analysis through numerical simulations.

The *lattice* Boltzmann method is a numerical algorithm of Computational Fluid Dynamics (CFD) that approximates the Navier-Stokes equations in the incompressible limit. This method has gained increasing popularity in the scientific community for solving fluid flow problems.

This study aims to analyze and develop this type of model through computational implementation, in view to solve a problem of reference, the Poiseuille flow.

LBGK (*Lattice Boltzmann Bhatnagar-Gross-Krook*) model it's developed and implemented, this model results from the combination of the *lattice* Boltzmann equation with the approach of the collision operator Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) for the Navier-Stokes equations. The *lattice* model used is the *D2Q9*, dimension 2 with 9 discrete velocities. Furthermore, are presented and implemented boundary conditions for the problem under study.

The results obtained with the models are compared with the analytical solution of Poiseuille flow and problem solutions showing a good agreement, being higher the model with the boundary conditions of the *half-bounceback* type.

The results obtained with the LBGK method for fluid flow confirm its consistency and are promising for future research work.

**Keywords:** Navier-Stokes equations, continuous Boltzmann equation, discrete Boltzmann equation, lattice Boltzmann equation, lattice Boltzmann method, computational implementation.



# Agradecimentos

*Ao terminar este trabalho gostaria de agradecer a todos os que, de alguma forma, contribuíram para a sua realização.*

*Em primeiro lugar quero agradecer ao meu orientador, Professor Doutor José António Tenreiro Machado, pela sua disponibilidade, paciência demonstrada e motivação transmitida ao longo deste trabalho. Agradeço também ao Professor Doutor José Boaventura da Cunha e à Professora Doutora Teresa Paula Azevedo Perdicóúlis a sua co-orientação.*

*Quero agradecer aos meus colegas da Área Científica de Matemática da Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Viseu que sempre me apoiaram e incentivaram até ao fim.*

*Gostaria também de agradecer à minha família e amigos pelo carinho, incentivo e apoio incondicionais mesmo nos momentos mais difíceis. Em particular, aos colegas Cristina Costa, Luís Afonso e Márcio Nascimento.*

*Por fim, gostaria de agradecer à presidência do Instituto Politécnico de Viseu pela promoção do programa PROFAD Universo III.*



# Índice

<b>Índice</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>xv</b>
<b>Lista de símbolos</b>	<b>xvii</b>
<b>Lista de acrónimos</b>	<b>xix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos . . . . .	1
1.2 Contexto . . . . .	2
1.3 Estrutura da tese . . . . .	8
<b>2 A Equação de Boltzmann Clássica</b>	<b>11</b>
2.1 Equação de Boltzmann . . . . .	11
2.2 Grandezas macroscópicas . . . . .	22
2.3 Propriedades físicas do operador de colisão . . . . .	24
2.3.1 Invariantes de colisão . . . . .	25
2.3.2 Equação de Transporte . . . . .	27
2.3.3 Equilíbrio Maxwelliano . . . . .	28
2.3.4 Teorema- <i>H</i> de Boltzmann . . . . .	28
2.3.5 Irreversibilidade . . . . .	29
2.3.6 Equações de Conservação . . . . .	30

<b>3</b>	<b>Limites hidrodinâmicos da equação de Boltzmann</b>	<b>35</b>
3.1	Limites Hidrodinâmicos e Outras Escalas . . . . .	35
3.2	A equação de Boltzmann adimensional . . . . .	36
3.3	Equações de Euler compressíveis . . . . .	39
3.4	Equações de Navier-Stokes compressíveis . . . . .	50
3.5	Equações de Navier-Stokes Incompressíveis . . . . .	59
3.6	Equações de Euler Incompressíveis . . . . .	67
<b>4</b>	<b>A Equação de Boltzmann Discreta</b>	<b>73</b>
4.1	Equação de Boltzmann Discreta . . . . .	73
4.2	Grandezas macroscópicas . . . . .	77
4.3	Propriedades físicas do operador de colisão . . . . .	79
4.3.1	Equação de Transporte . . . . .	81
4.3.2	Equações de Conservação . . . . .	81
4.3.3	Teorema- <i>H</i> de Boltzmann e Irreversibilidade . . . . .	83
4.3.4	Equilíbrio Maxwelliano . . . . .	84
4.4	Exemplos de Modelos de Velocidades Discretas . . . . .	85
4.4.1	Modelo de Carleman . . . . .	85
4.4.2	Modelo de Broadwell com seis velocidades . . . . .	86
4.4.3	Modelo de Broadwell - dimensão 1 . . . . .	88
4.4.4	Modelo de Broadwell com oito velocidades . . . . .	89
<b>5</b>	<b>A equação de <i>lattice</i> Boltzmann</b>	<b>93</b>
5.1	Autómatos Celulares . . . . .	93
5.1.1	<i>LGCA - Lattice-Gas Cellular Automata</i> . . . . .	96
5.2	<i>LBM - Lattice Boltzmann Method</i> . . . . .	98
5.2.1	Passagem formal da <i>LGCA</i> à equação de Boltzmann contínua . . . . .	100
5.2.2	Obtenção da <i>LBGK</i> , a partir da <i>EB</i> com operador <i>BGK</i> . . . . .	101

5.3	Aplicação computacional do modelo LBGK . . . . .	105
5.3.1	modelo D2Q9 . . . . .	106
5.3.2	Condições de fronteira . . . . .	110
5.3.3	Implementação do modelo LBGK ao escoamento de Poiseuille . .	112
<b>6</b>	<b>Conclusões e perspectivas de evolução futura</b>	<b>119</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>121</b>



# Lista de Figuras

2.1	Representação de uma colisão binária num referencial centro de massa. . . . .	14
2.2	Representação de uma colisão binária num referencial de coordenadas esféricas. . . . .	15
2.3	Outras representações de uma colisão binária. . . . .	21
3.1	Aproximações hidrodinâmicas da equação de Boltzmann. . . . .	39
4.1	O modelo de Broadwell com 6 velocidades. . . . .	86
4.2	O modelo de Broadwell com 8 velocidades. . . . .	89
5.1	Aproximações <i>top-down</i> e <i>bottom-up</i> . . . . .	99
5.2	A lattice das velocidades modelo <i>D2Q9</i> . . . . .	106
5.3	Escoamento de Poiseuille entre duas paredes paralelas. . . . .	109
5.4	Esquema do tipo <i>bounceback standard</i> na parede superior. . . . .	111
5.5	Funções de distribuição $f_7$ , $f_4$ e $f_8$ no passo de tempo $t - \Delta t$ . . . . .	111
5.6	Esquema <i>half-bounceback</i> , no passo de tempo $t$ . . . . .	112
5.7	Perfil de velocidade com esquema <i>bounceback standard</i> . . . . .	113
5.8	$\rho u_x(t)$ média, com esquema <i>bounceback standard</i> . . . . .	114
5.9	Perfil de velocidade com esquema <i>half-bounceback</i> . . . . .	114
5.10	$\rho u_x(t)$ média, com esquema <i>half-bounceback</i> . . . . .	115



# Lista de símbolos

$c$	Intensidade da velocidade discreta
$c_i$	Velocidade discreta da lattice
$c_s$	Velocidade do som na lattice
$D$	Dimensão do espaço
$e$	Energia interna por unidade de massa
$E$	Energia Total
$f$	Função distribuição
$f^{(eq)}$	Função distribuição de equilíbrio
$F$	Força externa
$G$	Força por unidade de massa
$I$	Matriz identidade
$L$	Comprimento característico
$L_{\mathcal{M}}$	Operador de colisão linearizado
$\mathcal{M}$	Função Maxwelliana
$n$	Vetor unitário de colisão
$n_i$	Número de ocupação booleano
$p$	Pressão
$\mathbb{P}$	Tensor das tensões
$q$	Fluxo de calor
$Q$	Operador colisão para evolução de $f$
$\mathcal{R}$	Constante do gases perfeitos

$S$	Secção eficaz de colisão
$t$	Instante de tempo
$T$	Temperatura absoluta
$u$	Velocidade macroscópica local
$\mathcal{U}$	Potencial de interação molecular
$v$	Vetor velocidade
$x$	Vetor de posição

### **Símbolos gregos**

$\Delta t$	Passo no tempo
$\Delta x$	Passo espacial
$\chi$	Ângulo de deflexão ou de desvio
$\nu$	Viscosidade
$\rho$	Densidade local
$T$	Temperatura adimensional
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$\lambda$	Caminho livre médio
$\rho$	Densidade local
$\tau$	Tempo de relaxação para a evolução de $f$
$\Omega_i$	Operador de colisão no LGCA

### **Números adimensionais**

$Ma$	Número de Mach
$Kn$	Número de Knudsen
$Re$	Número de Reynolds
$St$	Número de Strouhal

# Lista de acrónimos

*BGK* Bhatnagar-Gross-Krook model

*CA* Celular Automata

*D2Q9* Modelo de lattice de dimensão 2 com 9 velocidades

*DBE* Discrete Boltzmann Equation

*DBGK* Discrete Boltzmann equation Bhatnagar-Gross-Krook model

*DVM* Discrete Velocity Model

*LBE* Lattice Boltzmann Equation

*LBGK* Lattice Boltzmann equation Bhatnagar-Gross-Krook model

*LBM* Lattice Boltzmann Method

*LGCA* Lattice-Gas Cellular Automata model



# Capítulo 1

## Introdução

Este trabalho pretende analisar e desenvolver ferramentas para resolver numericamente as equações de Navier-Stokes que constituem uma descrição clássica da dinâmica de fluídos. Assim, começa por abordar-se os objetivos principais, faz-se uma apresentação do contexto desta tese e, por último, descreve-se a estrutura da tese.

### 1.1 Objetivos

A dinâmica de fluídos assume um papel determinante na resolução de problemas de diversas áreas, tais como os transportes, a produção e utilização de energia, a combustão e a meteorologia. Um fluido verifica as leis de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia. As equações que estabelecem estas propriedades constituem as equações de Navier-Stokes [184], cujas incógnitas são grandezas macroscópicas, tais como densidade, velocidade, temperatura e pressão, que caracterizam quantitativamente o fluido em questão.

No entanto, a sua formulação puramente analítica revela-se extremamente limitada no que concerne á sua aplicabilidade. De facto, as equações de Navier-Stokes colocam problemas de cálculo de uma solução analítica geral, restando essencialmente a sua análise através de simulações numéricas ou modelos simplificados.

No presente trabalho propõe-se a utilização do *Lattice Boltzmann Method* (LBM) [170]. O método é usado na simulação da dinâmica de fluídos, tendo por base equações cinéticas microscópicas e utiliza a cinética de distribuições de partículas artificiais numa *lattice* regular.

As equações de Boltzmann, da teoria cinética, e as equações de Navier-Stokes, da dinâmica dos fluídos, são modelos assintoticamente equivalentes. As equações de Navier-Stokes podem ser deduzidas como uma aproximação de segunda ordem da equação de Boltzmann, através da expansão Chapman-Enskog [37], [40].

A equação Lattice Boltzmann (LBE) é uma versão discretizada, na variável tempo e na variável espaço, da equação de Boltzmann discreta.

A LBE com o modelo operador de colisão de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK), denominado modelo *Lattice Boltzmann equation Bhatnagar-Gross-Krook* (LBGK), no caso incompressível, permite deduzir as equações de Navier-Stokes, no limite incompressível, através da utilização da expansão de Chapman-Enskog multi-escala das variáveis tempo e espaço [92].

Nesta ordem de ideias, foram analisadas as perspectivas de modelização numérica e foi elaborado um programa em MATLAB para implementação do modelo LBGK D2Q9.

## 1.2 Contexto

A descrição do escoamento de fluídos, líquidos e gases, poderá revelar-se de grande complexidade, mesmo que as condições de fronteira, a que estes se encontram submetidos, sejam particularmente simples. Este tipo de fenómenos explicam-se através dos princípios físicos enunciados pela segunda lei de Newton (lei da conservação de massa e conservação da quantidade de movimento) e também, em alguns casos, pelas leis da termodinâmica. Aliada a uma abordagem teórica do problema, deverá muitas vezes também recorrer-se à observação experimental, uma vez que a correlação entre as leis da física e o comportamento efetivo de um fluido em escoamento nem sempre surgem como óbvias. As propriedades de uma substância encontram-se relacionadas de forma direta com a sua estrutura molecular. As moléculas encontram-se num estado de permanente agitação em torno das suas posições médias de equilíbrio estável. Esta oscilação terá uma energia cinética que será tanto maior quanto maior for a energia térmica que lhes tenha sido fornecida.

Uma abordagem microscópica do problema considera o fluido como sendo um sistema de partículas com vários corpos, onde o movimento de cada partícula se explica através das leis de Newton. No entanto, o estudo do comportamento dos fluídos

a uma escala microscópica oferece certos inconvenientes. Por um lado, uma análise microscópica exclui a possibilidade de se utilizar o cálculo diferencial, visto que esta análise pressupõe variações de modo contínuo em cada ponto e instante. Por outro lado, do ponto de vista experimental, os instrumentos tipicamente utilizados numa análise laboratorial para este tipo de estudos não permitem descer a esta escala microscópica, uma vez que é impossível determinar a evolução em função do tempo de todas as partículas de um gás, devido ao elevado número de partículas. Atendendo ao exposto, facilmente se compreendem as limitações desta abordagem.

Na abordagem do estudo do comportamento de fluídos torna-se portanto necessário recorrer a outro tipo de escala. A escala macroscópica assume a hipótese do *continuum*, na qual se considera um ponto como um elemento de volume com dimensão volúmica muito superior ao cubo da distância “típica” entre moléculas, mas muito inferior ao cubo de qualquer escala característica do escoamento em causa. Desta forma, obter-se-á uma variação regular de ponto para ponto, tanto no domínio temporal como no espacial, em que se consegue descrever o comportamento do sistema através da sua massa específica, velocidade, temperatura e pressão. Nesta abordagem as equações de Euler e de Navier-Stokes assumem um papel importante. No entanto, esta hipótese do *continuum* não é válida para o caso dos gases rarefeitos, para os quais é necessário estudar o comportamento estatístico das moléculas individualmente.

A escala mesoscópica assume-se como uma escala intermédia, entre as escalas microscópica e macroscópica. Nesta abordagem, apesar de se considerar o fluido como sendo constituído por partículas, apenas se tem em conta o comportamento microscópico de forma probabilística (em vez de se acompanhar a trajetória de cada partícula). Pretende-se então determinar as grandezas macroscópicas de um sistema, bem como as relações entre elas, a partir da estrutura microscópica, recorrendo para isso à física estatística, também conhecida por mecânica estatística. Esta área tem ainda como objetivo determinar as leis que explicam o comportamento de um sistema macroscópico através das leis que regem o seu comportamento microscópico. Neste contexto mesoscópico, a equação de Boltzmann, [37], [38], [182], [81] assume um papel essencial.

Em 1872 Ludwig Boltzmann, a partir do modelo matemático de esferas rígidas elásticas e usando considerações estatísticas e mecânicas, estabeleceu uma equação de evolução, para descrever o comportamento de um gás rarefeito, num contexto em

que a estrutura microscópica da matéria era ainda pouco clara. Embora houvesse evidências da existência do átomo, no desenvolvimento da química, desde os trabalhos de Dalton e outros (séculos *XVIII* e *XIX*), os primeiros desenvolvimentos da teoria cinética dos gases devem-se a Robert Boyle (1627 – 1691) e a Newton (1643 – 1727). Considera-se que a teoria cinética se inicia com Daniel Bernoulli (1700 – 1782) ao propôr que as propriedades de um gás, como pressão e temperatura, poderiam ser entendidas considerando um gás formado por um grande número de moléculas elásticas que colidiam entre si e com as paredes do recipiente. No entanto, a teoria cinética dos gases não foi aceite pela comunidade científica sem que antes ocorressem importantes avanços na termodinâmica, em que se conseguisse estabelecer uma relação entre calor, trabalho e energia. Nesta altura, a teoria mais reputada era aquela proposta por Newton, que considerava que o ar era constituído por partículas sem movimento independente e que se comportavam como molas. No início da segunda metade do século *XIX*, a relação entre calor, trabalho e energia era finalmente conhecida, devido aos trabalhos experimentais desenvolvidos por Thompson e Joule. A evolução da termodinâmica, que fornece bases teóricas que permitem relacionar as propriedades macroscópicas de um sistema com outro, representou um papel fundamental no desenvolvimento da teoria cinética dos gases. Enquanto que a primeira lei da termodinâmica, que na prática é uma versão da lei da conservação de energia, admite que é possível transformar formas de energia umas nas outras (neste caso, trabalho e calor), a segunda lei da termodinâmica, que refere que a entropia [40] (grandeza definida por Clausius em 1850) de qualquer sistema termodinâmico isolado tende a aumentar com o tempo, até atingir um valor máximo, introduz um conceito de irreversibilidade. O conhecimento da estrutura molecular e atômica de um elemento permite perceber que as grandezas macroscópicas de um sistema são consequência do estado das partículas desse mesmo sistema. A temperatura de um sistema encontra-se associada à sua energia cinética e à velocidade das partículas, enquanto que a densidade de um sistema se encontra relacionada com a distância média entre as partículas. Em 1856, a teoria cinética dos gases foi finalmente apresentada, em duas publicações independentes, nomeadamente por August Kronig [125] e por Rudolf Clausius (1857) [46]. Este último concluiu que como os gases se difundem lentamente, apesar das moléculas terem velocidade elevada, elas teriam um caminho livre médio bastante pequeno entre as colisões. Em 1860, Rudolf Clausius estabelece uma relação matemática definida como entropia e que mede a quantidade de energia do sistema que pode ser convertida em trabalho. As deduções feitas por Clausius captaram o interesse de vários cientistas da

época, estando entre eles Maxwell, Kelvin, Boltzmann e Gibbs.

Maxwell, em 1859, a partir das ideias de Bernoulli e Clausius, desenvolveu uma teoria para processos de transporte em gases, calculando entre outras coisas a viscosidade, a difusão e a transmissão de calor. Foi também neste ano que deduziu a lei de distribuição de velocidades das moléculas de um gás de uma forma heurística. Maxwell, ao estudar a teoria cinética, percebeu que seria impossível desenvolver equações baseando-se nas leis de Newton devido ao elevado número de variáveis, o que tornaria o cálculo irrealista. Por outro lado, apercebeu-se que também não seria necessário conhecer a trajetória de cada partícula. O importante era encontrar uma forma de relacionar o comportamento microscópico de um sistema com as suas propriedades macroscópicas. Isto seria possível recorrendo a um número elevado de moléculas e calculando a sua média. Em 1857, Maxwell conseguiu deduzir, de forma mais fundamentada, a função de distribuição das velocidades das moléculas de um gás monoatômico em equilíbrio na ausência de forças externas, ficando esta formulação conhecida como *distribuição de Maxwell* ou função de distribuição *Maxwelliana*. Esta foi a primeira lei estatística na física. Maxwell, também deduziu as equações de transferência que caracterizam a taxa de variação de qualquer quantidade (tais como a massa, a quantidade de movimento ou a energia), para um gás diluído.

Boltzmann, entre 1868 e 1871, publica uma série de trabalhos, nos quais, além de usar a função de distribuição de Maxwell, generaliza o trabalho de Maxwell à teoria cinética. Assim, ele generaliza a distribuição de velocidades para o caso de moléculas poliatômicas sob a ação de um potencial intermolecular. Esta é a razão pela qual é chamada distribuição de Maxwell-Boltzmann. Além disso, e à semelhança do conceito de entropia existente na termodinâmica, Boltzmann visualizou um método probabilístico para medir a entropia de um determinado número de partículas de um gás ideal, no qual ele definiu a entropia como sendo proporcional ao logaritmo natural do número de microestados que um gás pode ocupar:  $S = k_B \ln \Omega$ , sendo  $S$  a entropia,  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $\Omega$  o número de microestados possíveis do sistema. Do ponto de vista macroscópico o estado de equilíbrio de um sistema isolado é caracterizado por um máximo de entropia,  $S$ , enquanto do ponto de vista microscópico é caracterizado por um valor máximo de  $\Omega$ . Mas foi no ano de 1972 que Boltzmann publicou aquele que é considerado o trabalho mais importante em mecânica estatística [21]. Neste trabalho, tinha o objetivo de continuar a estudar a natureza do equilíbrio termodinâmico, em particular, provar a unicidade da distribuição de Maxwell para a

descrição de estados estacionários. Na primeira parte do seu artigo, Boltzmann estabeleceu a sua famosa equação para a evolução da função de distribuição de velocidades moleculares,  $f$ , de um gás diluído, arbitrariamente longe do equilíbrio. Para isso, considerou várias hipóteses simplificativas. A *hipótese de caos molecular*, que traduz a ausência de correlações estatísticas entre as velocidades antes da colisão de duas partículas que entram em colisão, é essencial, uma vez que introduz a assimetria no tempo, para descrever a irreversibilidade de um processo em relaxação. Além disso, Boltzmann introduziu um funcional da função de distribuição das velocidades,  $I_\varphi$ , integral de dissipação da entropia total, que é não-negativo, e que tem as propriedades da entropia não-equilíbrio. A produção de entropia é não-negativa e só desaparece no equilíbrio. Uma consequência deste resultado é o célebre teorema- $H$  de Boltzmann,  $\frac{dH}{dt} \leq 0$ , onde a igualdade acontece se e só se  $f$  é uma distribuição *Maxwelliana*. Com a introdução desta última função- $H$ , Boltzmann deu o primeiro passo para o entendimento da evolução temporal dos processos assimétricos ou irreversíveis. As leis clássicas da física são fundamentalmente reversíveis, uma vez que as equações da mecânica introduzidas por Newton não introduziam a invariância por reversão, ou assimetria, temporal.

Demorou quase 40 anos após a apresentação da equação de Boltzmann, para que David Hilbert, em 1912, demonstrasse como se poderia obter uma solução aproximada desta equação, através de uma série em expansão de potências num parâmetro que é proporcional ao caminho livre médio (inversamente proporcional à densidade do gás), conhecida por expansão assintótica de Hilbert [109]. Em 1917, Sydney Chapman [39] e David Enskog [62], simultaneamente e de forma independente calcularam uma aproximação à equação de Boltzmann, válida para um gás suficientemente denso. Os resultados obtidos foram idênticos, mas os métodos eram completamente diferentes. O desenvolvimento da teoria de Chapman-Enskog é uma das grandes conquistas da teoria cinética para a obtenção dos coeficientes de transporte (viscosidade, condução de calor e difusão) de gases. Outra contribuição importante foi dada por Harold Grad [86], em 1963, ao estudar o problema assintótico da equação de Boltzmann e as relações às equações hidrodinâmicas, dadas pela expansão de Chapman-Enskog.

A abordagem para a recuperação do regime da dinâmica dos fluídos a partir das equações cinéticas é o chamado limite hidrodinâmico. Este assunto remonta aos fundadores da teoria cinética dos gases. O principal objetivo de um problema de limites

hidrodinâmicos consiste na obtenção de deduções rigorosas de modelos macroscópicos, tais como as equações diferenciais parciais fundamentais da mecânica de fluídos, a partir de uma descrição microscópica da matéria, seja a dinâmica molecular, seja a teoria cinética dos gases. Em particular, podem ser aplicadas à equação de Boltzmann diferentes expansões assintóticas e procedimentos de escala, por forma a deduzir as equações fundamentais da dinâmica de fluídos, [87], [88], [38], [182], [81]. As equações dizem-se assintoticamente equivalentes, no limite de pequenos valores do caminho livre médio. Isto é, as soluções têm um comportamento semelhante, diferindo os seus valores numa norma escolhida de forma adequada.

Na realidade, as formulações puramente analíticas da equação de Boltzmann e da equação de Navier-Stokes apresentam problemas na sua aplicabilidade. Em particular, a equação de Boltzmann contínua é uma equação integro-diferencial com sete variáveis, uma para o tempo, três para o espaço das posições e três para o espaço das velocidades. O operador de colisão, que aparece no segundo membro da equação, tem a forma integral onde a função  $f$  aparece não linearmente.

A equação de Boltzmann discreta, ou modelos de velocidades discretas, baseia-se na discretização do espaço das velocidades. Por um lado, as partículas dos gás podem assumir apenas um número finito de velocidades. Por outro lado, as variáveis tempo e espaço mantêm-se contínuas. O número de equações é igual ao número de velocidades. A discretização do espaço de velocidades permite que a equação de Boltzmann clássica seja substituída por um sistema semilinear de equações diferenciais. Assim, os integrais do operador de colisão da equação de Boltzmann contínua são substituídos por um duplo sumatório sobre os pontos de velocidade. O primeiro modelo de velocidades discretas foi introduzido por Carlemann [35] em 1957, mas o primeiro trabalho consequente deve-se a Broadwell [28], em 1964. Ele propôs um modelo muito simples de um gás com seis velocidades e a sua aplicação teve muito sucesso no estudo da propagação de ondas de choque. O primeiro trabalho geral e sistemático da teoria cinética discreta deve-se a R. Gatignol [71], em 1975. A estrutura simples do operador de colisão discreto, aliada à melhoria das capacidades computacionais, tem permitido várias simulações numéricas com o objetivo de fornecer uma descrição de situações físicas da dinâmica de fluídos. Em particular, a equação de Navier-Stokes para um fluido incompressível.

A equação de *lattice* Boltzmann (LBE) [170], [185] é a equação principal do *lattice*

*Boltzmann Method* (LBM) [170], [185]. Originalmente, o LBM surge como uma melhoria do *Lattice-Gas Cellular Automata* (LGCA) [170], [185], cuja ideia fundamental consistiu na substituição do número de ocupação booleana por populações média-ensemble, representadas por uma função de valores reais, sendo que as operações continuam a decorrer numa *lattice*. O primeiro modelo LGCA foi introduzido por Frisch, Hasslacher e Pomeau [67] em 1986. Este modelo, conhecido por modelo FHP permitiu resolver, pela primeira vez, as equações de Navier-Stokes bidimensionais. O primeiro modelo LBM surgiu em 1988 por McNamara e Zanetti [139]. Alternativamente, e mais recentemente [170], [185], foi provado que o LBM pode ser considerado uma versão discretizada da equação de Boltzmann discreta, ou da equação de Boltzmann contínua. Se à LBE adicionarmos uma versão aproximada do operador de colisão, chamado operador de colisão de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) [20] ou modelo BGK, obtém-se o modelo LBGK [170], [185].

### 1.3 Estrutura da tese

A tese cujo tema é “Análise dinâmica de escoamento de fluídos” está organizada em seis capítulos.

O Capítulo 1 corresponde à presente introdução.

No Capítulo 2 apresenta-se a equação de Boltzmann clássica e a dedução de três representações do operador de colisão de Boltzmann, de acordo com as parametrizações das velocidades de colisão. De seguida, abordam-se as principais grandezas macroscópicas que fornecem uma descrição macroscópica do gás e, por último, as propriedades físicas do operador de colisão. Em particular, a equação de transporte que irá permitir estabelecer as equações de conservação local da massa, da quantidade de movimento e da energia cinética, a definição de função de distribuição *Maxwelliana* e de *estado de equilíbrio Maxwelliano*, o teorema-*H* e a irreversibilidade.

No Capítulo 3, aborda-se a análise assintótica da equação de Boltzmann, também conhecida por limites hidrodinâmicos da equação de Boltzmann. Apresenta-se os limites formais da equação de Boltzmann, em particular, o sistema de Euler e o sistema de Navier-Stokes, para escoamentos de fluídos compressíveis e para os incompressíveis. Estes sistemas são obtidos através da utilização de expansões assintóticas de Hilbert, de Chapman-Enskog e de procedimentos de escala. Existem vários limites formais

para cada um destes sistema de equações macroscópicas. Neste trabalho, apresenta-se dois limites formais para as equações de Euler de um fluido compressível, primeiro por um processo de escala tempo-espaço e, depois, através da expansão assintótica de Hilbert. A seguir, as equações de Navier-Stokes compressíveis são deduzidas através da expansão de Chapman-Enskog e são consideradas como sendo uma correção das equações de Euler compressíveis. No seguimento destes raciocínios, deduz-se formalmente as equações de Navier-Stokes incompressíveis. O procedimento consiste de uma correção de primeira ordem da expansão de Chapman-Enskog e da aplicação de uma mudança de escala das variáveis tempo e espaço, sendo a escala parabólica ou difusiva aplicada à variável tempo. Por último, apresenta-se as equações de Euler de um fluido incompressível sem viscosidade como sendo o limite não viscoso das equações de Navier-Stokes.

No Capítulo 4, a equação de Boltzmann discreta, é, inicialmente, análoga à do Capítulo 2. No desenvolvimento do modelo, apresentam-se alguns exemplos dos primeiros modelos de velocidades discretas. Em particular, o modelo de Carleman unidimensional com duas velocidades, os modelos de Broadwell tridimensionais de seis velocidades e de oito velocidades, e um caso particular do modelo de Broadwell de seis velocidades, conhecido por modelo de Broadwell de dimensão um.

No Capítulo 5, apresenta-se a equação de *lattice* Boltzmann (LBE), que é a equação fundamental do *Lattice Boltzmann Method* (LBM). Começa-se por abordar o seu antecessor, ou seja, o *Lattice-Gas Cellular Automata* (LGCA) que é uma classe especial de Autómatos Celulares para o estudo da dinâmica de fluídos. Em particular, faz-se referência aos modelos HPP, FHP e FCHC. A seguir, apresenta-se a LBE seguindo dois caminhos diferentes. Primeiro, a partir do LGCA e depois como uma versão discretizada da equação de Boltzmann clássica (em particular da equação de Boltzmann discreta), com uma aproximação do operador de colisão, o modelo Bhatnagar-Gross-Krook (BGK). Por último, descreve-se a implementação do modelo LBGK para as equações de Navier-Stokes incompressíveis e discute-se os resultados obtidos na simulação numérica do escoamento de Poiseuille.

No Capítulo 6 são apresentadas as conclusões de todo o trabalho e as perspectivas de trabalho futuro.



# Capítulo 2

## A Equação de Boltzmann Clássica

A equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial que descreve a evolução de um gás monoatômico, no espaço e no tempo, a partir de uma descrição de base estatística. Neste capítulo faz-se uma apresentação sucinta desta equação e das suas principais propriedades. A equação de Boltzmann revela-se importante ao longo de toda a tese. Por um lado, fornece uma descrição reduzida do meio microscópico, por outro, é uma ferramenta importante para as aplicações, especialmente para fluídos diluídos, onde as equações da hidrodinâmica deixam de ser asseguradas. Este capítulo é constituído por três secções. Na secção 2.1 apresenta-se a equação de Boltzmann contínua para um gás. Na secção 2.2 abordam-se as grandezas macroscópicas. Por último, na secção 2.3 analisam-se as propriedades físicas do operador de colisão, nomeadamente, os invariantes de colisão, a equação de transporte, o estado de equilíbrio Maxwelliano, o teorema- $H$  de Boltzmann, a irreversibilidade e as equações de conservação.

### 2.1 Equação de Boltzmann

Considere-se um gás monoatômico constituído por  $N \in \mathbb{N}$  partículas com massa  $m = 1$  e introduza-se o espaço de fase  $\Omega = \Omega_x \times V$ , no qual o estado físico de uma partícula é caracterizado pela sua posição  $x = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \Omega_x \subset \mathbb{R}^d$  e pela sua velocidade  $v = (v_1, v_2, \dots, v_d) \in V \subseteq \mathbb{R}^d$  onde  $v_i = \dot{x}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, d$ . No que se segue iremos considerar  $d = 3$ .

Introduza-se ainda a chamada *função de distribuição das velocidades*  $f$ , definida em  $\mathbb{R}_0^+ \times \Omega$  e com valores em  $\mathbb{R}_0^+$ , tal que a quantidade

$$f(t, x, v) dx dv$$

representa o número provável de partículas que, no instante  $t$ , ocupam o elemento de volume  $dx$  na vizinhança do ponto  $x$  do espaço físico, com velocidade no elemento de volume  $dv$  na vizinhança do ponto  $v$  do espaço das velocidades.

Determinada a função  $f$ , a quantidade:

$$\int_{\Omega_x} \left( \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv \right) dx, \quad (2.1)$$

corresponde ao número total de partículas  $N$  cuja posição  $x$  está em  $\Omega_x$  e cuja velocidade  $v$  está em  $V$  no instante  $t$ .

Considerando algumas hipóteses simplificativas da realidade física (*cf.*[37]), consistentes apenas com os gases rarefeitos, a equação de Boltzmann é obtida num quadro microscópico, na forma geral:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = Q(f, f), \quad (2.2)$$

onde o termo  $Q(f, f)$ , designado por operador de colisão, descreve os efeitos da interação entre as partículas e faz o balanço das perdas e dos ganhos resultantes das colisões entre as partículas do gás.

A equação de Boltzmann (2.2) é obtida com base nas seguintes hipóteses sobre as colisões que estão na origem da dedução heurística do operador de colisão:

1. As partículas interagem somente através de colisões *binárias*. Isto é, duas partículas do gás interagem a partir do instante em que a distância que as separa é inferior ao raio de ação do potencial intermolecular. Mais especificamente, o gás é suficientemente rarefeito de forma que se possa desprezar os efeitos das interações envolvendo mais do que duas partículas.
2. As colisões são *localizadas* no espaço e no tempo. Matematicamente isso significa que as colisões ocorrem num dado ponto  $x$  e num dado instante  $t$ . Fisicamente isso supõe, implicitamente, que a duração típica de uma colisão é curta (colisões instantâneas), relativamente a um tempo macroscópico de referência, e que o raio de ação do potencial intermolecular é pequeno, relativamente a um comprimento macroscópico de referência.

3. As colisões são *elásticas*, ou seja, a quantidade de movimento e a energia cinética das duas partículas são conservadas durante a colisão. Mais precisamente, dadas duas partículas (constituindo um sistema fechado) de velocidades  $v$  e  $v_*$ , antes de uma colisão, e de velocidades  $v'$  e  $v'_*$ , depois de uma colisão, obtemos as seguintes relações (considerando que todas as partículas têm a mesma massa  $m$ ):

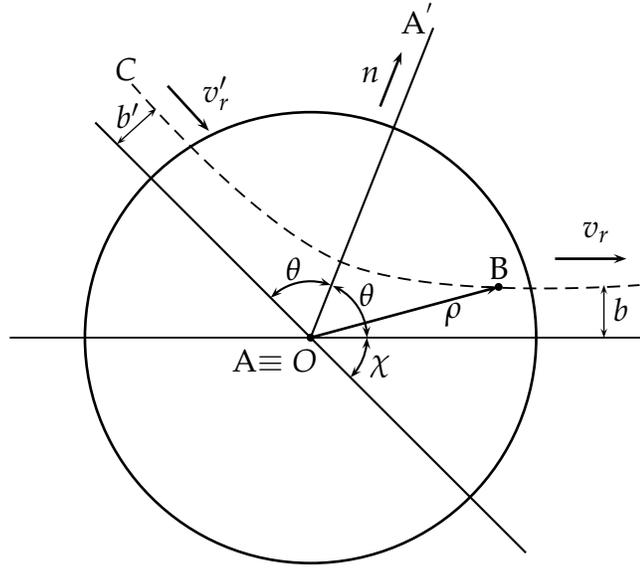
$$\begin{cases} v + v_* & = & v' + v'_* \\ |v|^2 + |v_*|^2 & = & |v'|^2 + |v'_*|^2. \end{cases} \quad (2.3)$$

4. As colisões são *microreversíveis*, por analogia com a dinâmica microscópica reversível. Matematicamente, isto significa que a probabilidade de duas partículas com velocidades  $(v, v_*)$  serem transformadas nas velocidades  $(v', v'_*)$  durante uma colisão é a mesma que a do par  $(v', v'_*)$  resultar  $(v, v_*)$ . Isto é, são equiprováveis todos os pares de partículas que possam resultar de uma colisão.
5. O gás satisfaz a *hipótese do caos molecular* de Boltzmann (hipótese *Stosszahlansatz*), ou seja, antes da colisão as velocidades das duas partículas que entram em colisão não estão correlacionadas (*à priori*). Por outras palavras, as probabilidades são independentes de uma partícula se encontrar em  $(x, v)$  e da outra partícula se encontrar em  $(x', v')$ . No entanto, como as colisões aumentam as correlações no sistema ao longo do tempo, esta hipótese introduz uma assimetria temporal passado-futuro na equação de Boltzmann, caracterizando a irreversibilidade do processo.

Com o objetivo de caracterizar o operador de colisão  $Q(f, f)$ , considere-se a interação entre duas partículas A e B e analisemos o movimento da partícula B relativamente à partícula A, resultante da força central (conservativa) que A exerce sobre B.

Sejam  $v$  e  $v_*$  as velocidades de A e B antes da colisão e  $v'$  e  $v'_*$  as velocidades adquiridas após a colisão que verificam a condição (2.3). Sejam  $v_r = v - v_*$  e  $v'_r = v' - v'_*$  as velocidades relativas da partícula B em relação à partícula A, respetivamente antes e depois da colisão, e seja  $AA'$  a linha dos ápsides.

Introduza-se o referencial de coordenadas esféricas  $(\rho, \varepsilon, \theta)$  (cf. a Figura 2.1)



**Figura 2.1.** Representação de uma colisão binária num referencial centro de massa.

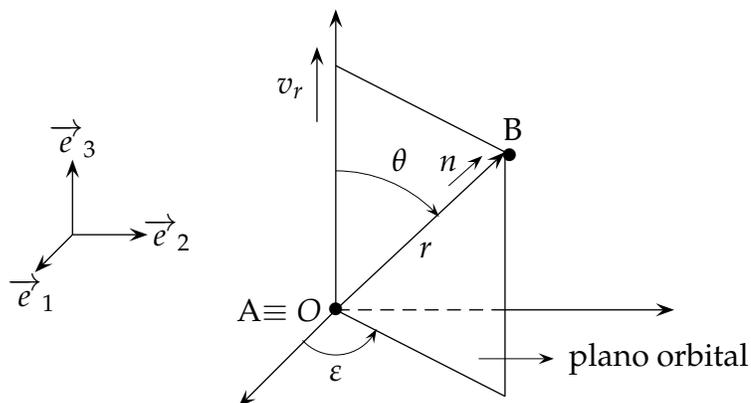
Note-se que:

- A curva  $C$  representa a trajectória da partícula  $B$ , relativamente à partícula  $A$  fixa, situada na origem  $O$ ;
- $\rho > 0$  é a distância entre as partículas  $A$  e  $B$ ;
- O ângulo  $\chi$  definido pelas semi-rectas  $Av_r'$  e  $Av_r$  consiste no chamado ângulo de deflexão, ou de desvio;
- O ângulo  $\theta$ , definido pelas semi-rectas  $Av_r$  e  $An$ , é tal que  $\chi = \pi - 2\theta$ ,  $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$ ;
- $b$  e  $b'$  representam os parâmetros de impacto antes e depois da interação, respetivamente, sendo  $b = b'$ ;
- $n$  é o vetor de colisão (ou vetor apsidal) definido por

$$n = \frac{v_r - v_r'}{|v_r - v_r'|} \quad (2.4)$$

que bissecta o ângulo entre as linhas retas dirigidas ao longo de  $-v_r'$  e  $v_r$  e, além disso, tem a direcção da linha dos ápsides  $AA'$ .

Considere-se o referencial cartesiano ortonormado direto  $(O; \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$  solidário com a molécula A, com  $O$  a posição ocupada por A, e  $O\vec{e}_3$  coincidente com o eixo  $Av_r$ , de acordo com a Figura 2.2:



**Figura 2.2.** Representação de uma colisão binária num referencial de coordenadas esféricas.

Note-se que:

- $O$  é a posição ocupada pela partícula A;
- $r$  é o raio da esfera que contem a partícula B, com  $\rho \leq r$ ;
- A colatitude (ou ângulo polar) é o ângulo  $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$ , tal que o eixo de referência  $Ov_r$  (coincidente com  $O\vec{e}_3$ ) faz com  $On$ ;
- A longitude (ou ângulo azimutal) é o ângulo  $\varepsilon \in [0, 2\pi[$  que o plano fixo  $O\vec{e}_1\vec{e}_3$  faz com o plano orbital. O ângulo  $\varepsilon$  situa-se num plano ortogonal a  $v_r$ ;
- $n = (\sin \theta \cos \varepsilon, \sin \theta \sin \varepsilon, \cos \theta)$  é a representação do vetor de colisão (2.4) no referencial de coordenadas esféricas  $(r, \varepsilon, \theta)$ , com  $\rho = r = 1$ ;
- Os ângulos  $\theta$  e  $\varepsilon$  relacionam-se por  $n \cdot v_r = |v_r| \cos \theta$ , ou seja,

$$\cos \theta = \frac{v_r \cdot n}{|v_r|}$$

- $dn = \sin \theta d\theta d\varepsilon$  pode ser considerado como o elemento de ângulo sólido da semi-esfera unitária  $S_+^2 = \{n \in \mathbb{R}^3 : \|n\| = 1, v_r \cdot n \geq 0\}$ ;

Escreva-se  $f = f(t, x, v)$ ,  $f_* = f(t, x, v_*)$ ,  $f' = f(t, x, v')$  e  $f'_* = f(t, x, v'_*)$ .

Relativamente ao referencial de coordenadas esféricas  $(1, \varepsilon, \theta)$  anterior, o operador de colisão é, em geral, escrito em termos de uma função  $B$  chamada núcleo de colisão. A função é dependente de  $|v_r|$  e de  $\cos \theta = \frac{(v - v_*) \cdot n}{|v - v_*|}$ , na forma (cf. [36],[37]):

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} B(|v_r|, \cos \theta) (f' f'_* - f f_*) d\theta d\varepsilon dv_*. \quad (2.5)$$

Consequentemente, a equação de Boltzmann (2.2) adquire a forma integro-diferencial

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} B(|v_r|, \cos \theta) (f' f'_* - f f_*) d\theta d\varepsilon dv_*. \quad (2.6)$$

Na presença de forças exteriores, a equação (2.6) passa a incluir uma parcela adicional, vindo na forma (cf. [36], [11])

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f + \frac{\vec{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial v} = \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} B(|v_r|, \cos \theta) (f' f'_* - f f_*) d\theta d\varepsilon dv_*, \quad (2.7)$$

onde  $\vec{F}$  representa um campo de forças exteriores que atua sobre as partículas e  $m$  representa a massa de cada partícula. É de salientar a forma diferencial, em termos de derivadas parciais, do primeiro membro, e a forma integral, do segundo membro, onde a função incógnita  $f$  aparece não linearmente.

O núcleo de colisão  $B(|v_r|, \vartheta) \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^3 \times S^2)$  é uma função não-negativa que descreve o desvio das partículas de um gás, devido às colisões binárias, e que depende de um potencial de interação molecular  $U(\rho)$ . Na maioria dos casos, é possível explicitar  $B$  quando este obedece a certos tipos de potenciais. Em particular, para o caso em que  $U(\rho)$  é um potencial de lei de potência inversa de ordem  $s - 1$ , na forma:

$$U(\rho) = c_1 \frac{1}{\rho^{s-1}},$$

com  $s > 2$ ,  $c_1 > 0$  (forças repulsivas) e onde  $\rho$  denota a distância entre duas partículas A e B, pode mostrar-se que o núcleo de colisão tem a forma do produto das componentes  $\Phi$  e  $\beta$ , (cf. [37], [181], [182])

$$B(|v_r|, \cos \vartheta) = \Phi(|v_r|) \beta(\cos \vartheta). \quad (2.8)$$

Na expressão anterior, a função  $\Phi$ , denominada núcleo de colisão cinético, é dada por

$$\Phi(|v_r|) = |v_r|^\gamma, \quad (2.9)$$

com  $\gamma = \frac{s-5}{s-1}$  e  $s \geq 2$ . A função  $\beta(\cos \vartheta)$  é designada núcleo de colisão angular, com  $\cos \vartheta = \frac{v_r \cdot \vartheta}{|v_r|}$  e, em geral, é definida implicitamente. Além disso,  $\beta(\cos \vartheta)$  é uma função par, localmente regular e que apresenta uma singularidade perto da variável angular  $\vartheta = \theta = \frac{\pi}{2}$  ou  $\vartheta = \chi = 0$ .

A singularidade na função  $\beta$  corresponde, fisicamente, à acumulação de colisões *raspantes* (isto é, de colisões com grande parâmetro de impacto  $b$  durante as quais as partículas são muito pouco desviadas) e, conseqüentemente o integral sobre a esfera  $S^2$  não é integrável (cf. [181], [182]). Este inconveniente levou Grad (cf. [85]) a introduzir a conhecida "*hipótese de corte angular*" que corresponde exatamente ao *corte* ou *truncatura angular* por forma a tornar a função  $\beta$  integrável em  $S^2$ .

Em particular, no caso de  $\vartheta = \theta$ , a função  $\beta$  tem uma singularidade perto de  $\theta = \frac{\pi}{2}$  e assume-se que (cf. [181], [182])  $\beta \in C([-1, 1] \setminus \{0\})$  e

$$\beta(\cos \theta) \sim c_2 |\cos \theta|^{-1-\nu}, \quad \nu = \frac{2}{s-1}. \quad (2.10)$$

No caso de  $\vartheta = \chi$ , a singularidade da função  $\beta$  ocorre perto de  $\chi = 0$  e assume-se que (cf. [181], [182], [53])  $\beta \in C([-1, 1[)$  e

$$\beta(\cos \chi) \sin \chi \sim c_3 |\chi|^{-1-\nu}, \quad \nu = \frac{2}{s-1}. \quad (2.11)$$

Nas equações (2.10) e (2.11),  $c_2$  e  $c_3$  são constantes arbitrárias positivas e o sinal  $\sim$  denota comportamento assintótico das funções, perto da singularidade.

De (2.11), surge a "*hipótese de corte angular de Grad*":

$$\int_{S^2} \beta(\cos \chi) d\chi = 2\pi \int_0^\pi \beta(\cos \chi) \sin \chi d\chi < \infty, \quad (2.12)$$

que torna possível a integrabilidade de  $\beta$  em  $S^2$  e, por conseguinte,  $B \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^3 \times S^2)$ .

Mais especificamente, diremos que o núcleo de colisão  $B(|v_r|, \cos \chi)$ , (2.8), satisfaz a *hipótese de interrupção angular rígida*, se para cada  $v_r \in \mathbb{R}^3$  e  $\chi \in S^2$  se tem

$$0 < B(v_r, \chi) \leq C(1 + |v_r|)^\alpha \quad \text{e} \quad \int_{S^2} B(v_r, \chi) d\chi \geq \frac{1}{C}(1 + |v_r|)^\alpha, \quad (2.13)$$

para algum  $\alpha \in [0, 1]$  e constante  $C > 0$ . Em vez disso, diremos que o núcleo de colisão satisfaz a *hipótese de interrupção angular débil*, se  $B$  satisfaz as condições anteriores com  $\alpha \in ]-3, 0[$ .

Considerando  $\vartheta = \theta$ , com  $\theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ , e que as partículas interagem através de forças do tipo potência inversa de ordem  $s - 1$ , o núcleo de colisão (2.8) é, então, da forma

$$B(|v_r|, \cos \theta) = |v_r|^\gamma \beta(\cos \theta) \quad \text{com} \quad \gamma = \frac{s-5}{s-1}. \quad (2.14)$$

Para  $s < 5$  as interações entre as partículas dizem-se *débeis* e para  $s > 5$  dizem-se *rígidas*. Na situação especial  $s = 5$ , o núcleo de colisão é independente do comprimento da velocidade relativa, sendo

$$B(|v_r|, \cos \theta) = \beta(\cos \theta)$$

e as partículas chamam-se Maxwellianas. O modelo *esferas rígidas* corresponde formalmente ao caso em que  $s \rightarrow \infty$ , e o núcleo de colisão é simplesmente proporcional a  $|v_r|$ , com

$$B(|v_r|, \cos \theta) = c_4 |v_r|, \quad c_4 > 0.$$

No caso particular onde as partículas obedecem a um modelo de esferas rígidas ou a um modelo de corte angular, com  $\theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ , o termo  $Q(f, f)$  pode ser decomposto na forma (cf. [11])

$$Q(f, f) = Q_1(f, f) - Q_2(f, f), \quad (2.15)$$

onde

$$Q_1(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} B(|v_r|, \cos \theta) f' f'_* d\theta d\epsilon dv_* \quad (2.16)$$

representa o termo de “ganho” que descreve o aumento de partículas com velocidades  $v'$  e  $v'_*$  resultantes da colisão e

$$Q_2(f, f) = f \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} B(|v_r|, \cos \theta) f_* d\theta d\epsilon dv_* \quad (2.17)$$

representa o termo de “perda” que traduz a diminuição de partículas com velocidade  $v$ .

No caso mais geral, o núcleo de colisão  $B$  expressa-se em função da *secção eficaz de colisão*, (cf. [37], [91]),

$$S(|v_r|, \cos \theta) = \frac{1}{|v_r| \sin \theta} B(|v_r|, \cos \theta), \quad (2.18)$$

por forma que

$$B(|v_r|, \cos \theta) d\theta d\varepsilon = |v_r| S(|v_r|, \cos \theta) dn, \quad (2.19)$$

onde  $dn = \sin \theta d\theta d\varepsilon$  representa o elemento de superfície da semi-esfera unitária  $S_+^2$ .

Assim, substituindo (2.19) em (2.5) obtém-se outra forma do operador de colisão, muito utilizada na dinâmica dos gases, (cf. [11]),

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_+^2} B^*(|v_r|, \cos \theta) (f' f'_* - f f_*) dndv_*, \quad (2.20)$$

com

$$B^*(|v_r|, \cos \theta) = |v_r| S(|v_r|, \cos \theta). \quad (2.21)$$

Uma vez que as colisões são elásticas, o sistema (2.3) de quatro equações e seis incógnitas, tem duas soluções parametrizadas. Existem várias parametrizações das velocidades depois da colisão,  $v'$  e  $v'_*$ , em função das velocidades antes da colisão,  $v$  e  $v_*$ , que descrevem  $\mathbb{R}^3$  e, de um vetor unitário que percorre a esfera  $S^2$  (ou a semi-esfera), de acordo com a Figura 2.3.

- Uma representação conveniente dessas soluções, (cf. [37], [11]), e que se aplica a (2.20), é

$$\begin{cases} v' = v + ((v_* - v) \cdot n) n \\ v'_* = v_* - ((v_* - v) \cdot n) n \end{cases}, \quad (2.22)$$

onde  $n \in S_+^2$  é o vetor unitário na direção da linha dos ápsides que bissecta  $-v'_r$  e  $v_r$  e:

$$\cos \theta = \frac{(v - v_*) \cdot n}{|v - v_*|},$$

com  $(v - v_*) \cdot n \geq 0$ .

- Outra parametrização das velocidades de colisão, em função de um vetor unitário  $w \in S^2$ , paralelo ao vetor  $n \in S^2_+$ , é (cf. [53], [37]),

$$\begin{cases} v' = v + ((v_* - v) \cdot w) w \\ v'_* = v_* - ((v_* - v) \cdot w) w \end{cases}, \quad (2.23)$$

com

$$w = \frac{v' - v}{|v' - v|} \quad \text{e} \quad |\cos \theta| = |k \cdot w|, \quad \text{sendo} \quad k = \frac{(v - v_*)}{|v - v_*|}.$$

A parametrização (2.23) permite escrever, de forma equivalente a (2.20), o operador de colisão

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B^{**}(|v_r|, |\cos(\theta)|) (f' f'_* - f f_*) dw dv_*, \quad (2.24)$$

com

$$B^{**}(|v_r|, |\cos \theta|) = \frac{1}{2} B^*(|v_r|, \cos \theta). \quad (2.25)$$

- Uma outra representação muito frequente das velocidades é dada em função do vetor unitário  $\sigma \in S^2$ , (cf. [155], [24], [53], [56]),

$$\begin{cases} v' = \frac{v + v_*}{2} + \frac{|v - v_*|}{2} \sigma \\ v'_* = \frac{v + v_*}{2} - \frac{|v - v_*|}{2} \sigma \end{cases}, \quad (2.26)$$

onde  $\sigma = \frac{(v' - v'_*)}{|v' - v'_*|}$  e  $\cos(\chi) = k \cdot \sigma$  e, o operador de colisão, equivalente a (2.20) e a (2.24), tem a seguinte expressão

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B^{***}(|v_r|, \cos \chi) (f' f'_* - f f_*) d\sigma dv_*, \quad (2.27)$$

com

$$B^{***}(|v_r|, \cos \chi) = \frac{1}{2|\cos \theta|} B^{**}(|v_r|, |\cos \theta|) = \frac{1}{4|\cos \theta|} B^*(|v_r|, \cos \theta). \quad (2.28)$$

Atendendo ao facto dos vetores  $\sigma$  e  $w$  estarem relacionados por uma simples mudança de variável, (cf. [155], [24], [53], [56]):

$$\sigma = \frac{u}{|u|} - 2 \left( \frac{u}{|u|} \cdot w \right) w, \quad \text{com} \quad u = v_r, \quad (2.29)$$

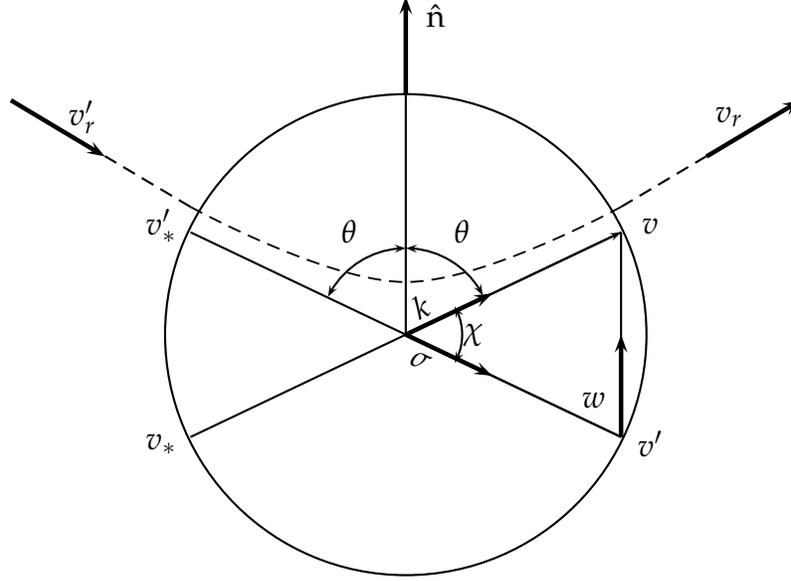


Figura 2.3. Outras representações de uma colisão binária.

a parametrização (2.23) obtém-se da parametrização (2.26), usando (2.29), isto é:

$$\begin{aligned}
 v' &= \frac{v + v_*}{2} + \frac{|v - v_*|}{2} \sigma = \frac{v + v_*}{2} + \frac{|v - v_*|}{2} \left( \frac{v - v_*}{|v - v_*|} - 2 \left( \frac{v - v_*}{|v - v_*|} \cdot w \right) w \right) \\
 &= \frac{v + v_*}{2} + \frac{v - v_*}{2} - ((v - v_*) \cdot w) w = v + ((v_* - v) \cdot w) w
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

e

$$\begin{aligned}
 v'_* &= \frac{v + v_*}{2} - \frac{|v - v_*|}{2} \sigma = \frac{v + v_*}{2} - \frac{|v - v_*|}{2} \left( \frac{v - v_*}{|v - v_*|} - 2 \left( \frac{v - v_*}{|v - v_*|} \cdot w \right) w \right) \\
 &= \frac{v + v_*}{2} - \frac{v - v_*}{2} + ((v - v_*) \cdot w) w = v_* - ((v_* - v) \cdot w) w.
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

Por outro lado, da mudança de variável (2.29), temos que:

$$\begin{aligned}
 \frac{v_r - |v_r| \sigma}{2} &= \frac{v_r - |v_r| \left( \frac{v_r}{|v_r|} - 2 \left( \frac{v_r}{|v_r|} \cdot w \right) w \right)}{2} \\
 &= \frac{v_r - v_r + 2((v_r \cdot w) w)}{2} = (v_r \cdot w) w
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

e

$$d\sigma = \left| -2 \left( \frac{v_r \cdot w}{|v_r|} \right) \right| dw = 2 |\cos(\theta)| dw, \tag{2.33}$$

pelo que, resulta a identidade para qualquer função  $\phi$  definida na esfera  $S^2$ , (cf. [24]),

$$\int_{S^2} \phi \left( \frac{v_r - |v_r|\sigma}{2} \right) d\sigma = \frac{2}{|v_r|} \int_{S^2} |v_r \cdot w| \phi((v_r \cdot w)w) dw. \quad (2.34)$$

Voltando à expressão (2.27) e usando a parametrização (2.26), obtém-se

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} \left[ f \left( \frac{v + v_*}{2} + \frac{|v - v_*|}{2} \sigma \right) f \left( \frac{v + v_*}{2} - \frac{|v - v_*|}{2} \sigma \right) - f(v)f(v_*) \right] \times B^{***}(|v_r|, \cos \chi) d\sigma dv_*. \quad (2.35)$$

Usando (2.30), (2.31), (2.34), e a relação

$$\cos(\chi) = \frac{v_r \cdot \sigma}{|v_r|} = 1 - 2|\cos \theta|^2, \quad (2.36)$$

na expressão (2.35), resulta a forma frequentemente usada para o operador de colisão (2.24)

$$\int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} [f(v_* - ((v_* - v) \cdot w)w) f(v + ((v_* - v) \cdot w)w) - f(v)f(v_*)] \times B^{**}(|v_r|, |\cos \theta|) dw dv_*, \quad (2.37)$$

com

$$B^{**}(|v_r|, |\cos \theta|) = |v - v_*| S(|v - v_*|, 1 - 2|\cos \theta|^2) 2|\cos \theta|,$$

ou seja,

$$B^{**}(|v_r|, |\cos \theta|) = 2|\cos \theta| B^{***}(|v_r|, |\cos \chi|),$$

de acordo com (2.28).

## 2.2 Grandezas macroscópicas

A equação de Boltzmann, na função incógnita  $f$ , conduz a uma descrição microscópica da dinâmica do gás, fornecendo informações detalhadas sobre o movimento das partículas. Todavia, numa grande parte dos problemas, esta descrição detalhada do gás é desnecessária e a informação de propriedades médias de  $f$  revela-se suficiente. Assim, desde que a função  $f$  seja conhecida, é possível obter o correspondente quadro macroscópico, introduzindo algumas grandezas médias a respeito das velocidades. Tais grandezas, ditas macroscópicas, possuem um carácter local, na medida em que são funções de  $(t, x)$ . Quando integradas relativamente às variáveis espaciais, obtêm-se informações de carácter global.

As grandezas macroscópicas mais importantes são as seguintes ( $V = \mathbb{R}^3$  representa o espaço das velocidades):

i) *densidade local*

$$n(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv, \quad (2.38)$$

que indica o número total (provável) de partículas por unidade de volume.

ii) *massa volúmica*

$$\rho(t, x) = mn(t, x) = n(t, x), \quad (2.39)$$

para  $m = 1$ ;

iii) *velocidade macroscópica local*

$$u(t, x) = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) v dv; \quad (2.40)$$

iv) *tensor das tensões IP, de componentes*

$$IP_{ij}(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} (v_i - u_i)(v_j - u_j) f(t, x, v) dv, \quad (2.41)$$

onde  $v = (v_i)$ ,  $u = (u_i)$  e  $i, j = 1, 2, 3$ ;

v) *pressão*

$$p(t, x) = \frac{1}{3}(IP_{11} + IP_{22} + IP_{33}); \quad (2.42)$$

vi) *fluxo de calor  $q$ , de componentes*

$$q_i(t, x) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |v - u|^2 (v_i - u_i) f(t, x, v) dv, \quad (2.43)$$

onde  $i = 1, 2, 3$ ;

vii) *energia interna por unidade de massa*

$$e(t, x) = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 f(t, x, v) dv; \quad (2.44)$$

viii) *temperatura absoluta*

$$T(t, x) = \frac{1}{3\rho} \int_{\mathbb{R}^3} |v - u|^2 f(t, x, v) dv; \quad (2.45)$$

ix) *energia total*

$$E(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 f(t, x, v) dv. \quad (2.46)$$

Das definições anteriores apenas treze grandezas, que intervêm na descrição macroscópica do gás, são independentes, ou sejam:  $\rho, u_1, u_2, u_3, IP_{11}, IP_{12}, IP_{13}, IP_{22}, IP_{23}, IP_{33}, q_1, q_2$  e  $q_3$ , uma vez que o tensor pressão é simétrico,  $IP_{ij} = IP_{ji}$ . A pressão, a energia interna e a temperatura absoluta não são grandezas independentes.

Para um gás monoatômico perfeito, verifica-se a seguinte relação

$$p = \frac{2}{3}\rho e, \quad (2.47)$$

designada *equação de estado* do gás que permite expressar qualquer das três quantidades  $p, \rho$  e  $e$ , em termos das duas restantes. A expressão (2.47) resulta das equações (2.42) e (2.44) e mostra que, para gases monoatômicos rarefeitos,  $\frac{p}{\rho}$  é constante a uma temperatura constante. Esta é a propriedade que identifica os gases monoatômicos rarefeitos como sendo gases perfeitos (ideais) obedecendo à lei de Boyle:

$$p = \rho \mathcal{R} T, \quad (2.48)$$

onde  $\mathcal{R}$  é uma constante (que depende da massa  $m = 1$ ) e que iremos considerar, sem perda de generalidade,  $\mathcal{R} = 1$ .

Além disso, para um gás monoatômico perfeito, das equações (2.47) e (2.48) (ou, (2.44) e (2.45)) resulta ainda a identidade

$$e = \frac{3}{2}T, \quad (2.49)$$

que expressa a *energia interna*  $e$  em função da temperatura  $T$ .

Note-se que a *energia total* (2.46) pode ser expressa por

$$E(t, x) = \rho \left( e + \frac{1}{2} |u|^2 \right) = \rho \left( \frac{3}{2} T + \frac{1}{2} |u|^2 \right). \quad (2.50)$$

## 2.3 Propriedades físicas do operador de colisão

Durante o processo de evolução o operador de colisão  $Q(f, f)$  preserva certas quantidades macroscópicas (massa, quantidade de movimento e energia) e satisfaz o teorema- $H$  de Boltzmann (cf. [37]).

### 2.3.1 Invariantes de colisão

Seja  $\varphi(v) \in C(\mathbb{R}^3)$  uma função teste arbitrária e considere-se o integral

$$I_\varphi = \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) Q(f, f) dv \quad (2.51)$$

definido sobre o espaço  $V = \mathbb{R}^3$  das velocidades, que representa a variação (local) devido às colisões do observável associado com  $\varphi(v)$ .

Considerando que o núcleo de colisão  $B(|v_r|, \cos \theta)$  é localmente integrável, isto é,  $B \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^3 \times S^2)$  e que  $f = f(v) \in C(\mathbb{R}^3)$ , substituindo a expressão de  $Q(f, f)$ , dada por (2.5), obtém-se:

$$I_\varphi = \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \varphi(v) B(|v_r|, \cos \theta) (f' f'_* - f f_*) d\theta d\epsilon dv_* dv. \quad (2.52)$$

Tendo em conta as propriedades de simetria do operador de colisão  $Q(f, f)$ , o integral  $I_\varphi$ , dado por (2.52), verifica a seguinte identidade (cf. [37]):

$$I_\varphi = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\varphi + \varphi_* - \varphi' - \varphi'_*) B(|v_r|, \cos \theta) (f' f'_* - f f_*) d\theta d\epsilon dv_* dv, \quad (2.53)$$

onde  $\varphi = \varphi(v)$ ,  $\varphi_* = \varphi(v_*)$ ,  $\varphi' = \varphi(v')$  e  $\varphi'_* = \varphi(v'_*)$ .

Uma função  $\varphi$  que verifique a condição

$$\varphi' + \varphi'_* = \varphi + \varphi_*, \quad (2.54)$$

é chamada *invariante de colisão* e, independentemente dos valores de  $f$ ,  $f'$ ,  $f_*$  e  $f'_*$ , tem-se

$$I_\varphi = \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) Q(f, f) dv = 0. \quad (2.55)$$

Assim,  $\varphi(v)$  está associada à conservação de uma determinada grandeza macroscópica durante a colisão entre duas partículas com velocidades, antes da colisão,  $v$  e  $v_*$  que adquirem velocidades, depois da colisão,  $v'$  e  $v'_*$ .

Equivalentemente (cf. [37]), uma função contínua  $\varphi(v)$  é um invariante de colisão (isto é, verifica (2.54)) se, e só se,

$$\varphi(v) = a + \vec{b} \cdot v + c |v|^2, \quad (2.56)$$

onde  $a$ ,  $b_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) e  $c$  são funções de  $t$  e  $x$ .

Em particular, as funções  $\varphi^{(i)}$ ,  $i = 0, 1, 2, 3, 4$ , são definidas por

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi^{(0)} = 1 \\ \varphi^{(1)} = v_1, \\ \varphi^{(2)} = v_2, \\ \varphi^{(3)} = v_3, \\ \varphi^{(4)} = \frac{1}{2} |v|^2, \end{array} \right. \quad (2.57)$$

e verificam a condição (2.54), pelo que são invariantes de colisão. Estes invariantes estão associados à conservação da massa, das três componentes de quantidade de movimento e da energia cinética, durante cada colisão. Pelo facto de  $\varphi(v)$  se poder escrever como combinação linear dos invariantes de colisão (2.57), estes são designados por *invariantes de colisão elementares*.

Destaca-se ainda o caso da função  $\varphi = \ln(f(v))$ . Considerando que  $f$  é uma função estritamente positiva, então verifica-se (cf. [37]) a seguinte inequação:

$$I_\varphi = \int_{\mathbb{R}^3} \ln f Q(f, f) dv \leq 0, \quad (2.58)$$

conhecida por *inequação de Boltzmann*.

Para provar (2.58) começamos por usar a identidade (2.53) com  $\varphi = \ln(f(v))$ . Assim, obtemos

$$I_\varphi = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\ln f + \ln f_* - \ln f' - \ln f'_*) B(|v_r|, \cos \theta) (f' f'_* - f f_*) d\theta d\epsilon dv_* dv, \quad (2.59)$$

ou ainda, rearranjando a última equação,

$$I_\varphi = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (f' f'_* - f f_*) \ln \left( \frac{f f_*}{f' f'_*} \right) B(|v_r|, \cos \theta) d\theta d\epsilon dv_* dv. \quad (2.60)$$

Aplicando agora a inequação elementar,

$$(z - y) \ln(y/z) \leq 0, \quad y, z \in \mathbb{R}^+, \quad (2.61)$$

com  $z = f' f'_*$  e  $y = f f_*$ , resulta

$$I_\varphi = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (f' f'_* - f f_*) \ln \left( \frac{f f_*}{f' f'_*} \right) B(|v_r|, \cos \theta) d\theta d\epsilon dv_* dv \leq 0. \quad (2.62)$$

Além disso, verifica-se a igualdade (2.58) se, e só se,  $\varphi = \ln(f(v))$  é uma invariante de colisão, ou equivalentemente,

$$f(v) = \exp(a + \vec{b} \cdot v + c |v|^2), \quad (2.63)$$

com  $a, b_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) e  $c$  funções de  $t$  e  $x$ .

Este resultado é uma consequência da igualdade (2.61) ocorrer se e só se  $(z - y) = 0$ , isto é,

$$f' f'_* = f f_*.$$

Multiplicando ambos os membros desta última equação, pela função logarítmica, obtém-se:

$$\ln f + \ln f_* = \ln f' + \ln f'_* \quad (2.64)$$

e, de acordo com a condição (2.54), a função  $\varphi = \ln(f(v))$  é uma invariante de colisão e  $f(v) = \exp(\varphi)$  é dada por (2.63).

### 2.3.2 Equação de Transporte

A equação de transporte associada a uma função  $\varphi(v)$  é obtida multiplicando ambos os membros da equação de Boltzmann (2.6) por uma função  $\varphi(v)$  e integrando sobre o espaço  $V = \mathbb{R}^3$  das velocidades, isto é,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) \left( \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f \right) dv = \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) Q(f, f) dv. \quad (2.65)$$

Como a função  $\varphi$  depende apenas de  $v$ , e o domínio de integração não depende nem de  $x$  nem de  $t$ , podem-se usar os seguintes resultados,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) \frac{\partial f}{\partial t} dv = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) f dv, \quad (2.66)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) v \cdot \nabla_x f dv = \nabla_x \cdot \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) f v dv, \quad (2.67)$$

a equação (2.65) resulta

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) f dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) f v dv = \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(v) Q(f, f) dv. \quad (2.68)$$

A equação (2.68) é conhecida por *equação de transporte* associada à função  $\varphi$ .

### 2.3.3 Equilíbrio Maxwelliano

Considerando as diferentes expressões da inequação de Boltzmann, (2.58) e (2.62)

$$I_\varphi = \int_{\mathbb{R}^3} \ln f Q(f, f) dv = \quad (2.69)$$

$$= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (f' f'_* - f f_*) \ln \left( \frac{f f_*}{f' f'_*} \right) B(|v_r|, \cos \theta) d\theta d\varepsilon dv_* dv \leq 0, \quad (2.70)$$

tem-se, pelo facto de o núcleo de colisão ser positivo, que as seguintes condições são equivalentes, (cf. [37]):

- (i)  $Q(f, f) = 0$ ;
- (ii)  $\int_{\mathbb{R}^3} \ln f Q(f, f) dv = 0$ ;
- (iii)  $f' f'_* = f f_*$ ;
- (iv)  $f(t, x, v) = \exp \left( a + \vec{b} \cdot v + c |v|^2 \right)$  com  $a(t, x)$ ,  $\vec{b}(t, x)$  e  $c(t, x)$ .

Introduzindo a expressão de  $f$ , dada pela condição (iv), nas definições (2.38), (2.40) e (2.45) de  $\rho$ ,  $u$  e  $T$ , é possível exprimir as funções  $a$ ,  $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)$  e  $c$ , em termos das quantidades macroscópicas  $\rho(t, x)$ ,  $u(t, x)$  e  $T(t, x)$ , resultando a função distribuição *Maxwelliana local* dada, na forma clássica por

$$f(t, x, v) = \mathcal{M}_{(\rho, u, T)}(t, x, v) = \frac{\rho(t, x)}{(2\pi T(t, x))^{3/2}} \exp \left( -\frac{|v - u(t, x)|^2}{2T(t, x)} \right). \quad (2.71)$$

Se  $\rho$ ,  $u_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) e  $T$  são constantes, então  $f(v) = \mathcal{M}_{(\rho, u, T)}(v)$  diz-se uma função *Maxwelliana global* sendo a sua expressão

$$f(v) = \mathcal{M}_{(\rho, u, T)}(v) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} \exp \left( -\frac{|v - u|^2}{2T} \right). \quad (2.72)$$

Diz-se que o gás se encontra em *estado de equilíbrio Maxwelliano* ou, mais simplesmente, *estado Maxwelliano*, somente no caso de  $f$  ser uma função *Maxwelliana global (absoluta)*.

### 2.3.4 Teorema-H de Boltzmann

Nas duas secções seguintes apresentamos alguns dos aspetos mais conhecidos da equação de Boltzmann.

Considere-se a função

$$\mathcal{H}(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} (\ln f) f dv, \quad (2.73)$$

designada por função- $\mathcal{H}$  de Boltzmann, e o seu fluxo total dado por

$$\phi_{\mathcal{H}}(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} (\ln f) f v dv. \quad (2.74)$$

Da equação (2.68) com  $\varphi(v) = \ln f$  e da inequação de Boltzmann (2.58), vem (cf. [36], [37])

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \vec{\nabla}_x \phi_{\mathcal{H}} = I_{(\ln f)} = \int_{\mathbb{R}^3} (\ln f) Q(f, f) dv \leq 0. \quad (2.75)$$

Suponha-se que o gás ocupa uma região  $\mathcal{R}$  do espaço físico e introduza-se a função- $H$ , apenas dependente do tempo, definida por

$$H(t) = \int_{\mathcal{R}} \mathcal{H}(t, x) dx \quad (2.76)$$

designada por função- $H$  (ou entropia) relativa à região  $\mathcal{R}$ .

Integrando a equação (2.75) sobre a região  $\mathcal{R}$  (suposta isolada) demonstra-se, (cf. [37], [38]), sob a hipótese de ser nulo o integral de superfície resultante da integração, que

$$\frac{dH}{dt} = \int_{\mathcal{R}} \int_{\mathbb{R}^3} (\ln f) Q(f, f) dv dx \leq 0, \quad (2.77)$$

isto é,

$$(i) \quad \frac{dH}{dt} \leq 0$$

$$(ii) \quad \frac{dH}{dt} = 0 \quad \text{se e somente se} \quad f' f'_* = f f_*. \quad (2.78)$$

O resultado (i) constitui a parte essencial do teorema de Boltzmann, que garante um comportamento monótono decrescente da função- $H$  para um certo valor mínimo, atingido quando  $f' f'_* = f f_*$  ou, equivalentemente, quando  $f$  é uma distribuição *Maxwelliana global* (2.72).

### 2.3.5 Irreversibilidade

É de realçar que a função  $H(t)$  utilizada nesta tese corresponde à entropia *matemática* (função monótona decrescente) por oposição à entropia *física*  $S(t)$  (que é monótona não

decrecente), uma vez que é uma medida da “desordem” de um sistema isolado, e que, em geral, aumenta ao longo do tempo. Isto é, se definirmos

$$S(t) = -k_B H(t), \text{ com } k_B \text{ constante de Boltzmann}$$

então

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{dH}{dt} \geq 0,$$

e isto não é mais do que a manifestação do segundo princípio da termodinâmica “A quantidade de entropia de qualquer sistema isolado termodinamicamente tende a incrementar-se com o tempo, até alcançar um valor máximo.”

Portanto, o comportamento da função- $H$  mostra que a equação de Boltzmann descreve um gás cujas partículas estão sujeitas a um processo de colisões que conduz a um *estado de equilíbrio Maxwelliano* que minimiza a função- $H$ :

$$\frac{dH}{dt} = 0. \quad (2.79)$$

Neste estado, a solução da equação de Boltzmann tende para uma distribuição *Maxwelliana global*, na forma (2.72), e o processo é irreversível.

### 2.3.6 Equações de Conservação

As equações de conservação local na sua formulação clássica (cf. [36]) são obtidas a partir da equação de transporte (2.68) associadas, respetivamente, aos invariantes de colisão elementares (2.57). Por um lado, é possível exprimir os integrais que figuram nos primeiros membros das equações (2.68) em termos das grandezas macroscópicas introduzidas, utilizando as definições (2.38) - (2.46). Por outro, da definição de invariante de colisão tem-se que  $I_{\varphi^{(j)}} = 0$  para  $j = 0, 1, 2, 3, 4$  e, conseqüentemente o segundo membro das equações (2.68) será nulo. Resulta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}_x(\rho u) = 0, \quad (2.80)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \text{div}_x(\rho u \otimes u) + \nabla_x \text{IP} = 0, \quad (2.81)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \frac{1}{2} |u|^2 + e \right) \right] + \text{div}_x \left[ \rho u \left( \frac{1}{2} |u|^2 + e \right) + \text{IP} \cdot u + q \right] = 0. \quad (2.82)$$

A equação escalar (2.80) traduz a conservação da massa  $\rho$ , a equação vetorial (2.81) exprime a conservação da quantidade de movimento  $\rho u$  e a equação escalar (2.82) traduz a conservação da energia  $\rho E$ .

Estas equações são as equações de base da mecânica de meios contínuos que intervêm na descrição macroscópica da dinâmica de um gás ou, mais geralmente, de um fluido.

No entanto, o sistema formado por estas cinco equações diferenciais não é fechado, uma vez que envolvem as treze variáveis independentes  $\rho, u_1, u_2, u_3, IP_{11}, IP_{12}, IP_{13}, IP_{22}, IP_{23}, IP_{33}, q_1, q_2, q_3$ , sendo necessário considerar relações entre  $IP_{ij}$  e  $q_i$  em termos de  $\rho, u_i$  e  $e$ . Estas relações macroscópicas oportunas, chamadas *equações constitutivas*, tornam (em geral) o sistema fechado, responsável pela descrição macroscópica da dinâmica de fluídos.

Em particular, no caso de um fluido ser ideal, isto é, em que os efeitos da viscosidade e da condutividade térmica podem ser desprezados, as *equações constitutivas* são (cf. [37], Cap. II, Sec. 8)

$$IP_{ij} = p\delta_{ij}, \quad (2.83)$$

e

$$q_i = 0, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (2.84)$$

onde  $\delta_{ij}$  representa o símbolo de Kronecker e  $p$  é a pressão (2.42). Após a substituição das *equações constitutivas* (2.84) no sistema anterior, as incógnitas são  $\rho, u_1, u_2, u_3, p$  e  $e$ . Contudo, as quantidades  $\rho, p$  e  $e$  não são independentes e estão relacionadas pelas *equações de estado*.

No caso de um gás monoatômico perfeito, e escolhendo a densidade  $\rho$  e a temperatura  $T$  como variáveis termodinâmicas independentes, as equações de estado são, conforme as equações (2.48) e (2.49),

$$p = \rho T \quad \text{e} \quad e = \frac{3}{2}T. \quad (2.85)$$

Assim, substituindo ainda (2.48) e (2.49) no sistema anterior, obtém-se um sistema fechado de 5 equações diferenciais parciais para 5 incógnitas escalares:  $\rho, u_1, u_2, u_3$  e  $T$ .

As equações de conservação resultantes são portanto auto-suficientes, designadas por *equações de Euler Compressíveis*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}_x (\rho u) = 0, \quad (2.86)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \operatorname{div}_x (\rho u \otimes u) + \nabla_x (\rho T) = 0, \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \left( \frac{1}{2} |u|^2 + \frac{3}{2} T \right) \right) + \operatorname{div}_x \left( \rho u \left( \frac{1}{2} |u|^2 + \frac{5}{3} T \right) + p u \right) = 0. \quad (2.88)$$

De observar que foi considerado que a força  $\vec{F} = 0$ , pelo que (2.86 - 2.88) é um sistema de leis de conservação hiperbólico.

No caso de um fluido obedecer ao modelo de Navier-Stokes-Fourier, tem-se (cf. [37], Cap. II, Sec. 8)

$$\mathbb{P}_{ij} = p \delta_{ij} - \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (2.89)$$

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.90)$$

As equações constitutivas (2.89) e (2.90) representam, respetivamente, as leis de Navier-Stokes e de Fourier para um fluido viscoso e condutor de calor. Nestas equações,  $\mu$  e  $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$  são os coeficientes de viscosidade e  $\kappa$  é o coeficiente de condutividade térmica.

### Comentários finais:

A equação de Boltzmann é uma das mais famosas equações da teoria cinética. Boltzmann, na sua dedução, assume algumas hipóteses simplificativas da realidade física, renuncia ao estudo do comportamento de um gás em termos do movimento detalhado das moléculas que o constituem, e utiliza probabilidades. Em particular, analisa a função  $f(t, x, v)$  de distribuição de velocidades das moléculas e estabelece a equação de evolução de um gás monoatômico rarefeito, no tempo e no espaço. Através de algumas médias da função incógnita  $f$ , a respeito da velocidade, chamadas grandezas macroscópicas, obtém-se informação ao nível macroscópico. As propriedades do operador de colisão são muito importantes. Por um lado, durante o processo de evolução o operador de colisão  $Q(f, f)$  preserva as quantidades macroscópicas da massa, da

quantidade de movimento e da energia. Por outro, o gás encontra-se num estado de *equilíbrio Maxwelliano* somente no caso de  $f$  ser uma função *Maxwelliana* global, ou, equivalentemente, o operador de colisão  $Q(f, f) = 0$ . Além disso, a equação de Boltzmann satisfaz o teorema- $H$ , que garante o comportamento monótono decrescente da função- $H$ . O valor mínimo desta função é atingido quando o gás se encontra num estado de *equilíbrio Maxwelliano*. Por sua vez, neste estado o processo é irreversível.

Para um estudo mais detalhado da equação de Boltzmann e das suas aplicações, consultar [37], que constitui uma das obras mais completas sobre este tema, ou obras mais recentes tais como [182], [81].



## Capítulo 3

# Limites hidrodinâmicos da equação de Boltzmann

Neste capítulo vamos centrar-nos na análise assintótica da equação de Boltzmann, também designada por limites hidrodinâmicos da teoria cinética dos gases. Descrevem-se como as equações mais importantes da dinâmica de fluídos, tais como as equações de Euler e de Navier-Stokes que podem ser obtidas a partir da equação de Boltzmann, usando expansões assintóticas com procedimentos de escala. Este capítulo encontra-se estruturado conforme se descreve de seguida. Na secção 3.1 apresentam-se os limites hidrodinâmicos e outras escalas. Na secção 3.2 descreve-se a equação de Boltzmann adimensional. Na secção 3.3, apresentam-se as equações de Euler compressíveis, primeiro através de um processo de escala-tempo e depois através da expansão assintótica de Hilbert. Na secção 3.4 deduzem-se as equações de Navier-Stokes compressíveis através da expansão assintótica de Chapman-Enskog. Na secção 3.5 deduzem-se as equações de Navier-Stokes incompressíveis através de um procedimento de escala-tempo. Por último, na secção 3.6, obtêm-se as equações de Euler incompressíveis através de um procedimento de escala-tempo.

### 3.1 Limites Hidrodinâmicos e Outras Escalas

O principal objetivo desta secção é apresentar os limites hidrodinâmicos da equação de Boltzmann no âmbito de soluções clássicas. Um sistema em que a escala de referência é grande, pode ser, mais convenientemente, descrito em termos das equações da dinâmica de fluídos quando é considerada uma escala tempo-espaco aceitável.

Na descrição cinética, descrição intermédia entre as escalas microscópica e macroscópica,

a evolução no tempo da função de distribuição de velocidades  $f(t, x, v)$  é dada, para um gás rarefeito, pela equação de Boltzmann. Numa descrição macroscópica completa, apropriada para fluídos, a evolução no tempo é dada em termos dos cinco campos hidrodinâmicos  $\rho$ ,  $\rho u$  e  $\rho E$ , conservados localmente. A evolução no tempo dessas cinco quantidades é geralmente considerada como sendo dada pelas equações de Navier-Stokes compressíveis, ou uma aproximação delas, como por exemplo, equações de Euler, equações de Navier-Stokes incompressíveis, equação de Boussinesq, etc.. Na dedução das equações hidrodinâmicas a partir da equação de Boltzmann, para gases rarefeitos, as cinco quantidades são obtidas a partir de  $f$ , do que resulta

$$\begin{aligned}\rho(t, x) &= \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv, \\ \rho u(t, x) &= \int_{\mathbb{R}^3} v f(t, x, v) dv, \\ \rho E(t, x) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v|^2}{2} f(t, x, v) dv,\end{aligned}$$

e dos cinco invariantes de colisão elementares  $\varphi^{(i)}$ ,  $i = 1, 2, 3, 4, 5$ , na expressão (2.57). Mas, apesar do operador de colisão de Boltzmann  $Q(f, f)$  conservar todas estas últimas quantidades, isto não conduz a um sistema fechado. Isto é, nas equações de conservação local da massa, da quantidade de movimento e da energia surgem momentos de  $f$  de ordem mais elevada (na velocidade) que não dependem de  $\rho$ ,  $u$  e  $E$ . É o conhecimento destes momentos de  $f$  que conduz a um sistema fechado autónomo.

O problema de obtenção (ou fecho) pode ser tratado através de vários procedimentos. Os métodos de expansão de Hilbert e de Chapman-Enskog são os mais utilizados. Ambos assumem o facto de que a variação espacial de  $f$  e, portanto, de  $\rho$ ,  $\rho u$  e  $\rho E$ , ser lenta na escala “caminho livre médio”. Introduce-se explicitamente um parâmetro de escala espacial  $\varepsilon$  e controla-se o resto da expansão quando  $\varepsilon$  é pequeno. Assim, obteremos diferentes equações hidrodinâmicas de acordo com as escalas de tempo e outras circunstâncias consideradas. Então, para tempos da ordem  $\varepsilon^{-1}$  os campos hidrodinâmicos  $\rho$ ,  $\rho u$  e  $\rho E$  satisfazem as equações de Euler, enquanto que, para tempos da ordem  $\varepsilon^{-2}$  eles satisfazem as equações de Navier-Stokes incompressíveis.

## 3.2 A equação de Boltzmann adimensional

Os fluxos são caracterizados por várias quantidades adimensionais. A mais útil aos nossos propósitos, a análise assintótica ou limites hidrodinâmicos, é o *número de*

*Knudsen Kn*. Esta quantidade adimensional é definida como  $Kn = \frac{\lambda}{L}$ , onde  $\lambda$  é o *caminho livre médio* molecular e  $L$  é a escala de comprimento característica do sistema físico. O grau de rarefação de um gás é geralmente expresso através do número de Knudsen. Números de Knudsen pequenos correspondem a um gás suficientemente denso, e a hipótese do *continuum* é considerada válida, enquanto que, os números de Knudsen grandes correspondem a um fluxo onde as partículas têm um pequeno número de iterações entre si. Por conseguinte, o conceito de continuidade da matéria no campo de escoamento só é válida no limite

$$Kn \rightarrow 0.$$

Por outro lado, o limite

$$Kn \rightarrow \infty$$

corresponde a um fluxo molecular livre, isto é, onde as partículas não têm qualquer interação entre si.

Outras quantidades adimensionais, igualmente importantes, que caracterizam um fluxo são (*cf.* [36]):

- o *número de Mach* que é dado pela razão entre a velocidade de massa típica  $U$  e a velocidade do som  $c$

$$Ma = \frac{U}{c}.$$

- o *número de Reynolds*

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu},$$

sendo  $\mu$  o coeficiente de viscosidade.

- o *número de Strouhal* que é assumido ser igual a 1

$$Sh = 1.$$

Além disso, os números  $Kn$ ,  $Ma$  e  $Re$  estão relacionados entre si, através da denominada relação de *Von Kármán*

$$Kn = \frac{Ma}{Re}.$$

Considere-se a equação de Boltzmann adimensional

$$Ma \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{Kn} Q(f, f). \quad (3.1)$$

No que se segue o limite  $Kn = \varepsilon \rightarrow 0$  será considerado em dois casos diferentes (cf. Figura 3.1):

(1)  $Ma \sim 1$  e  $Kn = \varepsilon \rightarrow 0$

A equação de Boltzmann adimensional (3.1) assume a forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{Kn} Q(f, f),$$

ou, de forma equivalente e mais usual,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f, f). \quad (3.2)$$

O comportamento assintótico da equação anterior no limite (1) conduz ao estudo da dinâmica de um fluido compressível.

Por um lado, em muitas situações da dinâmica de gases, o gás pode ser tratado como uma massa contínua de fluido desde que a hipótese de continuidade seja considerada. Neste caso, como  $Kn$  é um número muito pequeno a hipótese de continuidade é válida. Por outro lado, a viscosidade está relacionada com o parâmetro  $Re$ . Neste caso, pela relação de *Von Kármán*, temos que  $Re = \frac{1}{\varepsilon}$ .

(2)  $Ma = Kn = \varepsilon \rightarrow 0$

Neste limite a equação de Boltzmann adimensional (3.1) é da forma

$$\varepsilon \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f, f). \quad (3.3)$$

O comportamento assintótico da equação anterior, no limite (2), será estudado para a dinâmica de fluidos incompressível, uma vez que a viscosidade é finita  $Re = 1$ .

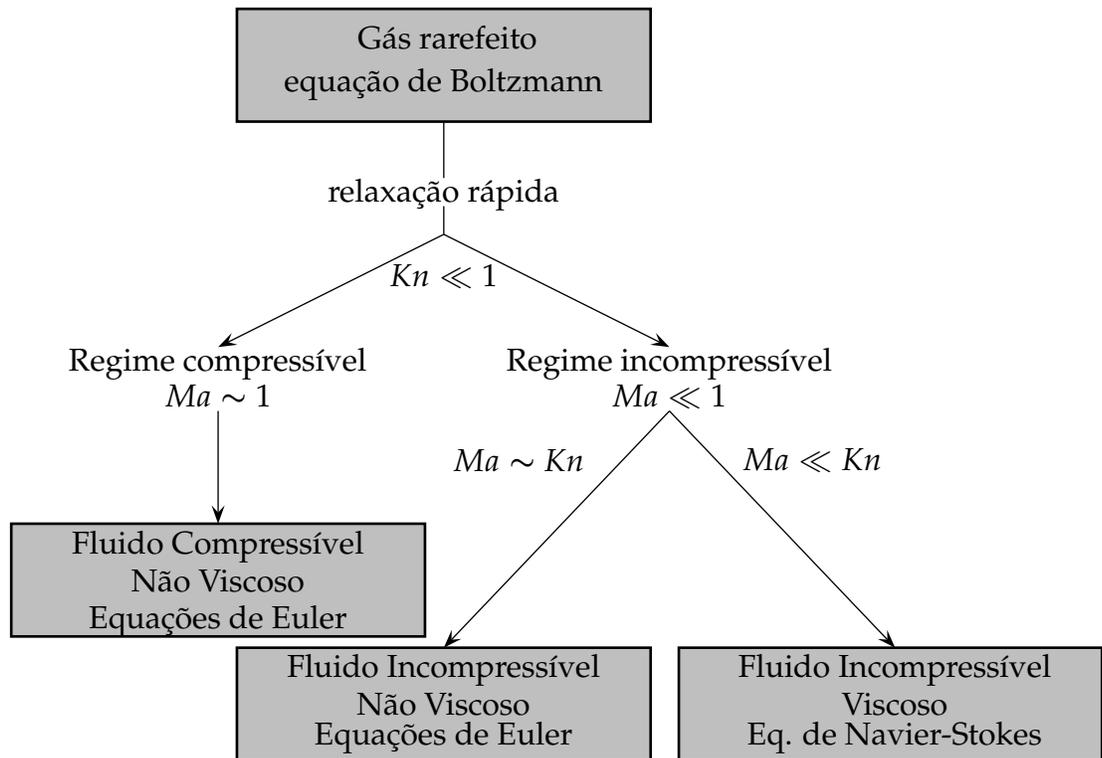


Figura 3.1. Aproximações hidrodinâmicas da equação de Boltzmann.

### 3.3 Equações de Euler compressíveis

As equações de Euler compressíveis podem ser obtidas, pelo menos formalmente, a partir da equação de Boltzmann através da análise das propriedades de escala tempo-espaco.

Seja  $\varepsilon$  a razão entre as unidades de espaco microscópico e macroscópico (usualmente chamado número de Knudsen). Mostra-se (cf. [149], [33], [179], [38]) que as densidades conservadas, observadas no tempo microscópico da ordem  $\varepsilon^{-1}$ , convergem, quando  $\varepsilon = Kn \rightarrow 0$ , para campos macroscópicos cujo tempo de evolução é dado pela solução das equações de Euler (pelo menos quando estas têm uma solução suave). Esta dedução das equações de Euler, no limite de escala hidrodinâmico de Euler, é consistente com o facto das equações de Euler serem invariantes sob a escala uniforme do espaco e do tempo, isto é, com a mudança de variável  $t \mapsto \varepsilon^{-1}t$  e  $x \mapsto \varepsilon^{-1}x$ . Uma dedução rigorosa pode ser encontrada em Caflish [33].

Começemos por introduzir as mudanças de variável, e sejam

$$\tau = \varepsilon^{-1}t \quad (3.4)$$

e

$$q = \varepsilon^{-1}x, \quad (3.5)$$

as variáveis tempo e espaço microscópicas ( $t$  e  $x$  são as variáveis macroscópicas), respetivamente, tal que

$$f(\tau, q, v) \equiv f(\varepsilon^{-1}t, \varepsilon^{-1}x, v) = f^\varepsilon(t, x, v). \quad (3.6)$$

Se  $f$  satisfaz a equação de Boltzmann, nas variáveis microscópicas,

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + v \cdot \nabla_q f = Q(f, f), \quad (3.7)$$

então,  $f^\varepsilon$  é solução da equação adimensional

$$\frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} Q(f^\varepsilon, f^\varepsilon). \quad (3.8)$$

Para  $\varepsilon$  fixo, sejam as quantidades macroscópicas densidade, velocidade e energia, respetivamente, definidas através dos momentos de  $f^\varepsilon$

$$\begin{aligned} \rho^\varepsilon &= \int_{\mathbb{R}^3} f^\varepsilon dv, \\ \rho^\varepsilon u^\varepsilon &= \int_{\mathbb{R}^3} v f^\varepsilon dv, \\ \rho^\varepsilon E^\varepsilon &= \rho^\varepsilon \left( \frac{|u^\varepsilon|^2}{2} + e^\varepsilon \right) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v|^2}{2} f^\varepsilon dv. \end{aligned}$$

Uma vez que  $1$ ,  $v$  e  $\frac{|v|^2}{2}$  são os invariantes de colisão elementares (2.57) é de esperar que  $\rho^\varepsilon$ ,  $u^\varepsilon$  e  $E^\varepsilon$  satisfaçam as equações de conservação local

$$\partial_t \left( \int_{\mathbb{R}^3} f^\varepsilon dv \right) + \vec{\nabla}_x \cdot \left( \int_{\mathbb{R}^3} v f^\varepsilon dv \right) = 0, \quad (3.9)$$

$$\partial_t \left( \int_{\mathbb{R}^3} v f^\varepsilon dv \right) + \vec{\nabla}_x \cdot \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \otimes v f^\varepsilon dv \right) = 0, \quad (3.10)$$

$$\partial_t \left( \int_{\mathbb{R}^3} |v|^2 f^\varepsilon dv \right) + \vec{\nabla}_x \cdot \left( \int_{\mathbb{R}^3} v |v|^2 f^\varepsilon dv \right) = 0. \quad (3.11)$$

Isto é, substituindo  $\rho^\varepsilon$ ,  $u^\varepsilon$  e  $E^\varepsilon$  nas equações anteriores, obtém-se

$$\begin{aligned}\partial_t \rho^\varepsilon + \vec{\nabla}_x \cdot (\rho^\varepsilon u^\varepsilon) &= 0, \\ \partial_t (\rho^\varepsilon u^\varepsilon) + \vec{\nabla}_x \cdot \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \otimes v f^\varepsilon dv \right) &= 0, \\ \partial_t \left( \rho^\varepsilon \left( e^\varepsilon + \frac{|u^\varepsilon|^2}{2} \right) \right) + \vec{\nabla}_x \cdot \left( \int_{\mathbb{R}^3} v |v|^2 f^\varepsilon dv \right) &= 0.\end{aligned}$$

Contudo, estas equações não formam um sistema fechado pois é necessário o conhecimento de momentos de  $f^\varepsilon$  de ordem superior. Em particular é necessário o terceiro momento

$$\int_{\mathbb{R}^3} v |v|^2 f^\varepsilon dv,$$

que não é função das quantidades macroscópicas  $\rho^\varepsilon$ ,  $u^\varepsilon$  e  $E^\varepsilon$ , depende, em geral, de toda a distribuição  $f^\varepsilon(t, x, v)$ .

A partir da equação (3.8) é esperado, do ponto de vista formal, que (cf. [38])

$$\varepsilon \left( \frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon \right) \longmapsto 0 \quad \text{quando } \varepsilon \longmapsto 0$$

e, se

$$f^\varepsilon \longmapsto f^0,$$

então o limite  $f^0$  deve satisfazer

$$Q(f^0, f^0) = 0.$$

A última condição, como foi explicado na subsecção 2.3.3 em que as condições (i) e (iv) são equivalentes), implica que  $f^0$  é uma Maxwelliana local, na forma (2.71),

$$f^0(t, x, v) = \mathcal{M}_{(\rho, u, T)}(t, x, v) = \frac{\rho(t, x)}{(2\pi T(t, x))^{3/2}} \exp \left( -\frac{|v - u(t, x)|^2}{2T(t, x)} \right).$$

As grandezas macroscópicas  $\rho$ ,  $u$  e  $T$  variam lentamente nas escalas tempo-espaço típicas de um gás descrito pela equação de Boltzmann. Além disso, caracterizam o comportamento da Maxwelliana local  $\mathcal{M}$ , no tempo e no espaço

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{M} dv,$$

$$u = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} v \mathcal{M} dv,$$

$$E = \rho \left( \frac{|u|^2}{2} + e \right) = \rho \left( \frac{|u|^2}{2} + \frac{3}{2} T \right) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v|^2}{2} \mathcal{M} dv.$$

É esperado que  $\rho$ ,  $u$  e  $T$  evoluam de acordo com as equações da dinâmica de fluídos e, portanto, a partir das leis de conservação, com  $f^0 = \mathcal{M}$ , temos que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi^{(i)} Q(\mathcal{M}, \mathcal{M}) dv = 0, \quad i = 0, 1, \dots, 4,$$

onde  $\varphi^{(0)} = 1$ ,  $\varphi^{(i)} = v_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , e  $\varphi^{(4)} = \frac{|v|^2}{2}$  são os invariantes de colisão elementares (2.57). Consequentemente,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi^{(i)} (\partial_t \mathcal{M} + v \cdot \nabla_x \mathcal{M}) dv = 0, \quad i = 0, 1, \dots, 4, \quad (3.12)$$

ou seja,

$$\partial_t \left( \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{M} dv \right) + \vec{\nabla}_x \cdot \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \mathcal{M} dv \right) = 0, \quad (3.13)$$

$$\partial_t \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \mathcal{M} dv \right) + \vec{\nabla}_x \cdot \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \otimes v \mathcal{M} dv \right) = 0, \quad (3.14)$$

$$\partial_t \left( \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v|^2}{2} \mathcal{M} dv \right) + \vec{\nabla}_x \cdot \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \frac{|v|^2}{2} \mathcal{M} dv \right) = 0. \quad (3.15)$$

Substituindo as grandezas macroscópicas  $\rho$ ,  $u$  e  $E$ , da função  $\mathcal{M}$ , nas equações anteriores, temos

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}_x (\rho u) = 0, \quad (3.16)$$

$$\partial_t (\rho u) + \operatorname{div}_x \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \otimes v \mathcal{M} \right) = 0, \quad (3.17)$$

$$\partial_t \left( \rho \left( \frac{|u|^2}{2} + e \right) \right) + \operatorname{div}_x \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \frac{|v|^2}{2} \mathcal{M} dv \right) = 0. \quad (3.18)$$

Se agora usarmos a identidade elementar, (cf.[36]),

$$\int_{\mathbb{R}^3} (v_i - u_i)(v_j - u_j) \mathcal{M} dv = \delta_{ij} \rho T \quad (3.19)$$

resulta que

$$\operatorname{div}_x \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \otimes v \mathcal{M} \right) = \operatorname{div}_x (\rho u \otimes u) + \partial_x p, \quad (3.20)$$

com a pressão  $p = \rho T$  obedecendo à lei dos gases perfeitos ( $e = \mathcal{R}T$ ).

Utilizando ainda a identidade elementar (cf.[36]),

$$\int_{\mathbb{R}^3} (v - u)(v - u)^2 \mathcal{M} dv = 0, \quad (3.21)$$

obtemos,

$$\operatorname{div}_x \left( \int_{\mathbb{R}^3} v \frac{|v|^2}{2} \mathcal{M} dv \right) = \operatorname{div}_x \left( \rho u \left( \frac{|u|^2}{2} + e \right) \right) + \operatorname{div}_x(pu). \quad (3.22)$$

Substituindo (3.20) na equação (3.17), bem como (3.22) na equação (3.18), obtemos o sistema de equações que expressam a conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}_x(\rho u) = 0, \quad (3.23)$$

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}_x \left( \rho u \otimes u + \frac{2}{3} \rho e \right) = 0, \quad (3.24)$$

$$\partial_t \left( \rho \left( \frac{|u|^2}{2} + e \right) \right) + \operatorname{div}_x \left( \rho u \left( \frac{|u|^2}{2} + \frac{5}{3} e \right) \right) = 0. \quad (3.25)$$

Estas três últimas equações, complementadas com a equação de estado para um gás perfeito,  $e = \frac{3}{2}T$ , representam o sistema de equações de Euler para um fluido compressível, no caso de um gás monoatômico perfeito.

Para funções suaves, um modo equivalente de escrever as equações de Euler em termos dos campos macroscópicos  $\rho$ ,  $u$  e  $T$  é

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}_x(\rho u) = 0, \quad (3.26)$$

$$\partial_t u + \left( u \cdot \vec{\nabla}_x \right) u + \frac{1}{\rho} \vec{\nabla}_x p = 0, \quad (3.27)$$

$$\partial_t T + \left( u \cdot \vec{\nabla}_x \right) T + \frac{2}{3} T \vec{\nabla}_x \cdot u = 0. \quad (3.28)$$

Estas equações descrevem a conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia da função Maxwelliana  $\mathcal{M}$ .

Uma justificação mais precisa pode ser dada através dos métodos, para limites hidrodinâmicos, baseados em expansões assintóticas. Todos estes métodos procuram soluções da equação de Boltzmann adimensional como séries de potências formais em  $\varepsilon$ , quando  $\varepsilon = Kn \rightarrow 0$ .

Hilbert [109] propôs a famosa *expansão de Hilbert* como um exemplo da teoria de transformações lineares. Partindo da solução  $f^\varepsilon$  como uma série de potências formal em  $\varepsilon$ , dada por

$$f^\varepsilon(t, x, v) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k f_k(t, x, v), \quad (3.29)$$

com funções escalares  $f_k$ , independentes de  $\varepsilon$ , que são suaves em  $(t, x, v)$  e que decaiem rapidamente quando  $|v| \rightarrow +\infty$ , tenta encontrar as funções  $f_k$ ,  $k \geq 0$ , impondo que a equação adimensional (3.8)

$$\frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} Q(f^\varepsilon, f^\varepsilon),$$

seja satisfeita para cada ordem  $\varepsilon$ . Assim, inserindo a série formal (3.29) na equação anterior e igualando os termos da mesma ordem em  $\varepsilon$ , obtemos (cf. [37])

$$\sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \left( \frac{\partial f_{k-1}}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f_{k-1} \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k Q_k,$$

com

$$Q_k = 2Q(f_0, f_k) + \sum_{n=1}^{k-1} Q(f_n, f_{k-n}), \quad k \geq 1. \quad (3.30)$$

Em consequência temos

$$Q_0 = Q(f_0, f_0) = 0$$

e

$$\frac{\partial f_{k-1}}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f_{k-1} = Q_k, \quad k \geq 1.$$

A última equação

$$\frac{\partial f_{k-1}}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f_{k-1} = 2Q(f_0, f_k) + \sum_{n=1}^{k-1} Q(f_n, f_{k-n}), \quad k \geq 1$$

pode ser escrita por forma a realçar o operador relevante que atua sobre  $f_k$ ,

$$2Q(f_0, f_k) = D_t f_{k-1} - \sum_{n=1}^{k-1} Q(f_n, f_{k-n}), \quad k \geq 1, \quad (3.31)$$

com

$$D_t(\cdot) = (\partial_t + v \cdot \nabla_x)(\cdot).$$

De acordo com este resultado, formulam-se as seguintes condições, que podem ser resolvidas recursivamente:

$$\varepsilon^0 : \quad Q(f_0, f_0) = 0, \quad (3.32)$$

$$\varepsilon^1 : \quad 2Q(f_0, f_1) = D_t f_0 = R_0, \quad (3.33)$$

$$\varepsilon^2 : \quad 2Q(f_0, f_2) = D_t f_1 - Q(f_1, f_1) = R_1,$$

⋮

$$\varepsilon^k : \quad 2Q(f_0, f_k) = R_{k-1}(f_0, f_1, \dots, f_{k-1}),$$

onde

$$R_{k-1}(f_0, f_1, \dots, f_{k-1}) = D_t f_{k-1} - \sum_{n=1}^{k-1} Q(f_n, f_{k-n}).$$

Introduza-se o espaço de Hilbert  $L^2_{\mathcal{M}}(\mathbb{R}^3, \mathcal{M}dv)$ , das funções mensuráveis em  $\mathbb{R}^3$ , com o produto interno definido por

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} f(v) g(v) \mathcal{M}(v) dv, \quad (3.34)$$

onde  $\mathcal{M} = \mathcal{M}_{(\rho, u, T)}(t, x, v)$  é uma função Maxwelliana local (2.71), e com norma  $\|g\| = (\langle g, g \rangle)^{1/2}$ .

Considere-se ainda  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}$  o operador de colisão de Boltzmann linearizado em torno de  $\mathcal{M}$  que, por definição, é dado por (cf. [37], [38], [123], [81])

$$\mathcal{L}_{\mathcal{M}}h = -2\mathcal{M}^{-1}Q(\mathcal{M}, \mathcal{M}h) \quad (3.35)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} (h + h_* - h' - h'_*) B(|v_r|, \cos w) \mathcal{M}(v_*) dw dv_*. \quad (3.36)$$

Para qualquer função  $h \in L^2_{\mathcal{M}}$ , o espaço nulo de  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}$  é o espaço gerado pelos invariantes de colisão elementares (2.57), ou de forma equivalente, pelas combinações lineares dos invariantes de colisão elementares na forma (2.56),

$$\mathcal{N}(\mathcal{L}_{\mathcal{M}}) = \left\{ h : h = \sum_{i=0}^4 c_i \varphi^{(i)}, \quad c_i \in \mathbb{R} \right\}.$$

O operador  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}$  é auto-adjunto,

$$\langle g, \mathcal{L}_{\mathcal{M}}h \rangle = \langle \mathcal{L}_{\mathcal{M}}g, h \rangle, \quad g, h \in D_{\mathcal{L}_{\mathcal{M}}}, \quad (3.37)$$

não positivo,

$$\langle h, \mathcal{L}_{\mathcal{M}}h \rangle \leq 0, \quad h \in D_{\mathcal{L}_{\mathcal{M}}},$$

e a igualdade verifica-se se e só se  $h$  é uma invariante de colisão. Isto é, se  $h$  é uma invariante de colisão, de acordo com (2.56),  $h'_* + h' - h_* - h = 0$ , e então a equação (3.36) vem

$$\mathcal{L}_{\mathcal{M}}h = 0. \quad (3.38)$$

Reciprocamente, se multiplicarmos escalarmente esta última equação por  $h$ , obtemos

$$\langle h, \mathcal{L}_{\mathcal{M}}h \rangle = 0.$$

Uma outra propriedade adicional de  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}$ , que é uma consequência do facto das invariantes de colisão elementares  $\varphi^{(i)}$ ,  $i = 0, 1, \dots, 4$ , verificarem

$$\mathcal{L}_{\mathcal{M}}\varphi^{(i)} = 0, \quad (3.39)$$

e da equação (3.37), é

$$\langle \varphi^{(i)}, \mathcal{L}_{\mathcal{M}}h \rangle = 0, \quad h \in D_{\mathcal{L}_{\mathcal{M}}}, \quad (3.40)$$

conhecida por *condições de ortogonalidade*.

Uma outra propriedade muito importante do operador de Fredholm  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}$  é que ele satisfaz a *alternativa de Fredholm*. Existem vários resultados sobre esta propriedade, e eles diferem entre si, de acordo com a escolha de diferentes núcleo de colisão  $B(|v_r|), \cos \chi$ . O primeiro resultado foi dado por Hilbert ([109], para o caso esferas rígidas (2.14), como um exemplo de aplicação da sua teoria. Depois da introdução da hipótese de corte angular de Grad (2.12), núcleos de colisão mais gerais foram considerados com esta hipótese. Por exemplo, Grad ([88]) mostrou que  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}$  tem uma propriedade de Fredholm em  $L^2_{\mathcal{M}}(\mathbb{R}^3, \mathcal{M}dv)$  para o caso em que  $B$  satisfaz a hipótese de interrupção rígida (2.13), e posteriormente, outros autores generalizaram este resultado ao caso de  $B$  satisfazer a hipótese de interrupção débil. No seguimento deste capítulo, vamos considerar principalmente a hipótese de interrupção rígida.

Consideremos a seguinte equação, (cf. [80]),

$$\mathcal{L}_{\mathcal{M}}h = g, \quad g \in L^2_{\mathcal{M}}(\mathbb{R}^3, \mathcal{M}dv). \quad (3.41)$$

A equação anterior verifica a *alternativa de Fredholm* se  $g \perp \mathcal{N}(\mathcal{L}_{\mathcal{M}})$ , e neste caso tem uma solução única, ou se  $g \notin \mathcal{N}(\mathcal{L}_{\mathcal{M}})$ , e neste caso não tem solução. Denotando por  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}^{-1}g$  a solução única de (3.41) em  $(\mathcal{N}(\mathcal{L}_{\mathcal{M}}))^{\perp}$ , tem-se

$$g \in (\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp \quad \text{e} \quad \mathcal{L}_M h = g \quad \text{se e só se} \quad h = \mathcal{L}_M^{-1} g + g_1, \quad (3.42)$$

para alguma função arbitrária  $g_1 \in \mathcal{N}(\mathcal{L}_M)$ .

Para terminar, as condições de ortogonalidade (3.40) verificam a alternativa de Fredholm (3.42), e a função  $g$  satisfaz

$$\langle \varphi^{(i)}, g \rangle = 0, \quad (3.43)$$

conhecida por *condições de compatibilidade*.

Depois destes resultados preliminares, estamos em condições de perceber a razão pela qual a equação (3.30) se pode escrever, de forma equivalente, como

$$Q_k = f_0 \mathcal{L}_M h_k + f_0 R_k, \quad k \geq 1, \quad (3.44)$$

com

$$R_1 = 0,$$

e

$$R_k = f_0^{-1} \sum_{n=1}^{k-1} Q(f_0 h_n, f_0 h_{k-n}), \quad k \geq 1.$$

Para isso, comecemos por expressar  $f_k = f_0 h_k$ , considerando  $h_k$  função desconhecida e  $h_0 = 1$ . Comparando as equações (3.44) e (3.30) temos que as segundas parcelas do lado direito são equivalentes

$$f_0 R_k = f_0 f_0^{-1} \sum_{n=1}^{k-1} Q(f_0 h_n, f_0 h_{k-n}) = \sum_{n=1}^{k-1} Q(f_n, f_{k-n}), \quad k \geq 1,$$

enquanto que, as primeiras parcelas estão relacionadas por

$$f_0 \mathcal{L}_M h_k = f_0 \left( -2f_0^{-1} Q(f_0, f_0 h_k) \right) = -2Q(f_0, f_0 h_k), \quad k \geq 1,$$

que é a definição de operador de colisão linearizado (3.35), com  $\phi = h_k$  e  $f_0 = \mathcal{M}$ .

Voltando agora a analisar a equação (3.31) e tendo em conta que  $f_k = f_0 h_k$ , da primeira condição (3.32), correspondente ao menor termo da série com  $k = 0$ , resulta que  $f_0$  é uma Maxwelliana local  $\mathcal{M} = \mathcal{M}_{(\rho, u, T)}$  com os cinco parâmetros  $\rho$ ,  $u$  e  $T$  ainda desconhecidos.

Da segunda condição ( $k = 1$ ), temos que a equação (3.33) pode ser escrita na forma

$$\mathcal{L}_{\mathcal{M}}h_1 = -2\mathcal{M}^{-1}Q(\mathcal{M}, \mathcal{M}h_1) = -\mathcal{M}^{-1}R_0.$$

Por sua vez, a equação  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}h_1 = -\mathcal{M}^{-1}R_0$ , com  $-\mathcal{M}^{-1}R_0 \in L^2_{\mathcal{M}}$ , tem uma solução se, e só se,  $-\mathcal{M}^{-1}R_0$  é ortogonal às cinco invariantes de colisão  $\varphi^{(i)}$ ,  $i = 0, \dots, 4$ , (cf. [37], [38]). Assim,

$$\langle \varphi^{(i)}, -\mathcal{M}^{-1}R_0 \rangle = 0,$$

se, e só se, verificar as condições de compatibilidade (3.43)

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi^{(i)} R_0 dv = 0, \quad i = 0, \dots, 4.$$

Mas, sendo  $R_0 = D_t f_0 = D_t \mathcal{M}$ , a equação anterior não é mais do que a equação (3.12), correspondente ao sistema de equações de Euler compressíveis

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi^{(i)} (\partial_t \mathcal{M} + v \cdot \nabla_x \mathcal{M}) dv = 0, \quad i = 0, \dots, 4,$$

e, pelos mesmos argumentos anteriormente utilizados nessa secção, podemos concluir que a condição de compatibilidade é satisfeita se, e só se, os parâmetros de  $\mathcal{M} = \mathcal{M}_{(\rho, u, T)}$  satisfazem as equações de Euler (3.26 - 3.28), com as equações de estado para a energia interna  $e = \frac{3}{2}T$  e para a pressão  $p = \rho T$ .

Portanto, a menor ordem em  $\varepsilon$  da solução formal de Hilbert (3.29) da equação de Boltzmann adimensional (3.8), com o número de Strouhal  $St = 1$  e o número de Knudsen  $Kn = \varepsilon \ll 1$ , é uma Maxwelliana local ( $f_0 = \mathcal{M}_{(\rho, u, T)}$ ) cujos parâmetros resolvem as equações de Euler de um fluido monoatômico ideal. Além disso, este método permite calcular correções de ordem arbitrária e, as condições de compatibilidade de ordem  $k$ , que garantem a existência de  $f_k$ , permitem determinar totalmente  $f_{k-1} = f_0 h_{k-1}$ . Trata-se de um procedimento iterativo, em que todas as  $f_k$  são determinadas de forma única. Contudo, não há garantia de que a série de potências de Hilbert (3.29), que é um objeto formal, tenha um raio de convergência finito em  $\varepsilon$ .

Uma outra estratégia consiste em truncar a expansão de Hilbert, em alguma ordem finita  $N$ , dada na forma:

$$f^\varepsilon = \sum_{k=0}^N \varepsilon^k f_k + \varepsilon^m R, \quad (3.45)$$

com as funções  $f_k$ ,  $k = 0, \dots, N$ , calculadas através do procedimento anterior e sendo  $R$  uma função resto aceitável, dependente de  $\varepsilon$ . De observar que  $m$  não é necessariamente  $N + 1$  e, que em vez disso, é considerado como um parâmetro que será escolhido posteriormente, por forma a que  $R$  seja uniformemente limitado com respeito a  $\varepsilon$  (*cf.* [38]). Uma prova matemática rigorosa baseada nesta variante da série de Hilbert foi proposta por Caflisch (*cf.* [33]), que encontrou uma solução da equação de Boltzmann adimensional na forma de uma série de potências de Hilbert truncada na ordem  $\varepsilon^7$  e com um resto de ordem  $\varepsilon^3$ . Posteriormente, De Masi, Esposito e Lebowitz ([52]), seguindo o algoritmo usado por Caflisch, apresentaram uma dedução rigorosa da equação de Navier-Stokes incompressível baseada nesta variante da solução formal de Hilbert (3.45). Porém, esta dedução tem as mesmas lacunas do trabalho de Caflisch: as soluções da equação de Boltzmann não são sempre positivas, perdendo o significado físico, e são válidas apenas no intervalo de tempo em que a solução limite é suave.

O método de Hilbert pode ser usado para deduzir as equações de Euler e de Navier-Stokes para fluxos incompressíveis, a partir da equação de Boltzmann (ver [52], [33]). No entanto, as equações de Navier-Stokes para fluídos compressíveis não podem ser deduzidas a partir da equação de Boltzmann através deste procedimento, isto é, da truncatura da solução formal de Hilbert, sendo necessário recorrer a outro método de expansão, nomeadamente a expansão de Chapman-Enskog (como veremos na secção seguinte).

Sendo o limite de Euler compressível, o mais fácil de todos os limites hidrodinâmicos da equação de Boltzmann, ao nível formal existem outras aproximações ao limite hidrodinâmico das equações de Euler compressíveis (*cf.*, [38], [80], [123]).

Resultados de convergência da solução da equação de Boltzmann (3.8) para as equações de Euler devem-se a (*cf.* Nishida [149], Ukai e Asano [179] e Esposito, Lebowitz e Marra [64]).

### 3.4 Equações de Navier-Stokes compressíveis

As equações de Navier-Stokes para fluídos compressíveis nem podem ser deduzidas a partir da equação de Boltzmann através da expansão de Hilbert, nem são invariantes sob uma escala tempo-espaço. No entanto, elas podem ser obtidas como uma correção das equações de Euler compressíveis (cf., [38], [80]), [123]). A *expansão de Chapman-Enskog* é mais adequada para este propósito e é considerada uma variante da expansão de Hilbert. Procuramos uma solução da equação de Boltzmann adimensional

$$\frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} Q(f^\varepsilon, f^\varepsilon), \quad (3.46)$$

como uma série de potências formal de Chapman-Enskog, com  $\varepsilon = Kn \rightarrow 0$ ,

$$f^\varepsilon(t, x, v) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k F^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon(t, x) \right] (v). \quad (3.47)$$

Introduza-se ainda a notação para a função Maxwelliana local (2.71)

$$\mathcal{M}_{f^\varepsilon}(t, x, v) = \mathcal{M}_{(\rho_\varepsilon(t, x), u_\varepsilon(t, x), T_\varepsilon(t, x))}, \quad (3.48)$$

com os mesmos momentos de ordem menor ou igual a 2 que  $f^\varepsilon$ , isto é, com

$$\begin{aligned} \rho_\varepsilon &= \int_{\mathbb{R}^3} f^\varepsilon dv = \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{M}_{f^\varepsilon} dv, \\ u_\varepsilon &= \frac{1}{\rho_\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} v f^\varepsilon dv = \frac{1}{\rho_\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} v \mathcal{M}_{f^\varepsilon} dv, \\ \rho_\varepsilon (|u_\varepsilon|^2 + 3T_\varepsilon) &= \int_{\mathbb{R}^3} |v|^2 f^\varepsilon dv = \int_{\mathbb{R}^3} |v|^2 \mathcal{M}_{f^\varepsilon} dv. \end{aligned}$$

Considere-se

$$f^\varepsilon(t, x, v) \simeq F_\varepsilon^N(t, x, v) = \sum_{k=0}^N \varepsilon^k F^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon(t, x) \right] (v), \quad N \geq 0. \quad (3.49)$$

parametrizada pelo vetor  $\vec{P}_\varepsilon$ , das densidades conservadas de  $f^\varepsilon$ ,

$$\vec{P}_\varepsilon(t, x) = \begin{pmatrix} \rho_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon \left( \frac{|u_\varepsilon|^2}{2} + \frac{3}{2} T_\varepsilon \right) \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Os coeficientes  $F^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon(t, x) \right] (v)$  são um funcional local de  $\vec{P}_\varepsilon$  avaliado em  $(t, x)$  e que, por sua vez, depende do ponto  $(t, x)$  através de  $\rho_\varepsilon, u_\varepsilon, T_\varepsilon$  e das suas sucessivas derivadas parciais em ordem a  $x$ , com valores no conjunto das funções com  $v \in \mathbb{R}^3$ . Eles são determinados pelas condições

$$\int_{\mathbb{R}^3} \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2}|v|^2 \end{pmatrix} F^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] (v) dv = \begin{cases} \vec{P}_\varepsilon, & k = 0 \\ 0, & k \geq 1 \end{cases}, \quad (3.51)$$

e pelo facto da solução aproximada de  $f^\varepsilon(t, x, v)$  satisfazer a equação de Boltzmann escalada (3.46),

$$\frac{\partial F_\varepsilon^N}{\partial t} + v \cdot \nabla_x F_\varepsilon^N = \frac{1}{\varepsilon} Q(F_\varepsilon^N, F_\varepsilon^N). \quad (3.52)$$

De uma forma diferente da expansão de Hilbert, os coeficientes  $F^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon(t, x) \right] (v)$  dependem de  $\varepsilon$ , excepto para o termo de ordem 0, o qual é uma Maxwelliana local com parâmetros que são solução das equações de Euler compressíveis.

As quantidades conservadas de  $f^\varepsilon$  (isto é, o vetor  $\vec{P}_\varepsilon$ ) satisfazem um sistema formal de leis de conservação da forma

$$\partial_t \vec{P}_\varepsilon = \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k \operatorname{div}_x \Phi^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right], \quad (3.53)$$

sendo  $\Phi^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]$  os fluxos formais, obtidos das leis de conservação locais associadas à equação de Boltzmann, definidos pelas fórmulas

$$\Phi^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] = - \int_{\mathbb{R}^3} v \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2}|v|^2 \end{pmatrix} F^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] (v) dv, \quad k \geq 0. \quad (3.54)$$

Analisando a primeira ordem da expansão de Chapman-Enskog, correspondente a  $k = 0$ , e de acordo com (3.32), temos que

$$Q \left( F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right], F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] \right) = 0, \quad (3.55)$$

e então, a solução aproximada é

$$f^\varepsilon(t, x, v) = F_\varepsilon^0(t, x, v) = F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon(t, x) \right] (v) = \mathcal{M}_{f^\varepsilon}, \quad (3.56)$$

com

$$\Phi^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] = - \int_{\mathbb{R}^3} v \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2}|v|^2 \end{pmatrix} F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] (v) dv = - \begin{pmatrix} \rho_\varepsilon u_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \otimes u_\varepsilon + \rho_\varepsilon T_\varepsilon I \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \left( \frac{1}{2}|u_\varepsilon|^2 + \frac{5}{2}T_\varepsilon \right) \end{pmatrix}. \quad (3.57)$$

Por sua vez, as leis formais de conservação local (3.53), para  $k = 0$ , são

$$\partial_t \vec{P}_\varepsilon = \operatorname{div}_x \Phi^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] + O(\varepsilon).$$

Substituindo  $\vec{P}_\varepsilon$  e  $\Phi^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]$  na equação anterior, obtemos o sistema de Euler Compressível

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon \left( \frac{|u_\varepsilon|^2}{2} + \frac{3}{2}T_\varepsilon \right) \end{pmatrix} = \operatorname{div}_x \begin{pmatrix} \rho_\varepsilon u_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \otimes u_\varepsilon + \rho_\varepsilon T_\varepsilon I \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \left( \frac{1}{2}|u_\varepsilon|^2 + \frac{5}{2}T_\varepsilon \right) \end{pmatrix} + O(\varepsilon). \quad (3.58)$$

Portanto, a ordem 0 em  $\varepsilon$  da expansão de Chapman-Enskog dá o sistema de Euler compressível, tal como a expansão de Hilbert. No entanto, na ordem 1 (e restantes) os métodos de Chapman-Enskog e de Hilbert diferem.

De realçar que,  $F^{(k)} \left[ \vec{P}_\varepsilon (t, x) \right] (v)$  não contém as derivadas tempo de  $\vec{P}_\varepsilon$ , relativamente aos cinco campos hidrodinâmicos  $\rho_\varepsilon$ ,  $\rho_\varepsilon u_\varepsilon$  e  $\rho_\varepsilon \left( \frac{|u_\varepsilon|^2}{2} + \frac{3}{2}T_\varepsilon \right)$ , uma vez que no cálculo destas derivadas parciais se utiliza a regra da cadeia. Assim, estas são substituídas pelas derivadas em  $x$ , de acordo com o lado direito da equação (3.58). Por esta razão se diz que é uma correção às equações de Euler compressíveis. Além disso, esta é uma característica do método de Chapman-Enskog, relativamente ao método de Hilbert, que tem por base eliminar  $\partial_t \vec{P}_\varepsilon$  em favor das derivadas em  $x$  através das leis de conservação satisfeitas por  $\vec{P}_\varepsilon$ .

Antes de prosseguir, vamos introduzir alguns conceitos que iremos necessitar.

Seja  $M$  uma Maxwelliana global, (2.72), com  $\rho = 1$ ,  $u = 0$  e  $T = 1$ , isto é,

$$M = M_{(1,0,1)}(v) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v^2|}{2}\right). \quad (3.59)$$

Devido às isometrias de translação e de escala em  $L^1(\mathbb{R}^3)$ ,

$$\mathcal{M}_{(\rho,u,T)}(v) = \frac{\rho}{T^{3/2}} M_{(1,0,1)}(V) \quad \text{com} \quad V = \frac{v-u}{\sqrt{T}}, \quad (3.60)$$

e pelo facto de o núcleo de colisão ser invariante por translação e por mudança de escala, pode-se deduzir o seguinte resultado, sem perda de generalidade:

o operador de colisão de Boltzmann linearizado em torno de  $M$ , e de acordo com (3.35),

$$\mathcal{L}_M \phi = -2M^{-1}Q(M, M\phi), \quad (3.61)$$

é um operador de Fredholm, não negativo, auto-adjunto e não limitado em  $L^2_M(\mathbb{R}^3, Mdv)$ , com espaço nulo gerado pelas invariantes de colisão elementares  $\varphi^{(i)}$ ,  $i = 0, \dots, 4$ .

Em particular, Grad [85] mostrou que para núcleos de colisão que satisfazem (2.13), o operador  $\mathcal{L}_M$  satisfaz a *alternativa de Fredholm* em  $L^2_M(\mathbb{R}^3, Mdv)$ , isto é, de acordo com (3.41), a equação

$$\mathcal{L}_M \phi = \psi, \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}^3, Mdv), \quad (3.62)$$

satisfaz a alternativa de Fredholm, quer:

- $\psi \in (\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp$ , e neste caso (3.62) tem uma solução única

$$\phi_0 \in L^2_M(\mathbb{R}^3, Mdv) \cap (\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp; \quad (3.63)$$

então, qualquer solução de (3.62) é da forma

$$\phi = \phi_0 + \phi_1, \quad \text{com } \phi_1 \text{ uma função arbitrária do } \mathcal{N}(\mathcal{L}_M); \quad (3.64)$$

ou

- $\psi \notin \mathcal{N}(\mathcal{L}_M)$ , caso em que (3.62) não tem solução.

Portanto, se  $\psi \in (\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp$ , existem soluções em  $L^2_M(\mathbb{R}^3, Mdv)$  para a equação (3.62), que diferem entre si por elementos de  $\mathcal{N}(\mathcal{L}_M)$ .

Dois casos importantes de soluções da equação (3.62) resultam de escolhas especiais da função  $\psi$ . Em particular, a matriz

$$A_{\alpha,\beta}(v) = v_\alpha v_\beta - \frac{1}{3}v^2 \delta_{\alpha,\beta} \quad \text{ou} \quad A(v) = v \otimes v - \frac{1}{3}|v|^2 I, \quad (3.65)$$

e o vetor

$$B_\alpha(v) = \frac{1}{2}v_\alpha (v^2 - 5) \quad \text{ou} \quad B(v) = \frac{1}{2}v (|v|^2 - 5). \quad (3.66)$$

A alternativa de Fredholm, aplicada ao operador  $\mathcal{L}_M$ , implica a existência de uma única matriz  $A^*(v)$  e de um único vetor  $B^*(v)$ , tal que (cf., [80], [81]),

$$\mathcal{L}_M A^* = A, \quad A^* \in (\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp \quad (3.67)$$

e

$$\mathcal{L}_M B^* = B, \quad B^* \in (\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp. \quad (3.68)$$

Usando a propriedade de invariância de rotação de  $\mathcal{L}_M$ , Desvillettes e Golse [54], provaram a existência de duas funções escalares

$$\mathbf{A} : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}, \quad \mathbf{b} : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$$

tais que

$$A^*(v) = \mathbf{A}(|v|)A(v) \quad (3.69)$$

e

$$B^*(v) = \mathbf{b}(|v|)B(v). \quad (3.70)$$

Sendo  $\mathcal{L}_M^{-1}$  o operador pseudoinverso de  $\mathcal{L}_M$ , definido em  $(\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp$  pela alternativa de Fredholm, tem-se que

$$\mathcal{L}_M^{-1}A = A^* = \mathbf{A}(|v|)A(v), \quad A \in (\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp \quad (3.71)$$

e

$$\mathcal{L}_M^{-1}B = B^* = \mathbf{b}(|v|)B(v) \quad B \in (\mathcal{N}(\mathcal{L}_M))^\perp. \quad (3.72)$$

Além disso, as quantidades  $A(v)$  e  $B(v)$  verificam as condições de ortogonalidade (3.40),

$$\int_{\mathbb{R}^3} A(v) \begin{pmatrix} 1 \\ v_i \\ \frac{1}{2}|v|^2 \end{pmatrix} Mdv = \int_{\mathbb{R}^3} B(v) \begin{pmatrix} 1 \\ v_i \\ \frac{1}{2}|v|^2 \end{pmatrix} Mdv = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.73)$$

bem como as quantidades  $A^*(v)$  e  $B^*(v)$

$$\int_{\mathbb{R}^3} A^*(v) \begin{pmatrix} 1 \\ v_i \\ \frac{1}{2}|v|^2 \end{pmatrix} M dv = \int_{\mathbb{R}^3} B^*(v) \begin{pmatrix} 1 \\ v_i \\ \frac{1}{2}|v|^2 \end{pmatrix} M dv = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.74)$$

É de realçar que, na dedução de modelos hidrodinâmicos viscosos a partir da equação de Boltzmann, as quantidades  $A$  e  $B$  têm um papel importante, especialmente no cálculo dos coeficientes de transporte tais como a viscosidade e a condução de calor em termos do operador de colisão. De facto, por (3.61), tem-se

$$A = \mathcal{L}_M A^* = -2M^{-1}Q(M, MA^*) \quad (3.75)$$

e

$$B = \mathcal{L}_M B^* = -2M^{-1}Q(M, MB^*). \quad (3.76)$$

Analisando a segunda ordem da expansão de Chapman-Enskog, correspondente a  $k = 1$ , e de acordo com (3.33),

$$(\partial_t + v \cdot \nabla_x) F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] = 2Q \left( F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right], F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] \right), \quad (3.77)$$

vamos obter a primeira correção às equações de Euler, através de  $\Phi^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]$ .

A solução aproximada que agora se pretende obter é

$$f^\varepsilon(t, x, v) \simeq F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon(t, x) \right] (v) + \varepsilon F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon(t, x) \right] (v).$$

Usando a definição de operador de colisão de Boltzmann linearizado em torno de uma Maxwelliana local  $\mathcal{M}_{f^\varepsilon}$  e uma vez que por (3.35) o operador está definido para qualquer função  $\phi$  pertencente a um subconjunto denso de  $L^2_{\mathcal{M}} \left( \mathbb{R}^3, M dv \right)$ , temos que

$$\mathcal{L}_{\mathcal{M}_{f^\varepsilon}} \phi = -2\mathcal{M}_{f^\varepsilon}^{-1}Q \left( \mathcal{M}_{f^\varepsilon}, \mathcal{M}_{f^\varepsilon} \phi \right). \quad (3.78)$$

Sendo  $\mathcal{M}_{f^\varepsilon} = F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]$  e  $\phi = \frac{F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]}{F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]}$ , obtemos de (3.78),

$$\mathcal{L}_{F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]} \left( \frac{F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]}{F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]} \right) = -2 \left( F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] \right)^{-1} Q \left( F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right], F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] \right).$$

Então, o lado direito da equação (3.77)

$$2Q \left( F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right], F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] \right) = F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] \left( -\mathcal{L}_{F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]} \left( \frac{F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]}{F^{(0)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]} \right) \right),$$

e a equação (3.77) pode ser escrita na forma

$$(\partial_t + v \cdot \nabla_x) \mathcal{M}_{f_\varepsilon} = \mathcal{M}_{f_\varepsilon} \left( -\mathcal{L}_{\mathcal{M}_{f_\varepsilon}} \left( \frac{F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]}{\mathcal{M}_{f_\varepsilon}} \right) \right). \quad (3.79)$$

Usando o sistema de Euler compressível (3.58) para eliminar as derivadas tempo e, tendo em vista a verificação da equação anterior,  $F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]$  é determinado pelas condições (3.51)

$$\int_{\mathbb{R}^3} \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2}|v|^2 \end{pmatrix} F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] (v) dv = 0 \quad (3.80)$$

e (cf., [80], [81]),

$$-\mathcal{L}_{\mathcal{M}_{f_\varepsilon}} \left( \frac{F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]}{\mathcal{M}_{f_\varepsilon}} \right) = A(V_\varepsilon) : D(u_\varepsilon) + 2B(V_\varepsilon) \cdot \nabla_x \sqrt{T_\varepsilon}, \quad (3.81)$$

com a notação

$$V_\varepsilon = \frac{v - u_\varepsilon}{\sqrt{T_\varepsilon}}, \quad (3.82)$$

$$A(V_\varepsilon) = V_\varepsilon \otimes V_\varepsilon - \frac{1}{3}|V_\varepsilon|^2 I, \quad (3.83)$$

$$B(V_\varepsilon) = \frac{1}{2}V_\varepsilon \left( |V_\varepsilon|^2 - 5 \right), \quad (3.84)$$

de acordo com (3.65-3.66) e com  $D(u)$ , a parte sem traço do tensor de deformação de  $u$ ,

$$D(u) = \left( \nabla_x u + (\nabla_x u)^T \right) - \frac{2}{3}(\operatorname{div}_x u) I. \quad (3.85)$$

Sendo  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}_{f_\varepsilon}}$  um operador de Fredholm no espaço de funções  $L^2(\mathcal{M}_{f_\varepsilon} dv)$ , a equação (3.81) satisfaz a alternativa de Fredholm e tem uma solução única  $F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] (v) \in \left( \mathcal{N} \left( \mathcal{L}_{\mathcal{M}_{f_\varepsilon}} \right) \right)^\perp$  cuja expressão é (cf., [80], [81]),

$$F^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right] (v) = -\mathcal{M}_{f_\varepsilon} \left( A^*(V_\varepsilon) : D(u_\varepsilon) + 2B^*(V_\varepsilon) \cdot \nabla_x \sqrt{T_\varepsilon} \right), \quad (3.86)$$

com  $A^*$  uma matriz simétrica e  $B^*$  um vetor, definidos como em (3.71- 3.72),

$$A^* (V_\varepsilon) = -\mathcal{L}_{\mathcal{M}_{f\varepsilon}}^{-1} A (V_\varepsilon),$$

e

$$B^* (V_\varepsilon) = -\mathcal{L}_{\mathcal{M}_{f\varepsilon}}^{-1} B (V_\varepsilon).$$

Devido a (3.69-3.70), existem duas funções escalares  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$ , tais que

$$A^* \left( \frac{v - u_\varepsilon}{\sqrt{T_\varepsilon}} \right) = \frac{1}{\rho_\varepsilon \sqrt{T_\varepsilon}} \mathbf{a} \left( \frac{|v - u_\varepsilon|}{\sqrt{T_\varepsilon}} \right) A \left( \frac{v - u_\varepsilon}{\sqrt{T_\varepsilon}} \right), \quad (3.87)$$

$$B^* \left( \frac{v - u_\varepsilon}{\sqrt{T_\varepsilon}} \right) = \frac{1}{\rho_\varepsilon \sqrt{T_\varepsilon}} \mathbf{b} \left( \frac{|v - u_\varepsilon|}{\sqrt{T_\varepsilon}} \right) B \left( \frac{v - u_\varepsilon}{\sqrt{T_\varepsilon}} \right). \quad (3.88)$$

Esta estrutura adicional explica, em particular, porque a viscosidade e a condução de calor são campos escalares não-negativos.

Considerando agora as leis formais de conservação local (3.53), para  $k = 1$ ,

$$\partial_t \vec{P}_\varepsilon = \operatorname{div}_x \Phi^{(0)} [\vec{P}_\varepsilon] + \varepsilon \operatorname{div}_x \Phi^{(1)} [\vec{P}_\varepsilon] + O(\varepsilon^2), \quad (3.89)$$

com

$$\Phi^{(1)} [\vec{P}_\varepsilon] = \begin{pmatrix} 0 \\ \mu_\varepsilon(T_\varepsilon) D(u_\varepsilon) \\ \mu_\varepsilon(T_\varepsilon) D(u_\varepsilon) \cdot u_\varepsilon + \kappa(T_\varepsilon) \nabla_x T_\varepsilon \end{pmatrix}, \quad (3.90)$$

obtemos o sistema de Navier-Stokes compressível

$$\begin{aligned} \partial_t \begin{pmatrix} \rho_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon \left( \frac{|u_\varepsilon|^2}{2} + \frac{3}{2} T_\varepsilon \right) \end{pmatrix} &= \operatorname{div}_x \begin{pmatrix} \rho_\varepsilon u_\varepsilon \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \otimes u_\varepsilon + \rho_\varepsilon T_\varepsilon I \\ \rho_\varepsilon u_\varepsilon \left( \frac{1}{2} |u_\varepsilon|^2 + \frac{5}{2} T_\varepsilon \right) \end{pmatrix} + \\ &+ \varepsilon \operatorname{div}_x \begin{pmatrix} 0 \\ \mu_\varepsilon(T_\varepsilon) D(u_\varepsilon) \\ \mu_\varepsilon(T_\varepsilon) D(u_\varepsilon) \cdot u_\varepsilon + \kappa(T_\varepsilon) \nabla_x T_\varepsilon \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.91)$$

ou ainda, na forma equivalente

$$\partial_t \rho_\varepsilon + \operatorname{div}_x (\rho_\varepsilon u_\varepsilon) = 0, \quad (3.92)$$

$$\partial_t (\rho_\varepsilon u_\varepsilon) + \operatorname{div}_x (\rho_\varepsilon u_\varepsilon \otimes u_\varepsilon) + \nabla_x (\rho_\varepsilon T_\varepsilon) = \varepsilon \operatorname{div}_x (\mu_\varepsilon D(u_\varepsilon)), \quad (3.93)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \left( \rho_\varepsilon \left( \frac{1}{2} |u_\varepsilon|^2 + \frac{3}{2} T_\varepsilon \right) \right) + \operatorname{div}_x \left( \rho_\varepsilon u_\varepsilon \left( \frac{1}{2} |u_\varepsilon|^2 + \frac{5}{2} T_\varepsilon \right) \right) = \\ = \varepsilon \operatorname{div}_x (\mu_\varepsilon D(u_\varepsilon) \cdot u_\varepsilon + \kappa_\varepsilon \nabla_x T_\varepsilon). \end{aligned} \quad (3.94)$$

Os termos de dissipação, a viscosidade e a condução de calor, são de ordem  $\varepsilon$ ,

$$\mu_\varepsilon D(u_\varepsilon), \quad (3.95)$$

e

$$q = -\kappa_\varepsilon \nabla_x T_\varepsilon, \quad (3.96)$$

com a notação  $\mu_\varepsilon = \mu(T_\varepsilon)$  e  $\kappa_\varepsilon = \kappa(T_\varepsilon)$ . Por sua vez,

$$\mu(T_\varepsilon) = \frac{1}{10} \frac{T_\varepsilon^{3/2}}{\rho_\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} A(V_\varepsilon) : A^*(V_\varepsilon) M_{f^\varepsilon}(v) dv, \quad (3.97)$$

e

$$\kappa(T_\varepsilon) = \frac{1}{3} \frac{T_\varepsilon^{3/2}}{\rho_\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} B(V_\varepsilon) : B^*(V_\varepsilon) M_{f^\varepsilon}(v) dv, \quad (3.98)$$

são o coeficiente de viscosidade e o coeficiente de condução de calor, respetivamente.

Estas últimas fórmulas, depois de expressar  $\mathcal{M}_{f^\varepsilon}(v)$  em termos da Maxwelliana centrada reduzida  $M_{(1,0,1)}(V_\varepsilon)$ , isto é,

$$\mathcal{M}_{f^\varepsilon}(v) = \mathcal{M}_{(\rho_\varepsilon, u_\varepsilon, T_\varepsilon)}(v) = \frac{\rho_\varepsilon}{T_\varepsilon^{3/2}} M_{(1,0,1)}(V_\varepsilon),$$

e da mudança de variável  $dv = \sqrt{T_\varepsilon} dV_\varepsilon$ , reescrevem-se (cf., [80], [81], [123])

$$\mu(T_\varepsilon) = \frac{1}{10} \sqrt{T_\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} A(V_\varepsilon) : A^*(V_\varepsilon) M_{(1,0,1)}(V_\varepsilon) dV_\varepsilon, \quad (3.99)$$

e

$$\kappa(T_\varepsilon) = \frac{1}{3} \sqrt{T_\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} B(V_\varepsilon) : B^*(V_\varepsilon) M_{(1,0,1)}(V_\varepsilon) dV_\varepsilon. \quad (3.100)$$

As suas expressões em termos das funções escalares  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$  são (cf., [80], [81]),

$$\mu(T_\varepsilon) = \frac{2}{15\sqrt{2\pi}} T_\varepsilon \int_0^{+\infty} \mathbf{a}(r) r^6 e^{-r^2/2} dr, \quad (3.101)$$

e

$$\kappa(T_\varepsilon) = \frac{1}{6\sqrt{2\pi}} \sqrt{T_\varepsilon} \int_0^{+\infty} \mathbf{b}(r) r^2 (r^2 - 5)^2 e^{-r^2/2} dr. \quad (3.102)$$

Portanto, através do método de expansão de Chapman-Enskog da função  $f^\varepsilon$  (3.47), truncada na segunda ordem, obtém-se as equações de Navier-Stokes (3.92-3.94). No entanto, estas equações não são um limite da equação de Boltzmann mas uma correção das equações de Euler compressíveis na primeira ordem em  $\varepsilon$ . Essa correção é obtida por  $\Phi^{(1)} \left[ \vec{P}_\varepsilon \right]$ , onde figuram os termos de dissipação. Em particular,  $\mu_\varepsilon D(u_\varepsilon)$  representa os efeitos de dissipação da viscosidade, associados com a relaxação à equi-líbrio  $\mathcal{M}_{f^\varepsilon}(v)$  e  $q = -\kappa_\varepsilon \nabla_x T_\varepsilon$  a condução de calor. Os coeficientes de viscosidade e condução de calor,  $\mu_\varepsilon = \mu(T_\varepsilon)$  e  $\kappa_\varepsilon = \kappa(T_\varepsilon)$ , respetivamente, são valores não negativos finitos. Estas funções de  $T_\varepsilon$  são definidas em termos do operador de colisão linearizado  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}_{f^\varepsilon}}$  e, portanto, dependem dos detalhes da dinâmica microscópica.

### 3.5 Equações de Navier-Stokes Incompressíveis

Os limites hidrodinâmicos da equação de Boltzmann também conduzem a escoamentos de fluídos incompressíveis. Em particular, às equações de Euler incompressíveis e às equações de Navier-Stokes incompressíveis. Na dedução formal destes dois sistemas hidrodinâmicos vamos usar a mesma estratégia do método dos momentos de Grad, o que implica cálculos similares para o tratamento da correção de primeira ordem na expansão de Chapman-Enskog. A partir da equação de Boltzmann escalada, e usando uma escala onde os números  $Kn$  e  $St$  são pequenos, pretende-se encontrar uma solução desta equação na forma de uma perturbação ao estado Maxwelliano  $M = M_{(1,0,1)}(v)$ . No caso  $Kn = Ma = St \ll 1$ , a equação de Boltzmann converge para as equações de Navier-Stokes incompressíveis. No caso de  $Kn \ll Ma = St$ , a equação de Boltzmann converge para as equações de Euler incompressíveis. Além disso, vamos considerar o caso onde a dissipação viscosa e a difusão de calor são observados. Para isso, vamos introduzir uma escala tempo-espaço comum aos dois modelos hidrodinâmicos.

Para observarmos um comportamento não trivial, isto é, em que a dissipação viscosa e a difusão de calor são observados no limite hidrodinâmico, temos de olhar para uma escala de tempo grande (escala parabólica ou difusiva). Para isso, comecemos por introduzir as mudanças de variável, e sejam

$$\tau = \varepsilon^{-2}t \quad (3.103)$$

e

$$q = \varepsilon^{-1}x \quad (3.104)$$

as variáveis tempo e espaço microscópicas ( $t$  e  $x$  são as variáveis macroscópicas), respetivamente, tal que

$$f(\varepsilon^{-2}t, \varepsilon^{-1}x, v) = f^\varepsilon(t, x, v). \quad (3.105)$$

Se  $f(\tau, q, v)$  satisfaz a equação de Boltzmann, nas variáveis microscópicas

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + v \cdot \nabla_r f = Q(f, f), \quad (3.106)$$

então,  $f^\varepsilon(t, x, v)$  satisfaz a equação de Boltzmann (3.1), para

$$Kn = St = \varepsilon \ll 1$$

isto é, a equação (3.3)

$$\varepsilon \frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} Q(f^\varepsilon, f^\varepsilon). \quad (3.107)$$

É ainda necessário assumir que  $Ma = O(St)$ , por forma a garantir que  $St$  capte a velocidade do movimento do fluido, e assim temos que

$$Kn = St = Ma = \varepsilon \ll 1.$$

Vamos considerar a equação de Boltzmann (3.107), com  $(t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$  e, no estado de equilíbrio, uma Maxwelliana uniforme no infinito. Sem perda de generalidade, seja  $M = M_{(1,0,1)}(v)$  essa Maxwelliana na forma (3.59). Isto é,

$$f^\varepsilon(t, x, v) \longrightarrow M \quad \text{quando } |x| \rightarrow +\infty. \quad (3.108)$$

Por outro lado, a hipótese  $Ma = \varepsilon$  indica que  $f^\varepsilon$  é procurada como uma perturbação  $\mathcal{O}(\varepsilon)$  do equilíbrio Maxwelliano uniforme  $M$ , isto é, que se tem

$$f^\varepsilon(t, x, v) = M(v) (1 + \varepsilon g^\varepsilon(t, x, v)), \quad (3.109)$$

de tal modo que  $g^\varepsilon \geq -\frac{1}{\varepsilon}$ , com  $g^\varepsilon = \mathcal{O}(1)$  e  $f^\varepsilon = \mathcal{O}(\varepsilon)$ , quando  $\varepsilon = Ma \rightarrow 0$ .

A equação de Boltzmann (3.107) em termos da função  $g_\varepsilon$ , é da forma

$$\varepsilon \frac{\partial g^\varepsilon}{\partial t} + v \cdot \nabla_x g^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_M g^\varepsilon = Q_M(g^\varepsilon, g^\varepsilon), \quad (3.110)$$

com

$$\mathcal{L}_M g^\varepsilon = 2M^{-1}Q(M, Mg^\varepsilon),$$

de acordo com a definição de operador de colisão linearizado em torno de  $M$ , (3.61), e

$$Q_M(g^\varepsilon, g^\varepsilon) = M^{-1}Q(Mg^\varepsilon, Mg^\varepsilon). \quad (3.111)$$

Vamos começar por analisar as flutuações assintóticas. Assim, multiplicando a equação de Boltzmann (3.110) por  $\varepsilon$  e considerando  $\varepsilon \rightarrow 0$  esperamos que

$$g^\varepsilon \rightarrow g \text{ no sentido das distribuições em } \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3$$

em que, de acordo com (3.38),

$$\mathcal{L}_M g = 0.$$

A função  $g$  é uma *Maxwelliana infinitesimal*, isto é, da forma

$$g(t, x, v) = \rho(t, x) + u(t, x) \cdot v + T(t, x) \frac{1}{2} (|v|^2 - 3). \quad (3.112)$$

Usando a notação, para toda a a função  $\phi \in L^1(\mathbb{R}^3, Mdv)$  e, de acordo com (3.34),

$$\langle \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) M(v) dv, \quad (3.113)$$

observamos que a função  $g$  é parametrizada pelos seus próprios momentos, na variável  $v$ , uma vez que

$$\rho(t, x) = \langle g \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} g M dv, \quad (3.114)$$

$$u(t, x) = \langle vg \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} vg M dv, \quad (3.115)$$

$$T(t, x) = \left\langle \left( \frac{1}{3} |v|^2 - 1 \right) g \right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{1}{3} |v|^2 - 1 \right) g M dv. \quad (3.116)$$

As leis de conservação local (da massa, da quantidade de movimento e da energia) verificadas pela função  $f^\varepsilon(t, x, v)$ , expressas em termos da função  $g_\varepsilon$ , são

$$\varepsilon \partial_t \langle g^\varepsilon \rangle + \operatorname{div}_x \langle v g^\varepsilon \rangle = 0, \quad (3.117)$$

$$\varepsilon \partial_t \langle v g^\varepsilon \rangle + \operatorname{div}_x \langle v \otimes v g^\varepsilon \rangle = 0, \quad (3.118)$$

$$\varepsilon \partial_t \langle \frac{1}{2} |v|^2 g^\varepsilon \rangle + \operatorname{div}_x \langle v \frac{1}{2} |v|^2 g^\varepsilon \rangle = 0. \quad (3.119)$$

A partir da equação da continuidade (conservação local da massa) (3.117),

$$\varepsilon \partial_t \langle g^\varepsilon \rangle + \operatorname{div}_x \langle v g^\varepsilon \rangle = 0,$$

e passando ao limite no sentido das distribuições, com  $\varepsilon \rightarrow 0$ , tem-se

$$\langle v g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle v g \rangle = u. \quad (3.120)$$

Então, obtemos

$$\operatorname{div}_x \langle v g \rangle = \operatorname{div}_x u = 0, \quad (3.121)$$

a *condição de incompressibilidade* nas equações de Navier-Stokes.

A partir da equação da conservação local da quantidade de movimento (3.118),

$$\varepsilon \partial_t \langle v g^\varepsilon \rangle + \operatorname{div}_x \langle v \otimes v g^\varepsilon \rangle = 0,$$

e passando ao limite no sentido das distribuições, com  $\varepsilon \rightarrow 0$ , tem-se

$$\langle v \otimes v g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle v \otimes v g \rangle = (\rho + T)I, \quad \text{como } \varepsilon \rightarrow 0.$$

De facto, tendo em conta que

$$v \otimes v = \left( v \otimes v - \frac{1}{3} |v|^2 I \right) + \frac{1}{3} |v|^2 I, \quad (3.122)$$

tem-se

$$\langle v \otimes v g^\varepsilon \rangle = \left\langle \left( v \otimes v - \frac{1}{3} |v|^2 I \right) g^\varepsilon \right\rangle + \left\langle \frac{1}{3} |v|^2 g^\varepsilon \right\rangle, \quad (3.123)$$

e, por (3.65), que

$$\langle v \otimes v g^\varepsilon \rangle = \langle A g^\varepsilon \rangle + \left\langle \frac{1}{3} |v|^2 g^\varepsilon \right\rangle. \quad (3.124)$$

Da mesma forma, passando ao limite no sentido das distribuições, com  $\varepsilon \rightarrow 0$ , esperamos que

$$\langle v \otimes v g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle v \otimes v g \rangle, \quad (3.125)$$

$$\langle A g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle A g \rangle, \quad (3.126)$$

$$\langle \frac{1}{3} |v|^2 g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle \frac{1}{3} |v|^2 g \rangle. \quad (3.127)$$

Como a função  $g(t, x, v) \in \mathcal{N}(\mathcal{L}_M)$ , isto é,  $g$  é uma combinação linear dos invariantes de colisão elementares (2.57), aplicando as relações (3.73), temos que

$$\langle A g \rangle = 0. \quad (3.128)$$

Por sua vez, o lado direito de (3.127), pode expressar-se como

$$\langle \frac{1}{3} |v|^2 g \rangle = \langle g \rangle + \langle \left( \frac{1}{3} |v|^2 - 1 \right) g \rangle = \rho + T. \quad (3.129)$$

Então, por (3.124) - (3.129), obtemos

$$\operatorname{div}_x \langle v \otimes v g \rangle = \operatorname{div}_x \langle A g \rangle + \nabla_x \langle \frac{1}{3} |v|^2 g \rangle = \nabla_x (\rho + T) = 0. \quad (3.130)$$

Uma vez que  $g \in L^\infty \left( \mathbb{R}^+, L^2 \left( \mathbb{R}^3, M dv dx \right) \right)$  então  $(\rho + T) \in L^\infty \left( \mathbb{R}^+, L^2 \left( \mathbb{R}^3, dx \right) \right)$  e isso implica a *relação de Boussinesq*

$$\rho + T = 0. \quad (3.131)$$

Substituindo (3.131) em (3.112) obtemos a função  $g$  na forma

$$g(t, x, v) = u(t, x) \cdot v + T(t, x) \frac{1}{2} \left( |v|^2 - 5 \right). \quad (3.132)$$

Para obtermos a equação de movimento de Navier-Stokes, começamos por reescrever a equação de conservação local da quantidade de movimento (3.118). Dividindo-a por  $\varepsilon$  e utilizando (3.124), temos

$$\partial_t \langle v g^\varepsilon \rangle + \operatorname{div}_x \frac{1}{\varepsilon} \langle A g^\varepsilon \rangle + \nabla_x \frac{1}{\varepsilon} \langle \frac{1}{3} |v|^2 g^\varepsilon \rangle = 0. \quad (3.133)$$

Utilizando o facto de  $A(v) \perp \mathcal{N}(\mathcal{L}_M)$ , e consequentemente, aplicando a alternativa de Fredholm ao operador  $\mathcal{L}_M$ , tem-se que, existe um único tensor  $A^*$  tal que  $A = \mathcal{L}_M A^*$ ,

(3.65), a seguir, a propriedade de  $\mathcal{L}_M$  ser auto-adjunto em  $L^2(Mdv)$ , (3.37), e por fim, isolando o terceiro termo do lado esquerdo da equação (3.110), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} \langle Ag^\varepsilon \rangle &= \frac{1}{\varepsilon} \langle \mathcal{L}_M A^* g^\varepsilon \rangle = \langle A^* \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_M g^\varepsilon \rangle = \\ &= \langle A^* Q_M(g^\varepsilon, g^\varepsilon) \rangle - \langle A^* (\varepsilon \partial_t + v \cdot \nabla_x) g^\varepsilon \rangle \\ &\longrightarrow \langle A^* Q_M(g, g) \rangle - \langle A^* v \cdot \nabla_x g \rangle \end{aligned} \quad (3.134)$$

quando  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

O próximo objetivo é calcular os dois últimos termos da expressão anterior (3.134). Começando pelo primeiro termo, vamos utilizar o seguinte resultado (cf., [82]):

$$\text{Para cada } \phi, \psi \in \mathcal{N}(\mathcal{L}_M), \text{ tem-se } Q_M(\phi, \psi) = \frac{1}{2} \mathcal{L}_M(\phi\psi).$$

Uma vez que a função  $g \in \mathcal{N}(\mathcal{L}_M)$ , pelo resultado anterior,  $Q_M(g, g) = \frac{1}{2} \mathcal{L}_M(g^2)$ , e o primeiro termo vem na forma

$$\langle A^* Q_M(g, g) \rangle = \langle A^* \frac{1}{2} \mathcal{L}_M(g^2) \rangle. \quad (3.135)$$

Pelo facto de o operador  $\mathcal{L}_M$  ser auto-adjunto em  $L^2(\mathbb{R}^3, Mdv)$  e  $\mathcal{L}_M A^* = A$ , temos que

$$\langle A^* \frac{1}{2} \mathcal{L}_M(g^2) \rangle = \frac{1}{2} \langle (\mathcal{L}_M A^*) g^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle A g^2 \rangle.$$

Por outro lado, relembando a expressão (3.65) de  $A(v) = v \otimes v - \frac{1}{3}|v|^2 I$  e que  $\langle vg \rangle = u$ , (3.115), vem

$$\frac{1}{2} \langle A g^2 \rangle = \langle vg \rangle \otimes \langle vg \rangle - \frac{1}{3} |\langle vg \rangle|^2 I \quad (3.136)$$

$$= u \otimes u - \frac{1}{3} |u|^2 I. \quad (3.137)$$

Assim, o primeiro termo verifica a igualdade

$$\langle A^* Q_M(g, g) \rangle = u \otimes u - \frac{1}{3} |u|^2 I. \quad (3.138)$$

Quanto ao segundo termo da expressão (3.134), vamos obter a seguinte resultado

$$\langle A^* v \cdot \nabla_x g \rangle = \mu \left( \nabla_x u + (\nabla_x u)^T \right). \quad (3.139)$$

Por (3.65), (3.74) e (3.113), tem-se

$$\begin{aligned}\langle A^* \otimes v \otimes v \rangle &= \langle A^* \otimes \left[ \left( v \otimes v - \frac{1}{3}|v|^2 I \right) + \frac{1}{3}|v|^2 I \right] \rangle = \\ &= \langle A^* \otimes A \rangle + \langle A^* \otimes \left( \frac{1}{3}|v|^2 I \right) \rangle = \langle A^* \otimes A \rangle.\end{aligned}\quad (3.140)$$

Por (3.71),

$$\langle A^* \otimes A \rangle = \langle \mathcal{L}_M^{-1} A \otimes A \rangle = \mu \langle A \otimes A \rangle, \quad (3.141)$$

com o coeficiente de viscosidade  $\mu > 0$ . Por (3.115), (3.85) e (3.121),

$$D(\langle vg \rangle) = D(u) = \left( \nabla_x u + (\nabla_x u)^T \right) - \frac{2}{3}(\operatorname{div}_x u) I = \nabla_x u + (\nabla_x u)^T.$$

Voltando à expressão (3.139), e utilizando os resultados (3.140) - (3.5), tem-se

$$\begin{aligned}\langle A^* v \cdot \nabla_x g \rangle &= \langle A^* \otimes v \otimes v \rangle : \nabla_x \langle vg \rangle \\ &= \langle A^* \otimes A \rangle : \nabla_x \langle vg \rangle \\ &= \mu \langle A \otimes A \rangle : \nabla_x \langle vg \rangle \\ &= \mu D(\langle vg \rangle) \\ &= \mu \left( \nabla_x u + (\nabla_x u)^T \right).\end{aligned}\quad (3.142)$$

Substituindo os termos (3.138) e (3.142) na expressão (3.134), temos que

$$\frac{1}{\varepsilon} \langle Ag^\varepsilon \rangle \longrightarrow \left( u \otimes u - \frac{1}{3}|u|^2 I \right) - \mu \left( \nabla_x u + (\nabla_x u)^T \right). \quad (3.143)$$

Por sua vez, substituindo esta expressão na equação (3.133), e tendo em conta (3.120), (3.121) e (3.127), temos que

$$\partial_t u + \operatorname{div}_x \left[ \left( u \otimes u - \frac{1}{3}|u|^2 I \right) - \mu \left( \nabla_x u + (\nabla_x u)^T \right) \right] + \nabla_x \frac{1}{\varepsilon} \langle \frac{1}{3}|v|^2 g \rangle = 0. \quad (3.144)$$

Observando que

$$\operatorname{div}_x \left( u \otimes u - \frac{1}{3}|u|^2 I \right) = \operatorname{div}_x (u \otimes u) - \frac{1}{3} \nabla_x |u|^2 = \operatorname{div}_x (u \otimes u), \quad (3.145)$$

e que, novamente pela condição de incompressibilidade, (3.121),

$$\operatorname{div}_x \left( \left( \nabla_x u + (\nabla_x u)^T \right) - \frac{2}{3} \operatorname{div}_x u I \right) = \Delta_x u + \nabla_x (\operatorname{div}_x u) - \frac{2}{3} \nabla_x (\operatorname{div}_x u)$$

$$= \Delta_x u, \quad (3.146)$$

e ainda, por (3.130), substituindo em (3.144), obtemos finalmente a equação de movimento de Navier-Stokes, na forma

$$\partial_t u + \operatorname{div}_x (u \otimes u) - \mu \Delta_x u = 0. \quad (3.147)$$

De um modo muito similar obtém-se a equação da temperatura de Navier-Stokes incompressível. Esta equação da temperatura (ou calor) de Navier-Stokes verificada por  $u = \langle \rho v \rangle$ , vai ser deduzida a partir de uma combinação das leis de conservação locais da massa e da energia (3.117) e (3.118), na forma

$$\partial_t \langle \frac{1}{2} (|v|^2 - 5) g^\varepsilon \rangle + \operatorname{div}_x \langle \frac{1}{\varepsilon} B g^\varepsilon \rangle = 0. \quad (3.148)$$

Passando ao limite, no sentido das distribuições, quando  $\varepsilon \rightarrow 0$ , tem-se

$$\langle \frac{1}{2} (|v|^2 - 5) g^\varepsilon \rangle \longrightarrow \langle \frac{1}{2} (|v|^2 - 5) g \rangle = \frac{5}{2} T. \quad (3.149)$$

e

$$\frac{1}{\varepsilon} \langle B g^\varepsilon \rangle \longrightarrow \frac{1}{\varepsilon} \langle B g \rangle = \frac{5}{2} u T + \frac{5}{2} \kappa \nabla_x T. \quad (3.150)$$

Tratando o lado direito da expressão (3.149), e utilizando (3.115), (3.114) e a condição de Boussinesq (3.131), tem-se

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{2} (|v|^2 - 5) g \rangle &= \langle \frac{1}{2} |v|^2 g \rangle - \langle \frac{3}{2} g \rangle - \langle g \rangle \\ &= \frac{3}{2} \langle \left( \frac{1}{3} |v|^2 - 1 \right) g \rangle - \langle g \rangle \\ &= \frac{3}{2} T - \rho \\ &= \frac{3}{2} T + T \\ &= \frac{5}{2} T. \end{aligned} \quad (3.151)$$

Analisando a expressão (3.150) de modo similar a (3.134), tem-se

$$\frac{1}{\varepsilon} \langle B g^\varepsilon \rangle \longrightarrow \langle B^* Q_M(g, g) \rangle - \langle B^* v \cdot \nabla_x g \rangle. \quad (3.152)$$

Começando pelo primeiro termo do lado direito da expressão anterior, temos de modo similar a (3.135), mas considerando (3.151) e, no lugar da matriz  $A(v)$ , o vetor  $B(v) = \frac{1}{2}(|v|^2 - 5)v$ , de acordo com (3.66), que

$$\langle B^* Q_M(g, g) \rangle = \frac{1}{2} \langle Bg^2 \rangle = \frac{5}{2} uT,$$

e

$$\langle B^* v \cdot \nabla_x g \rangle = \kappa \langle v \cdot \nabla_x g B \rangle = \kappa \nabla_x \cdot \langle v g B \rangle = \frac{5}{2} \kappa \nabla_x T,$$

com o coeficiente de condução de calor  $\kappa > 0$ .

Substituindo na equação da temperatura (3.148) as expressões (3.149) e (3.150), obtém-se

$$\partial_t \left( \frac{5}{2} T \right) + \operatorname{div}_x \left( \frac{5}{2} uT - \frac{5}{2} \kappa \nabla_x T \right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \partial_t T + \underbrace{\operatorname{div}_x (uT)}_{u \cdot \nabla_x T} - \kappa \Delta_x T = 0.$$

As equações de Navier-Stokes incompressíveis são da forma

$$\operatorname{div}_x u = 0,$$

$$\partial_t u + \operatorname{div}_x (u \otimes u) + \nabla_x p = \mu \Delta_x u,$$

$$\partial_t T + \operatorname{div}_x (uT) - \kappa \Delta_x T = 0.$$

### 3.6 Equações de Euler Incompressíveis

As equações de Euler incompressíveis são formalmente o limite não viscoso das equações de Navier-Stokes. Vamos considerar um fluido incompressível, isto é, cuja densidade permanece constante no tempo, e sem viscosidade. Na dedução das equações de Euler incompressíveis a escala deve ser escolhida por forma a aumentar o efeito do termo não linear.

Seja  $St = Ma = \varepsilon$  enquanto que  $Kn = \eta_\varepsilon = \mathcal{O}(\varepsilon)$ , isto é,  $Ma \ll 1$  e  $Kn \ll Ma$ . De acordo com a relação de Von Kármán,  $Kn = \frac{Ma}{Re}$ , se  $Kn = \eta_\varepsilon$ , sendo  $Ma = \varepsilon$ , então  $Re = \frac{\varepsilon}{\eta_\varepsilon}$ .

Assim, a equação limite obtida deste modo representa um fluido não viscoso, uma vez que o parâmetro adimensional, inversamente proporcional à viscosidade do fluido,  $Re = \frac{\varepsilon}{\eta_\varepsilon} \rightarrow +\infty$ , quando  $\varepsilon \rightarrow 0$ , e incompressível ( $Ma \rightarrow 0$ ).

Partindo-se da equação

$$\varepsilon \frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon = \frac{1}{\eta_\varepsilon} Q(f^\varepsilon, f^\varepsilon), \quad (t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \quad (3.153)$$

com

$$f^\varepsilon(t, x, v) \rightarrow M \quad \text{quando } |x| \rightarrow +\infty. \quad (3.154)$$

Defina-se a função

$$f^\varepsilon(t, x, v) = M(1 + \eta_\varepsilon g_\varepsilon), \quad (3.155)$$

com

$$g_\varepsilon = \frac{f^\varepsilon - M}{\eta_\varepsilon M}. \quad (3.156)$$

Usando o resultado (teorema de Bardos, Golse e Levermore [6]), (cf. [81]), tem-se:

Para cada  $\varepsilon > 0$ , seja  $f^\varepsilon$  a solução de (3.153) - (3.154). Assuma-se que

- $g_\varepsilon = \frac{f^\varepsilon - M}{\eta_\varepsilon M} \rightarrow g$ , no sentido das distribuições em  $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3$ ,
- $f^\varepsilon$  satisfaz as leis da conservação local da massa, da quantidade de movimento e da energia (3.117 - 3.119), e
- $\langle v g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle v g \rangle = u$
- $\langle \frac{1}{2} (|v|^2 - 5) g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle \frac{1}{2} (|v|^2 - 5) g \rangle = \frac{5}{2} T$ ,

enquanto,

- $\mathcal{L}_M g^\varepsilon \rightarrow \mathcal{L}_M g$ ,
- e todos os termos formalmente pequenos tendem para zero no sentido das distribuições quando  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Assuma-se ainda que
- $\langle v \otimes v g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle v \otimes v g \rangle$ ,
- $\langle B g^\varepsilon \rangle \rightarrow \langle B g \rangle$ ,
- $\langle A^* Q_M(g^\varepsilon, g^\varepsilon) \rangle \rightarrow \langle A^* Q_M(g, g) \rangle$ ,
- $\langle B^* Q_M(g^\varepsilon, g^\varepsilon) \rangle \rightarrow \langle B^* Q_M(g, g) \rangle$ ,

no sentido das distribuições em  $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3$ .

Então,  $g$  é da forma (3.132),

$$g(t, x, v) = u(t, x) \cdot v + T(t, x) \frac{1}{2} (|v|^2 - 5),$$

onde  $(u, T)$  satisfazem o sistema de Euler incompressível:

$$\operatorname{div}_x u = 0,$$

$$\partial_t u + \operatorname{div}_x(u \otimes u) + \nabla_x p = 0,$$

$$\partial_t T + \operatorname{div}_x(uT) = 0.$$

### Comentários finais:

Neste capítulo apresentam-se deduções formais das principais equações da mecânica de fluídos que surgem como limites da equação de Boltzmann. Em particular, das equações de Euler e de Navier-Stokes, para escoamentos de fluídos compressíveis, bem como, para os incompressíveis. Em todas as deduções, partiu-se da equação de Boltzmann adimensional. Os parâmetro adimensionais que têm o papel mais importantes na análise destes limites, chamados limites hidrodinâmicos, são o número de Knudsen  $Kn$ , que fornece a noção de rarefação do gás (sendo que valores pequenos re-presentam gases suficientemente densos para que ocorram interações e a hipótese do *continuum* seja válida), o número de Mach,  $Ma$ , que traduz o grau de incompres-

-sibilidade e o número de Reynolds,  $Re$ , que está relacionado com a viscosidade do fluido. O comportamento assintótico da equação de Boltzmann adimensional, no limite  $Ma = 1$  e  $Kn \rightarrow 0$ , conduz ao estudo da dinâmica de um fluido compressível. Por sua vez, no limite  $Ma = Kn \rightarrow 0$ , ao estudo da dinâmica de um fluido incompressível. Entende-se que a equação de Boltzmann (modelo à escala mesoscópica) e as correspondentes equações hidrodinâmicas (modelos à escala macroscópica) são assintoticamente equivalentes, se as soluções são próximas uma das outras, numa norma apropriada.

Começou por deduzir-se as equações de Euler compressíveis, primeiro, através do procedimento de mudança de escala (hiperbólica), isto é, com uma mudança na variável tempo  $t \rightarrow \varepsilon^{-1}t$  e na variável espaço  $x \rightarrow \varepsilon^{-1}x$ , e depois, através da expansão de Hilbert. Em segundo, as equações de Navier-Stokes compressíveis viscosas, são deduzidas como uma correção de primeira ordem das equações de Euler compressíveis, através da expansão de Chapman-Enskog. Esta correção da expansão assintótica permite obter os termos de dissipação, isto é, o termo de viscosidade e o de condução de calor. Por sua vez, estas equações não podem ser deduzidas por um argumento de escala. Isto deve-se ao facto de existirem nas equações operadores de primeira e segunda ordem. Assim, não existe qualquer invariância de escala tempo-espaço para as equações de Navier-Stokes compressíveis. Para os fluídos incompressíveis, a dedução formal das equações foi obtida seguindo a técnica dos chamados métodos dos momentos de Grad, o que implicou cálculos similares no tratamento da correção de primeira ordem na expansão de Chapman-Enskog, em especial, no cálculo dos termos de dissipação. Além disso, também se utilizou o procedimento de escala (parabólica ou difusiva), na variável tempo  $t \rightarrow \varepsilon^{-2}t$  e na variável espaço  $x \rightarrow \varepsilon^{-1}x$ . A solução da equação de Boltzmann é procurada na forma de uma perturbação ao estado Maxwelliano uniforme. Por fim, apresentou-se a dedução formal das equações de Euler incompressíveis ( $Ma \rightarrow 0$ ) da equação de Boltzmann, no chamado limite não viscoso ( $Re \rightarrow \infty$ ).

Os sistemas de Euler e Navier-Stokes são modelos bem estabelecidos na mecânica do meio *continuum* que se aplicam aos fluídos (Newtonianos) em geral (por exemplo, para líquidos), e não apenas aos gases. Os limites hidrodinâmico da equação de Boltzmann devem ser vistos como uma informação qualitativa sobre o comportamento das soluções da equação de Boltzmann, em alguns regimes assintóticos, cuja compatibilidade com as hipóteses físicas, na qual se baseia a teoria cinética, devem ser sempre verificadas.

Para uma apresentação muito detalhada dos progressos mais recentes sobre questões no contexto da análise assintótica formal, especificamente, as expansões assintóticas propostas por Hilbert, Chapman e Enskog na década de 1910, refere-se [167]. Outros resultados matemáticos completos nesse sentido também foram obtidos nos últimos 40 anos. Por exemplo, o sistema de Euler da dinâmica dos gases foi rigorosamente deduzido a partir da equação de Boltzmann [33] [149]. Modelos de fluídos incompressíveis também foram estabelecidos rigorosamente como limites de escala da equação de Boltzmann [132], [77] para o caso das equações de Stokes, [52], [7], [78], [82], [128], para o caso das equações de Navier-Stokes incompressíveis e [25], [132], [80], para o caso das equações de Euler incompressíveis.



# Capítulo 4

## A Equação de Boltzmann Discreta

O âmbito deste capítulo é apresentar os modelos de velocidades discretas da equação de Boltzmann. Estes modelos resultam da discretização do espaço das velocidades na equação de Boltzmann, permitindo a substituição das equações integro-diferenciais não-lineares por um sistema hiperbólico de equações diferenciais parciais semi-lineares. Este sistema de equações cinéticas descreve a evolução no tempo e no espaço das densidades numéricas  $N_i$  de moléculas com velocidades  $v_i$  que só podem alcançar um número finito de velocidades. Este capítulo é constituído por quatro secções. Na secção 4.1 apresenta-se o modelo geral de um gás com distribuição de velocidades discretas. Na secção 4.2, analisam-se as grandezas macroscópicas do modelo. Na secção 4.3 abordam-se as propriedades físicas do operador de colisão, nomeadamente, os invariantes de colisão, a equação de transporte, as equações de conservação, o Teorema- $H$  de Boltzmann e o estado de equilíbrio Maxwelliano. Por último, na secção 4.4, apresentam-se alguns exemplos de modelos de velocidades discretas.

### 4.1 Equação de Boltzmann Discreta

Considere-se um gás monoatômico constituído por moléculas idênticas de massa  $m$  que se movem no espaço  $\mathbb{R}^n$ ,  $n = 1, \dots, 3$ . Cada molécula pode mover-se apenas com uma velocidade  $v_i$  pertencente a um conjunto  $V_D$  de  $p$  vetores fixos de  $\mathbb{R}^n$ :

$$V_D = \{v_i \in \mathbb{R}^3 : i = 1, \dots, p\}. \quad (4.1)$$

Somente podem ocorrer colisões binárias entre moléculas e, para descrever este mecanismo de colisão, apenas estamos interessados nas velocidades das moléculas

antes da colisão,  $v_i$  e  $v_j$ , e depois da colisão,  $v_k$  e  $v_l$ . Além disso, para cada par  $(v_i, v_j)$  que é dado devemos procurar o par de velocidades  $(v_k, v_l)$  para o qual se verificam a conservação da quantidade de movimento e da energia cinética (colisão elástica):

$$\begin{cases} v_i + v_j = v_k + v_l \\ |v_i|^2 + |v_j|^2 = |v_k|^2 + |v_l|^2 \end{cases} \quad (4.2)$$

Das expressões (4.2) obtém-se (cf. [71]):

$$(v_i + v_j)^2 = (v_k + v_l)^2,$$

$$v_i \cdot v_j = v_k \cdot v_l,$$

$$(v_i - v_j)^2 = (v_k - v_l)^2,$$

verificando-se, portanto, que a esfera com diâmetro  $\|v_i - v_j\|$  é idêntica à esfera de diâmetro  $\|v_k - v_l\|$ .

Quando duas moléculas com velocidades  $v_i$  e  $v_j$  colidem, existe uma probabilidade  $a_{ij}^{kl}$  das suas velocidades depois da colisão serem  $v_k$  e  $v_l$ . Esta probabilidade  $a_{ij}^{kl}$  é designada por *probabilidade de transição* da colisão  $(v_i, v_j) \rightarrow (v_k, v_l)$ .

Uma colisão  $(v_i, v_j) \rightarrow (v_i, v_j)$  é chamada colisão *trivial*. No caso da probabilidade de transição ser nula, uma colisão  $(v_i, v_j) \rightarrow (v_k, v_l)$  diz-se colisão *irrealizável*.

As condições (4.2), o princípio da indistinguibilidade das moléculas e o princípio da reversibilidade microscópica implicam que (cf. [156]):

- (1)  $\sum_{k,l=1}^p a_{ij}^{kl} = 1$ ;
- (2)  $a_{ij}^{kl} = 0$  se não se verificam as condições (4.2);
- (3)  $a_{im}^{in} = 0$  se  $n \neq m$ ;
- (4)  $a_{kl}^{ii} = a_{ii}^{kl} = 0$  se  $k \neq i \vee l \neq i$ ;
- (5)  $a_{ij}^{kl} = a_{ij}^{lk} = a_{ji}^{kl}$  (simetria)
- (6)  $a_{ij}^{kl} = a_{kl}^{ij}$  (microreversibilidade)

De realçar que a condição de simetria (5) se deve ao facto de não distinguirmos as moléculas. A condição (6), semelhante ao princípio da reversibilidade microscópica, significa que, após uma colisão entre moléculas com velocidades  $v_i$  e  $v_j$  são obtidos com a mesma probabilidade todos os pares possíveis, e é uma consequência das condições (4.2).

Seja  $N_i = N_i(t, x)$ ,  $i = 1, \dots, p$ ,  $t \in \mathbb{R}^+$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$ , a densidade numérica de moléculas com velocidade  $v_i$  no instante  $t$ . Ou seja, é uma função diferenciável tal que, dado um domínio mensurável  $\mathcal{D}$ , o integral

$$\int_{\mathcal{D}} N_i(t, x) dx \quad (4.3)$$

dá o número de moléculas com velocidade  $v_i$  que no instante  $t$  ocupam uma posição em  $\mathcal{D}$ .

A expressão  $N_i(t, x)dx$  representa heurísticamente o número provável de moléculas com velocidade  $v_i$  num volume elementar  $dx$  na vizinhança do ponto  $x$  no instante  $t$ . Quando o tempo de colisão é muito curto, comparado com o tempo da trajetória livre média, e quando o raio de ação do potencial intermolecular é muito pequeno, em relação ao caminho livre médio, o número de colisões  $(v_i, v_j) \rightarrow (v_k, v_l)$  que ocorrem no volume  $dx$  durante o intervalo de tempo  $[t, t + dt]$  é igual a

$$A_{ij}^{kl}(N_i N_j) dx dt,$$

onde  $A_{ij}^{kl}$  é o chamado *coeficiente de transição* da colisão  $(v_i, v_j) \rightarrow (v_k, v_l)$ . Este coeficiente é igual a

$$A_{ij}^{kl} = S |v_i - v_j| a_{ij}^{kl} \quad (4.4)$$

onde  $S > 0$  é uma constante do modelo, chamada secção eficaz de colisão,  $|v_i - v_j|$  é a velocidade relativa das moléculas envolvidas e  $a_{ij}^{kl}$  a probabilidade associada à colisão em causa.

Consequentemente, o coeficiente de transição verifica as condições:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{ij}^{kl} \geq 0, \\ A_{ij}^{kl} = A_{ji}^{kl} = A_{ij}^{lk} \quad (\text{simetria}), \\ A_{ij}^{kl} = A_{kl}^{ij} \quad (\text{microreversibilidade}). \end{array} \right. \quad (4.5)$$

Seguindo o raciocínio utilizado por Boltzmann, e considera-se ainda a hipótese de caos molecular, isto é, que não existe qualquer correlação entre as velocidades das moléculas que colidem antes de estas entrarem em interação. Assim, obtêm-se as equações de balanço para as densidades numéricas  $N_i$  de um gás que evolui na ausência de forças exteriores (cf. [71]):

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial x} = G_i - P_i, \quad i \in I_p \quad (4.6)$$

onde  $G_i$  e  $P_i$  representam, respetivamente, os ganhos e as perdas de moléculas com velocidade  $v_i$  devido a colisões durante uma unidade de tempo e numa unidade de volume, no instante  $t$ , no ponto  $x$ . Uma colisão do tipo  $(v_i, v_j) \longrightarrow (v_k, v_l)$  é designada de não-trivial se o par  $(v_i, v_j)$  é diferente do par  $(v_k, v_l)$ . Considera-se que existe ganho de uma molécula com velocidade  $v_i$  quando esta resulta de uma colisão não-trivial e que existe perda de moléculas com velocidade  $v_i$  se da interação com outra molécula com velocidade  $v_j$  ( $j \neq i$ ) resulta uma colisão não-trivial. Assim, obtêm-se

$$G_i - P_i = \sum_j \sum_{(k,l)} A_{kl}^{ij} (N_k N_l) - A_{ij}^{kl} (N_i N_j), \quad i, j, k, l \in I_p. \quad (4.7)$$

Utilizando a relação de microreversibilidade  $A_{ij}^{kl} = A_{kl}^{ij}$  e considerando o somatório sobre o índices  $j, k$  e  $l$ , em vez do par  $(k, l)$ , obtêm-se o seguinte sistema hiperbólico de equações diferenciais parciais semi-linear (cf., por exemplo, [71])

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial x} = \frac{1}{2} \sum_{j,k,l} A_{ij}^{kl} (N_k N_l - N_i N_j), \quad i \in I_p, \quad (4.8)$$

com  $I_p = \{1, \dots, p\}$ . Esta expressão irá reger a evolução deste gás com uma distribuição discreta de velocidades. As  $p$  equações (4.8) denominam-se *equações cinéticas*. O segundo membro é obtido fazendo o balanço das perdas e dos ganhos de moléculas com velocidade  $v_i$  resultantes das colisões binárias do tipo elástico.

Com o objetivo de passar o sistema das equações cinéticas à forma matricial, introduza-se o operador bilinear simétrico definido por

$$\mathbf{J} : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^p,$$

$$(\mathbf{U}, \mathbf{V}) \mapsto \mathbf{J}(\mathbf{U}, \mathbf{V}),$$

que a cada par de vetores  $\mathbf{U} = (U_1, U_2, \dots, U_p)$  e  $\mathbf{V} = (V_1, V_2, \dots, V_p)$  de  $\mathbb{R}^p$  associa o vetor  $\mathbf{J}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) \in \mathbb{R}^p$  com componentes  $J_i(\mathbf{U}, \mathbf{V})$  definidas por

$$J_i(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \frac{1}{4} \sum_{j,k,l} A_{ij}^{kl} (U_k V_l + U_l V_k - U_i V_j - U_j V_i). \quad (4.9)$$

O operador  $\mathbf{J}$  é denominado *operador de colisões binárias*.

Sejam ainda  $\mathcal{A}$  o operador matricial diagonal de ordem  $p$  definido por  $\mathcal{A}_{ii} = \delta_{ij} v_i \cdot \nabla$  e  $\mathbf{N} = (N_1, N_2, \dots, N_p) \in \mathbb{R}^p$ . O sistema (4.8) pode então escrever-se na forma matricial

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial t} + \mathcal{A} \cdot \mathbf{N} = \mathbf{J}(\mathbf{N}, \mathbf{N}). \quad (4.10)$$

Esta equação tem a estrutura formal da equação de Boltzmann da teoria cinética clássica (cf. equação (2.2)) e, por isso, é chamada *equação de Boltzmann discreta* ou também *modelo de velocidade discreta*, que de forma abreviada será referida pelo acrónimo *MVD*.

## 4.2 Grandezas macroscópicas

A descrição microscópica da evolução de um gás é feita a partir do conhecimento de todas as densidades  $N_i, i \in I_p$ , enquanto que a correspondente descrição macroscópica depende apenas de certas grandezas chamadas valores médios.

Designemos por *densidade numérica*

$$n(t, x) = \sum_{i \in I_p} N_i(t, x). \quad (4.11)$$

Introduza-se a função contínua da velocidade

$$\Phi : V_D \rightarrow \mathbb{R}^p,$$

com  $\Phi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_p)$ , e componentes  $\phi_i = \phi(v_i), i \in I_p$ , onde  $\phi$  é uma função definida em  $V_D$  e com valores em  $\mathbb{R}$ .

O valor médio de  $\phi$ , com respeito a  $\mathbf{N} = (N_1, N_2, \dots, N_p) \in \mathbb{R}^p$  é dado por

$$\bar{\phi} = \frac{1}{n} \langle \Phi, \mathbf{N} \rangle = \frac{1}{n} \sum_i \phi_i N_i. \quad (4.12)$$

As grandezas macroscópicas do modelo são definidas à semelhança de (2.39) - (2.45), passando os integrais a somas finitas estendidas às velocidades de  $V_D$ . Assim, introduzem-se, por exemplo,

a *massa volúmica*

$$\rho(t, x) = mn(t, x), \quad (4.13)$$

onde  $m$  representa a massa de cada molécula;

a *velocidade média*

$$U(t, x) = \frac{1}{n(t, x)} \sum_{i \in I_p} N_i(t, x) v_i, \quad (4.14)$$

o *tensor das tensões*  $IP$ , a *pressão*  $p$  e a *energia interna por unidade de volume*  $\rho e$  definidos, respetivamente, por

$$IP_{\alpha\beta}(t, x) = m \sum_{i \in I_p} N_i(t, x) (v_{i\alpha} - U_\alpha)(v_{i\beta} - U_\beta), \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3, \quad (4.15)$$

$$p(t, x) = \frac{m}{3} \sum_{i \in I_p} N_i(t, x) |v_i - U|^2, \quad (4.16)$$

$$(\rho e)(t, x) = \frac{m}{2} \sum_{i \in I_p} N_i(t, x) |v_i - U|^2, \quad (4.17)$$

o *fluxo térmico*  $\vec{q}$ , de componentes

$$q_\alpha(t, x) = \frac{m}{2} \sum_{i \in I_p} N_i(t, x) |v_i - U|^2 (v_{i\alpha} - U_\alpha), \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (4.18)$$

a *temperatura*  $T$ , de acordo com a equação (2.45),

$$T(t, x) = \frac{m}{3k_B n} \sum_{i \in I_p} N_i(t, x) |v_i - U|^2. \quad (4.19)$$

Em particular, se as moléculas têm a mesma velocidade em módulo,  $|v_i| = c$ , então

$$T(t, x) = \frac{m}{3k_B} (c^2 - U^2) \leq \frac{mc^2}{3k_B} = T_M \quad (4.20)$$

e o valor máximo da temperatura  $T_M$  ocorre quando o gás está em repouso.

### 4.3 Propriedades físicas do operador de colisão

De forma análoga à teoria cinética clássica a caracterização dos invariantes de colisão irá permitir obter as equações de conservação do modelo na forma clássica.

Define-se invariante de colisão como uma função da velocidade que permanece constante durante todas as colisões realizáveis. Para um gás com uma distribuição discreta de velocidade, define-se *invariante de colisão* como sendo uma função vetorial  $\Phi \in \mathbb{R}^p$ , tal que para todas as colisões binárias  $(v_i, v_j) \longleftrightarrow (v_k, v_l)$  realizáveis, se tem

$$\phi_i + \phi_j = \phi_k + \phi_l.$$

Dada uma função vetorial contínua da velocidade,  $\Phi$ , considere-se

$$I_\Phi = \sum_{i \in I_p} \phi_i(v) J_i(\mathbf{N}, \mathbf{N}). \quad (4.21)$$

Facilmente se obtém

$$I_\Phi = \langle \Phi, \mathbf{J}(\mathbf{N}, \mathbf{N}) \rangle = \frac{1}{8} \sum_{i,j,k,l} (\phi_i + \phi_j - \phi_k - \phi_l) A_{ij}^{kl} (N_k N_l - N_i N_j), \quad (4.22)$$

donde se conclui que

$$I_\Phi = 0, \quad (4.23)$$

independentemente dos valores de  $N_k$ ,  $N_l$ ,  $N_i$  e  $N_j$ , sempre que a correspondente função  $\Phi$  cumpra a condição

$$\phi_i + \phi_j = \phi_k + \phi_l, \quad (4.24)$$

para todas as colisões realizáveis, ou seja, sempre que

$$A_{ij}^{kl} (\phi_i + \phi_j - \phi_k - \phi_l) = 0. \quad (4.25)$$

A condição (4.25) caracteriza um invariante de colisão  $\Phi$ .

Em particular, as funções  $\phi^{(l)}$ ,  $l = 0, 1, 2, 3, 4$ , definidas por

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi^{(0)} = m(1, 1, \dots, 1) \\ \phi^{(1)} = m(v_{11}, v_{21}, \dots, v_{p1}) \\ \phi^{(2)} = m(v_{12}, v_{22}, \dots, v_{p2}) \\ \phi^{(3)} = m(v_{13}, v_{23}, \dots, v_{p3}) \\ \phi^{(4)} = \frac{1}{2}m(|v_1|^2, |v_2|^2, \dots, |v_p|^2) \end{array} \right. \quad (4.26)$$

são invariantes de colisão associadas à conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia cinética durante cada colisão. Estes invariantes são denominados *invariantes de colisão físicos*.

O conjunto dos invariantes de colisão constitui um subespaço vetorial de  $\mathbb{R}^p$ , o qual se designa por *espaço vetorial dos invariantes de colisão* e se passará a representar por  $\mathcal{F}$ . Sendo  $\dim \mathcal{F} = q$ , tem-se obviamente  $1 \leq q \leq p$ .

É ainda conveniente introduzir bases ortonormais para os espaços vetoriais  $\mathcal{F}$  e  $\mathbb{R}^p$ . Sejam,  $\mathcal{B}$  uma base ortonormada de  $\mathcal{F}$

$$\mathcal{B} = \{V^{(1)}, V^{(2)}, \dots, V^{(q)}\}, \quad (4.27)$$

e  $\mathcal{C}$  uma base ortonormada de  $\mathbb{R}^p$ ,

$$\mathcal{C} = \{V^{(1)}, V^{(2)}, \dots, V^{(q)}, W^{(q+1)}, \dots, W^{(p)}\}. \quad (4.28)$$

Assim, o vetor  $\mathbf{N} = (N_1, N_2, \dots, N_p)$  pode ser expresso como

$$\mathbf{N} = \sum_{i=1}^q a_i V^{(i)} + \sum_{j=q+1}^p b_j W^{(j)}, \quad (4.29)$$

onde

$$a_i = \langle \mathbf{N}, V^{(i)} \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, q,$$

e

$$b_j = \langle \mathbf{N}, W^{(j)} \rangle, \quad j = q + 1, q + 2, \dots, p. \quad (4.30)$$

As três propriedades seguintes são equivalentes (*cf.*, por exemplo, [71]):

- (i)  $\Phi \in \mathcal{F}$ ,
- (ii)  $\langle \Phi, \mathbf{J}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) \rangle = 0, \quad \forall \mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^p$ ,
- (iii)  $\langle \Phi, \mathbf{J}(\mathbf{N}, \mathbf{N}) \rangle = 0, \quad \forall \mathbf{N} \in \mathbb{R}^p$ .

### 4.3.1 Equação de Transporte

A equação de transporte associada à variável macroscópica  $\Phi$  é obtida, de forma análoga à da teoria cinética clássica. Assim, com a multiplicação escalar por  $\Phi$  de ambos os membros da equação matricial (4.10), obtém-se

$$\left\langle \Phi, \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial t} \right\rangle + \langle \Phi, \mathcal{A} \cdot \mathbf{N} \rangle = \langle \Phi, \mathbf{J}(\mathbf{N}, \mathbf{N}) \rangle. \quad (4.31)$$

Usando os seguintes resultados (*cf.* [71]), para as parcelas do membro esquerdo da última equação, expressos em termos do valor médio  $\bar{\phi}$ , vem

$$\left\langle \Phi, \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \Phi, \mathbf{N} \rangle}{\partial t} - \left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \mathbf{N} \right\rangle = \frac{\partial(n\bar{\phi})}{\partial t} - n \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t}, \quad (4.32)$$

e

$$\langle \Phi, \mathcal{A} \cdot \mathbf{N} \rangle = \sum_{i \in I_p} \phi_i v_i \cdot \nabla_x N_i. \quad (4.33)$$

A equação de transporte (4.31) pode escrever-se na forma

$$\frac{\partial(n\bar{\phi})}{\partial t} - n \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \sum_{i \in I_p} \phi_i v_i \cdot \nabla_x N_i = \langle \Phi, \mathbf{J}(\mathbf{N}, \mathbf{N}) \rangle. \quad (4.34)$$

### 4.3.2 Equações de Conservação

Se  $\Phi$  é independente da posição e do tempo, então a equação de transporte associada à grandeza  $\Phi$ , (4.31) ou (4.34), é uma equação de conservação se o segundo membro da equação é nulo, isto é, se

$$I_\Phi = \langle \Phi, \mathbf{J}(\mathbf{N}, \mathbf{N}) \rangle = \frac{1}{8} \sum_{i,j,k,l} (\phi_i + \phi_j - \phi_k - \phi_l) A_{ij}^{kl} (N_k N_l - N_i N_j) = 0. \quad (4.35)$$

Da equação (4.31), usando os últimos resultados (i) e (ii), isto é, que  $I_\Phi = 0$  se e sómente se  $\Phi$  é um invariante de colisão, obtemos a equação de conservação na forma

$$\left\langle \Phi, \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial t} \right\rangle + \langle \Phi, \mathcal{A} \cdot \mathbf{N} \rangle = 0, \quad \forall \Phi \in \mathcal{F}. \quad (4.36)$$

ou, de forma semelhante, a partir da equação (4.34), obtém-se a equação de conservação na forma

$$\frac{\partial(n\bar{\phi})}{\partial t} - n \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \sum_{i \in I_p} \phi_i v_i \cdot \nabla_x N_i = 0. \quad (4.37)$$

A cada invariante de colisão corresponde uma equação de conservação. A equação de conservação associada ao invariante de colisão  $V^{(k)}$ , obtida da equação (4.36) substituindo  $\Phi$  por  $V^{(k)}$ , é da forma

$$\left\langle V^{(k)}, \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial t} \right\rangle + \left\langle V^{(k)}, \mathcal{A} \cdot \mathbf{N} \right\rangle = 0, \quad k = 1, 2, \dots, q. \quad (4.38)$$

Este sistema de  $q$  equações não é, em geral, fechado porque contém  $p$  funções desconhecidas e frequentemente  $q < p$ . Essas funções são  $a_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, q$ , e  $b_j$ ,  $j = q + 1, q + 2, \dots, p$ . Para obter um sistema fechado, é necessário conhecer-se  $a_i$  e  $b_j$ , o que significa conhecer-se o vetor  $\mathbf{N}$ . O vetor  $\mathbf{N}$ , ou as densidades  $\{N_i\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ , fornecem a descrição microscópica do gás. As quantidades  $a_i$  são chamadas *variáveis do estado macroscópico* do gás, ou simplesmente, *variáveis macroscópicas*. De forma análoga à teoria cinética clássica, essas variáveis são a densidade  $\rho$ , a velocidade média  $U$  e a temperatura  $T$ .

A partir da equação de conservação associada a  $\Phi$ , (4.36) ou (4.37), e dos invariantes de colisão físicos (4.26), obtém-se as equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia cinética, na forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x (\rho U) = 0, \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial (\rho U)}{\partial t} + \nabla_x (\rho U \otimes U + \mathbf{IP}) = 0, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( e + \frac{1}{2} |U|^2 \right) \right] + \nabla_x \left[ \rho U \left( e + \frac{1}{2} |U|^2 \right) + U \cdot \mathbf{IP} + \vec{q} \right] = 0. \quad (4.41)$$

Atendendo às definições (4.11) - (4.18), as equações de conservação (4.39) - (4.41) são formalmente equivalentes às equações de conservação clássicas apresentadas no capítulo 2 (cf. (2.80) - (2.82)) e, em geral, não são independentes. De facto, como é sabido em teoria cinética discreta (cf., por exemplo, [71]), o número de equações de conservação independentes é muito variável, dependendo essencialmente do número de direções de velocidades seleccionadas em cada modelo.

### 4.3.3 Teorema- $H$ de Boltzmann e Irreversibilidade

Considere-se o caso de um gás homogéneo (que não depende da variável  $x$ ), em que a evolução das densidades é  $N_i(t)$  para todo o  $i \in I_p$ . Seja a função- $H$  de Boltzmann definida por

$$H(t) = \sum_{i \in I_p} N_i(t, x) \ln N_i(t) \quad (4.42)$$

e a sua derivada

$$\frac{dH}{dt}(t) = \sum_{i \in I_p} (1 + \ln N_i) \frac{dN_i}{dt}. \quad (4.43)$$

Utilizando as equações (4.8) e, a fórmula (4.35) com  $\phi_m = (1 + \ln N_m)$ , tem-se

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt}(t) &= \frac{1}{8} \sum_{i,j,k,l} [(1 + \ln N_i) + (1 + \ln N_j) - (1 + \ln N_k) - (1 + \ln N_l)] \times \\ &\quad \times A_{ij}^{kl} (N_k N_l - N_i N_j) \\ &= \frac{1}{8} \sum_{i,j,k,l} \ln \left( \frac{N_i N_j}{N_k N_l} \right) \left( 1 - \frac{N_i N_j}{N_k N_l} \right) A_{ij}^{kl} N_k N_l. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Sendo os coeficientes de transição  $A_{ij}^{kl}$  e as funções densidades  $N_k N_l$  não-negativas, e utilizando ainda o facto de a função  $(1 - x) \ln x$ , definida para valores de  $x > 0$ , ser não-positiva (sendo nula somente se  $x = 1$ ), tem-se o **Teorema- $H$  de Boltzmann** (cf. [30], [71], [145], [156] e [166]):

- (i)  $\frac{dH}{dt} \leq 0$ ;
- (ii)  $\frac{dH}{dt} = 0$  se e só se  $N_k N_l = N_i N_j$ ,  $i, j, k, l \in I_p$ .
- (iii)  $H \geq -\frac{p}{e}$ .

O resultado (i) diz-nos que a função- $H$  de Boltzmann é uma função monótona decrescente no tempo. Como consequência, a evolução do gás é um processo irreversível. Por outro lado, do resultado (iii), tem-se que a função- $H$  não pode decrescer indefinidamente ao longo do tempo. Portanto, a função- $H$  tende para um valor limite  $H^*$ , que corresponde a um estado de equilíbrio, para o qual se verifica o resultado (ii). E, assim

$$\ln N_i + \ln N_j - \ln N_k - \ln N_l = 0. \quad (4.45)$$

### 4.3.4 Equilíbrio Maxwelliano

O comportamento da função- $H$  referido anteriormente mostra que as equações cinéticas (4.8) descrevem um gás que tende a evoluir para um estado de equilíbrio para o qual se tem

$$\frac{dH}{dt} = 0. \quad (4.46)$$

Este estado diz-se de *equilíbrio Maxwelliano* ou simplesmente *estado Maxwelliano*. As correspondentes densidades, caracterizadas pela condição (4.45), dizem-se *densidades Maxwellianas* e verificam qualquer uma das seguintes condições equivalentes (*cf.*, por exemplo, [71]):

$$\begin{aligned} (i) \quad \ln \mathbf{N} & \text{ é um invariante de colisão;} \\ (ii) \quad \mathbf{J}(\mathbf{N}, \mathbf{N}) & = 0; \\ (iii) \quad \langle \ln \mathbf{N}, \mathbf{J}(\mathbf{N}, \mathbf{N}) \rangle & = 0. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Tal como em teoria cinética clássica, quando um gás se encontra em equilíbrio Maxwelliano, o segundo membro das equações cinéticas é nulo, (atenda-se à propriedade (ii) de (4.47)). Significa que as colisões entre as moléculas não contribuem para a variação das densidades  $N_i$ .

Usando ainda as propriedades (i) - (iii), mostra-se que, quando o gás se encontra em equilíbrio Maxwelliano, existem  $q$  funções  $c_i(t, x)$  associadas aos invariantes da base  $\mathcal{B}$  do espaço  $\mathcal{F}$ , tais que as densidades Maxwellianas  $\hat{N}_i$  são dadas por

$$\hat{N}_i(t, x) = \exp \left( \sum_{k=1}^q c_k(t, x) V_i^{(k)} \right), \quad i = 1, \dots, q. \quad (4.48)$$

A discretização (4.1) do espaço das velocidades  $V_D$  permitiu substituir a equação de Boltzmann (2.2) pelo sistema (4.8) de equações diferenciais de derivadas parciais. A passagem da forma integral do operador colisional para uma soma finita de parcelas conduziu a vantagens significativas, quer do ponto de vista analítico quer do ponto de vista numérico. Além disso, as equações cinéticas (4.8) possuem as propriedades essenciais da equação de Boltzmann.

Resultados de existência global para o problema de valor inicial da equação de Boltzmann discreta foram obtidos *cf.*, por exemplo, Kawashima [120], Bellomo e Gustafsson [12] e Cabannes [30].

## 4.4 Exemplos de Modelos de Velocidades Discretas

Os primeiros modelos de velocidades discretas foram propostos por Carleman em 1957, com duas velocidades, e por Broadwell em 1964, com seis e oito velocidades. Gatignol, em 1975 escreveu a forma geral da equação que representa os modelos discretos da equação de Boltzmann.

Para modelos ou situações especiais, a teoria destes modelos de velocidades discretas revela-se mais fácil do que a da equação de velocidades contínuas.

### 4.4.1 Modelo de Carleman

Em 1957, Carleman [35] propôs um modelo que descreve a evolução temporal de um gás fictício composto por duas espécies de moléculas que se movem a uma velocidade constante  $c > 0$  na direção do eixo- $x$ .

O modelo de Carleman é unidimensional e tem somente duas velocidades discretas  $+c$  e  $-c$ , sendo descrito por duas equações diferenciais às derivadas parciais semi-lineares:

$$\begin{cases} \frac{\partial N_1}{\partial t} + c \frac{\partial N_1}{\partial x} = cS(N_2N_2 - N_1N_1), \\ \frac{\partial N_2}{\partial t} - c \frac{\partial N_2}{\partial x} = cS(N_1N_1 - N_2N_2), \end{cases} \quad (4.49)$$

onde  $N_1(x, t)$  e  $N_2(x, t)$  são o número de partículas, no instante  $t \geq 0$  e posição  $-\infty < x < +\infty$ , que se deslocam respetivamente com velocidade  $v_1 = c$  e  $v_2 = -c$ .

Este modelo tem várias propriedades semelhantes às da equação de Boltzmann, e em particular, verifica a lei de conservação da massa e um teorema- $H$ .

O modelo de Carleman, do ponto de vista físico, é um modelo não realista. Em particular, o mecanismo de colisões não verifica a lei de conservação da quantidade de movimento. Foram amplamente estudados por Kolodner [124], Illner [113] e Shinbrot [165].

#### 4.4.2 Modelo de Broadwell com seis velocidades

Em 1964, Broadwell [28], [27] descreve modelos discretos simples que são utilizados para resolver problemas da dinâmica de gases rarefeitos para os quais a equação de Boltzmann é aplicável.

O modelo de Broadwell com seis velocidades, é um modelo tridimensional que descreve um gás rarefeito composto por moléculas com a mesma massa, que se movem ao longo de três eixos coordenados perpendiculares, com o mesmo módulo de velocidade  $c$ . Os resultados de uma colisão particular têm a mesma probabilidade e são consideradas apenas colisões binárias. As funções  $N_i(x, t)$ ,  $i = 1, \dots, 6$ , denotam as densidades numéricas de moléculas com velocidade  $v_i$  que se movem nas seis direções permitidas (cf. Figura 4.1).

O sistema de Broadwell, da teoria cinética discreta, é dado pelo sistema de equações diferenciais parciais

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + c \frac{\partial N_i}{\partial x} = G_i - P_i, \quad i = 1, \dots, 6. \quad (4.50)$$

Broadwell [28], tomando como exemplo a molécula  $i = 1$ , deu, nessa altura, uma explicação para a taxa de variação de  $N_1$ , como sendo o resultado do balanço dos ganhos  $G_1$  e das perdas  $P_1$  de moléculas com velocidade  $v_1$ , ao longo do tempo, devido a colisões.

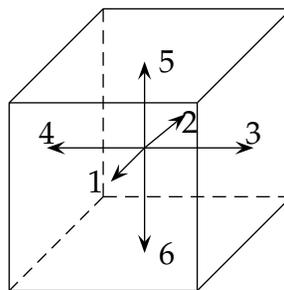


Figura 4.1. O modelo de Broadwell com 6 velocidades.

No caso de ocupantes da célula 1 colidirem com ocupantes de quaisquer outras células, as parceiras de colisão podem voltar para as suas células originais, ou permutar de lugar, não havendo perda ou ganho de moléculas a partir da célula 1.

A perda de moléculas a partir da célula 1 ocorre apenas quando estas moléculas colidem com as da célula 2, isto é, quando as parceiras de uma colisão 1 – 2 podem ser deflectidas para as células 3 e 4 ou 5 e 6 (ou podem retornar às células 1 e 2). Sendo a dispersão esfericamente simétrica para esferas elásticas duras, a secção eficaz de choque  $\sigma$  para todas as colisões binárias possíveis é idêntica, e os três pares de células são destinos igualmente prováveis para as moléculas que colidem. Assim, em duas das três colisões 1 – 2 podem perder-se moléculas a partir da célula 1, e

$$P_1 = \frac{2}{3}|v_r|SN_1N_2,$$

sendo  $|v_r| = 2c$  a velocidade relativa entre as moléculas 1 e 2 e  $S$  a secção eficaz da colisão binária.

De forma semelhante, as moléculas são atiradas para a célula 1 a partir das colisões 3 – 4 e 5 – 6, obtendo-se

$$G_1 = \frac{1}{3}|v_r|S(N_3N_4 + N_5N_6). \quad (4.51)$$

A equação (4.50) para a célula 1 é, então, dada por:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} + c \frac{\partial N_1}{\partial x} = \frac{2}{3}cS(N_3N_4 + N_5N_6 - 2N_1N_2).$$

Equações semelhantes são obtidas para as outras cinco células de velocidade  $v_i$ ,  $i = 2, \dots, 5$ , obtendo-se as equações cinéticas (*cf.* [28])

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial N_1}{\partial t} + c \frac{\partial N_1}{\partial x} = \frac{2}{3}cS(N_3N_4 + N_5N_6 - 2N_1N_2) \\ \frac{\partial N_2}{\partial t} - c \frac{\partial N_2}{\partial x} = \frac{2}{3}cS(N_3N_4 + N_5N_6 - 2N_1N_2) \\ \frac{\partial N_3}{\partial t} + c \frac{\partial N_3}{\partial x} = \frac{2}{3}cS(N_1N_2 + N_5N_6 - 2N_3N_4) \\ \frac{\partial N_4}{\partial t} - c \frac{\partial N_4}{\partial x} = \frac{2}{3}cS(N_1N_2 + N_5N_6 - 2N_3N_4) \\ \frac{\partial N_5}{\partial t} + c \frac{\partial N_5}{\partial x} = \frac{2}{3}cS(N_1N_2 + N_3N_4 - 2N_5N_6) \\ \frac{\partial N_6}{\partial t} - c \frac{\partial N_6}{\partial x} = \frac{2}{3}cS(N_1N_2 + N_3N_4 - 2N_5N_6) \end{array} \right. \quad (4.52)$$

### 4.4.3 Modelo de Broadwell - dimensão 1

Um caso particular deste último modelo matemático da cinética dos gases foi proposto por Broadwell (*cf.* [28]). Ele aplica-se a fluxos de gás com velocidades discretas sujeito a um simples mecanismo de colisões binárias, em que as densidades numéricas  $N_i$  são independentes de  $y$  e  $z$ , e para as quais  $N_3 = N_4 = N_5 = N_6$ . O movimento do gás é considerado unidimensional em  $x$  e o sistema de equações (4.52) se reduz à forma particularmente simples

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial N_1}{\partial t} + c \frac{\partial N_1}{\partial x} = \frac{4}{3} c S (N_3^2 - N_1 N_2), \\ \frac{\partial N_2}{\partial t} - c \frac{\partial N_2}{\partial x} = \frac{4}{3} c S (N_3^2 - N_1 N_2), \\ \frac{\partial N_3}{\partial t} = \frac{2}{3} c S (N_1 N_2 - N_3^2) \end{array} \right. \quad (4.53)$$

onde  $N_1 = N_1(t, x)$  e  $N_2 = N_2(t, x)$  são os números de moléculas por unidade de volume que se deslocam ao longo do eixo  $x$ , com velocidades  $(+c, 0, 0)$  e  $(-c, 0, 0)$ , respetivamente.

Este modelo tem várias propriedades semelhantes às da equação de Boltzmann. Em particular, verifica a lei de conservação da massa, a lei de conservação da quantidade de movimento e o teorema- $H$ . Portanto, este modelo apesar de ser relativamente simples para ser tratado de forma matemática, contém as propriedades físicas interessantes para o estudo das equações cinéticas e das equações da dinâmica de fluídos. Por estas razões foi amplamente estudado. Resultados de existência de soluções globais para o problema de valor inicial da equação de Boltzmann discreta, foram obtidos por Nishida and Mimura [147], Tartar [172], Inoue e Nishida [115], Cabannes [29], Beale [9] e Platkowski e Illner [156]. Caflish e Papanicolaou [32], [34], obtiveram resultados rigorosos sobre limites hidrodinâmicos. Demonstraram que as soluções do modelo de Broadwell unidimensional convergem fracamente para as soluções das equações da dinâmica de fuidos. Soluções exactas não triviais e fisicamente aceitáveis foram obtidas por Cornille [48], [49].

#### 4.4.4 Modelo de Broadwell com oito velocidades

O Modelo de Broadwell com 8 velocidades, também é tridimensional. As velocidades  $\{v_i\}$  são os oito vetores que unem o centro de um cubo com os seus vértices. Essas velocidades são (cf. Figura 4.2)

$$v_1 = c(1, 1, 1), \quad v_2 = c(1, -1, 1), \quad v_3 = c(-1, 1, 1), \quad v_4 = c(-1, -1, 1),$$

$$v_5 = c(1, 1, -1), \quad v_6 = c(1, -1, -1), \quad v_7 = c(-1, 1, -1), \quad v_8 = c(-1, -1, -1).$$

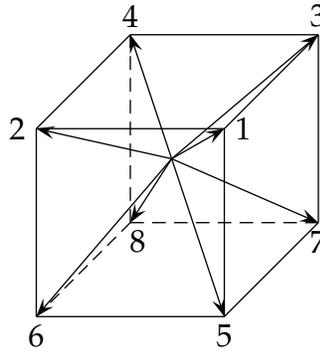


Figura 4.2. O modelo de Broadwell com 8 velocidades.

As colisões não triviais são de dois tipos. Começando a analisar as colisões do tipo

$$(v_1, v_4) \longleftrightarrow (v_2, v_3), \quad (v_1, v_6) \longleftrightarrow (v_2, v_5), \quad (v_1, v_7) \longleftrightarrow (v_3, v_5),$$

$$(v_2, v_8) \longleftrightarrow (v_4, v_6), \quad (v_3, v_8) \longleftrightarrow (v_4, v_7), \quad (v_5, v_8) \longleftrightarrow (v_6, v_7),$$

existem seis colisões possíveis. Assim, tem-se as seguintes probabilidades associadas às respectivas colisões

$$a_{14}^{23} = a_{16}^{25} = a_{17}^{35} = a_{28}^{46} = a_{38}^{47} = a_{58}^{67} = \frac{1}{2}. \quad (4.54)$$

Sendo  $|v_r| = 2\sqrt{2}c$ , neste tipo de colisão, e  $S > 0$ , de acordo com (4.4), os correspondentes coeficientes de transição da colisão, são

$$A_{14}^{23} = A_{16}^{25} = A_{17}^{35} = A_{28}^{46} = A_{38}^{47} = A_{58}^{67} = \sqrt{2}cS. \quad (4.55)$$

O outro tipo de colisões, não triviais, são

$$(v_1, v_8) \longleftrightarrow (v_2, v_7) \longleftrightarrow (v_3, v_6) \longleftrightarrow (v_4, v_5).$$

Também existem, neste caso, seis colisões possíveis e, assim, as probabilidades associadas às colisões são

$$a_{18}^{27} = a_{18}^{36} = a_{18}^{45} = a_{27}^{36} = a_{36}^{45} = a_{27}^{45} = \frac{1}{4}. \quad (4.56)$$

Sendo agora  $|v_r| = 2\sqrt{3}$ , tem-se que os coeficientes de transição das colisões são

$$A_{18}^{27} = A_{18}^{36} = A_{18}^{45} = A_{27}^{36} = A_{36}^{45} = A_{27}^{45} = \frac{\sqrt{3}}{2}cS. \quad (4.57)$$

A equação de evolução para a função distribuição de partículas com velocidade na direção 1, é da forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_1}{\partial t} + v_1 \frac{\partial N_1}{\partial x} = & \sqrt{2}cS (N_2N_3 - N_1N_4 + N_2N_5 - N_1N_6 + N_3N_5 - N_1N_7) \\ & + \frac{\sqrt{3}}{2}cS (N_2N_7 - N_1N_8 + N_3N_6 - N_1N_8 + N_4N_5 - N_1N_8), \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_1}{\partial t} + v_1 \frac{\partial N_1}{\partial x} = & \sqrt{2}cS (N_2N_3 + N_2N_5 + N_3N_5 - N_1N_4 - N_1N_6 - N_1N_7) \\ & + \frac{\sqrt{3}}{2}cS (N_2N_7 + N_3N_6 + N_4N_5 - 3N_1N_8). \end{aligned} \quad (4.58)$$

A ideia de considerar modelos para os quais a distribuição de velocidades é discreta, surgiu no estudo da teoria cinética dos gases. Primeiro por Maxwell, em 1890 e, passados mais de 60 anos, foi considerado novamente por Carleman.

Broadwell [28], [27], em 1974, desenvolveu o primeiro modelo de velocidades discretas como uma ferramenta para descrever a estrutura de uma onda de choque

num gás. O sucesso deste modelo simples inspirou uma grande quantidade de trabalhos em modelos de velocidades discretas. Desde essa altura, surgiram resultados de existência global, unicidade e comportamento assintótico de soluções de modelos de velocidades discretas [112] - [113], [96], [97], [174], [10], [9], [120] - [122], [14] - [18], Bellouquid [15] - [16]. Para modelos de maior complexidade, destacam-se os trabalhos de Nishida e Mimura [147], Tartar [172], Cabannes [29], Kawashima [119]-[122], Illner [114], Beale [9], [10] e Alves [1].

Soluções exatas de determinados modelos com velocidades discretas, aplicados a diferentes escoamentos, tais como o escoamento de Couette e o escoamento de Rayleigh, ondas de choque, e propagação do som, foram discutidas por muitos autores (*cf.*, por exemplo, Cabannes [31], Gatignol [72], [73], Illner [113] e Valougeorgis e Naris [180]).



# Capítulo 5

## A equação de *lattice* Boltzmann

O objetivo deste capítulo é apresentar o método de *lattice*<sup>1</sup> Boltzmann (LBM-*Lattice Boltzmann Method*). Os modelos *lattice* Boltzmann surgiram, inicialmente, a partir dos chamados modelos *Lattice-Gas Automata Cellular*. Mais recentemente, provou-se que eles são uma versão discretizada, da equação de Boltzmann, em particular, dos modelos de velocidade discreta (ou equação de Boltzmann discreta). Por uma questão de enquadramento e melhor compreensão da evolução dos modelos, começa-se com uma descrição dos *Cellular Automata*, na secção 5.1. Na subsecção 5.1.1 faz-se referência aos modelos *Lattice-Gas Automata Cellular*, que são uma classe de *Cellular Automata*, para o estudo da dinâmica de fluídos. Na secção 5.2 apresenta-se o designado *Lattice Boltzmann Method*. Na subsecção 5.2.1, aborda-se a passagem formal do modelo *Lattice-Gas Automata Cellular* à equação de Boltzmann contínua. Na subsecção 5.2.2, analisa-se a obtenção do modelo *lattice* Boltzmann com o operador de colisão BGK, modelo LBGK. Por último, na secção 5.3, apresenta-se uma aplicação computacional do modelo LBGK.

### 5.1 Autómatos Celulares

Um Autómato Celular (AC), do inglês, *Cellular Automata* é, por definição, um sistema dinâmico, discreto, no espaço e no tempo. É constituído por variáveis de estado finitas, ou células, dispostas sobre uma estrutura *lattice* espacial uniforme e regular, onde opera. Toda a sua dinâmica é especificada por um conjunto de regras locais (Karafyllidis e Thanailakis [118], Deutsch e Dormann [55]).

---

<sup>1</sup>Optou-se pela palavra *lattice* mas eventualmente poderia ser reticulado, rede, malha ou grelha.

Uma classe de AC, usada na simulação da dinâmica de fluídos é o modelo *Lattice-Gas Cellular Automata* (LGCA).

Os autómatos celulares podem servir como uma estrutura alternativa para descrições matemáticas de sistemas físicos. Além disso, eles constituem modelos de computação intrinsecamente paralelos que podem ser realizados eficientemente com máquinas de autómatos celulares. Apesar da sua estrutura simples, um AC pode modelar fielmente sistemas contínuos, tais como fluídos.

Os autómatos celulares podem ser descritos de várias maneiras. Uma forma de descrever um AC está dentro de seu contexto original da teoria de cálculo (automatizado). Teoricamente, um dispositivo de computação (computador) pode ser agrupado em classes de equivalência, conhecidas como modelos de computação, e os elementos destas classes são chamados autómatos. O termo autômato celular refere-se a um modelo intrinsecamente paralelo de computação, que opera numa *lattice* regular de processadores idênticos que calculam em sincronismo, enquanto partilham informações com outros processadores.

Uma outra maneira de descrever um AC utiliza uma formulação matemática da teoria dos sistemas dinâmicos e dá uma definição mais formal em termos de conjuntos e das correspondências entre eles. Por exemplo, o estado de um AC numa *lattice* bidimensional infinita pode ser definido como uma função  $S : Z \times Z \rightarrow s$ , onde  $Z$  denota o conjunto de inteiros e  $s$  é um conjunto finito de estados das células. As definições matemáticas podem ser usadas para traduzir, com precisão, o significado dos termos intuitivos, como espaço e estado, bem como, propriedades importantes, como a simetria e a reversibilidade.

Por último, apresentamos uma outra abordagem, mais útil do ponto de vista da física. Assim, mais formalmente, um AC pode ser caracterizado como se segue (Wolf-Gladrow [185]):

- Uma *lattice* regular de  $p$  células (nós, sítios) individuais do mesmo tipo. A *lattice* é habitualmente bidimensional, embora não haja limite teórico para o número de dimensões.
- Cada célula contém um número finito (em geral pequeno) de estados discretos, que a caracteriza.

- Os estados são atualizados simultaneamente (sincronizadamente) em passos de tempo discretos.
- As regras de atualização são locais (aplicam-se a cada célula), determinísticas e uniformes no espaço e no tempo. Estas regras (geralmente únicas) determinam a dinâmica de alternância entre os estados da célula.
- As regras de evolução de uma célula dependem apenas de uma vizinhança local de células em torno dela.

De observar que nem todos estes critérios são sempre satisfeitos, uma vez que existe uma grande variedade de maneiras de descrever um AC. No entanto, esta é a que mais nos convém para os nossos propósitos.

As regras de um AC geralmente não são limitadas pelas leis de conservação, o que se revela ser uma característica importante na simulação de processos de crescimento. A propagação espacial das propriedades faz parte da regra de atualização local. Em contraste, o LGCA obedece a algumas leis de conservação e a atualização é dividida numa colisão local e numa propagação para os nós vizinhos mais próximos. Esta divisão facilita a construção de modelos com as propriedades macroscópicas desejadas (Wolfram [189]).

Os conceitos de AC foram originalmente investigados por J. von Neumann e S. Ulam [178], por volta do 1950, para fornecer um quadro formal para estudar o comportamento de sistemas extensos e complexos. John von Neumann foi uma figura central na teoria e desenvolvimento de máquinas de computação automatizadas, pelo que, não é de surpreender que o primeiro trabalho sobre AC's seja da sua autoria. Por outro lado, por sugestão de Ulam, os AC's foram introduzidos de modo a fornecer um modelo simples de autómato de auto-reprodução. O objetivo desta pesquisa foi bem sucedido, e aprofundado, ao mostrar que determinadas características essenciais da biologia podem ser capturadas na forma computacional. Em particular, no estudo de processos de crescimento e auto-reprodução. Muito do trabalho de von Neumann foi concluído e estendido por Burks [183]. A linha de investigação de AC's continuou nos anos 60 com estudos relacionados à construção, adaptação e otimização, bem como estudos sobre as propriedades puramente matemáticas dos AC's. Nos anos 70, J. Conway [47] veio dar um novo impulso a este campo de investigação, com a introdução do mais conhecido autómato celular bidimensional, o "Jogo da Vida". Este AC surge como um modelo

simples de biologia, contendo células que vivem e morrem, de acordo com algumas regras simples, e simula processos de evolução de células biológicas. Em particular, reproduz as alterações e mudanças em grupos de seres vivos, mas a sua aplicação abrange outras áreas. O Jogo da Vida tornou-se interessante para biólogos, matemáticos, estatísticos, economistas, filósofos e artistas por permitir a observação do modo como imagens complexas podem surgir de implementações de regras muito simples. Os AC's foram também aplicados a uma variedade de problemas noutros domínios. Wolfram, na década de 80, [186], [187], [188], investigou e popularizou o AC como uma ferramenta para modelar e simular *Lattice-Gas* hidrodinâmicos. Um desenvolvimento tecnológico importante durante este período, foi a introdução de hardware especial, na forma de máquinas de autómatos celulares e computadores massivamente paralelos. Esta investigação preparou o terreno para o desenvolvimento dos denominados *Lattice-Gas Cellular Automata* que se tornaram uma área independente de pesquisa.

### 5.1.1 LGCA - *Lattice-Gas Cellular Automata*

O exemplo mais simples de uma LGCA é o modelo completamente discreto e determinístico, denominado modelo HPP, proposto por Hardy, Pomeau e de Pazzis em 1973, [98], para estudar propriedades de transporte dos fluídos. As partículas são idênticas, com massa e velocidades unitárias, deslocam-se ao longo dos nós de uma *lattice* quadrada bidimensional, e estão localizadas nos nós em tempos inteiros. Além disso, não mais do que uma partícula se encontra num determinado tempo e nó, movendo-se numa determinada direção (princípio de exclusão). No caso de duas, e só duas, partículas chegarem a um determinado nó provenientes de direções opostas (colisão frontal) abandonam de imediato o nó nas outras duas direções desocupadas. Esta definição pode ser formalizada da forma seguinte. Seja  $L$  uma *lattice* quadrada (eventualmente,  $L \rightarrow \infty$ ). Em cada nó  $x_i$  existem quatro células  $(x_i, i)$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ . As células estão associadas com o vetor das velocidades unitário  $c_i$ , que liga o nó aos seus quatro vizinhos mais próximos. Cada célula tem dois estados codificados com uma variável booleana, sendo  $n_i(x_i) = 1$  se “ocupada” e  $n_i(x_i) = 0$  se “desocupada”. A regra de atualização do Autómato Celular, aplicada a cada tempo inteiro  $t_i$ , consiste de dois passos, primeiro o de colisão e depois o de propagação. No passo de colisão, cada nó se encontra num dos seguintes estados de quatro bits  $(1,0,1,0)$  e  $(0,1,0,1)$ , enquanto todos os outros estados permanecem inalterados. O segundo passo, o da propagação, traduz deslocamento  $n_i(x_i) \rightarrow n_i(x_i - c_i)$ .

Estas regras de colisão determinísticas permitem a conservação da massa (número de partículas) e da quantidade de movimento, localmente, enquanto que, a propagação as conserva globalmente. Na realidade, a quantidade de movimento é conservada ao longo de cada linha vertical e horizontal, resultando em imensas quantidades conservadas para serem representadas num modelo físico. Isto origina as inconvenientes leis de conservação espúrias. Além disso, a dinâmica do modelo HPP caracteriza-se por ser invariante por translações discretas, rotações de 90 graus e simetrias reflexivas.

Os modelos FHP, introduzidos por Frisch, Hasslacher e Pomeau, em 1986, [67], são variações do modelo HPP com um grupo de invariância maior. A *lattice* utilizada é triangular. Cada nó está agora ligado aos seus seis vizinhos por vetores unitários  $c_i$  (com  $i$  definido por *mod* 6). Um estado é representado por seis bits. A atualização implica novamente propagação e colisão. Na construção das regras de propagação, considera-se tanto as regras determinísticas como as não determinísticas. As colisões frontais conservam, além do número de partículas total, a diferença do número de partículas em qualquer par de direções. Desta forma, as colisões frontais numa *lattice* triangular conservam um total de quatro quantidades escalares. Isto significa que, além da conservação da massa e da quantidade de movimento, existe uma lei de conservação espúria. Uma forma de remover esta lei é através da inclusão de colisões triplas. A dinâmica dos modelos FHP é invariante por translações discretas, rotações de 60 graus e simetrias reflexivas com respeito a uma linha da *lattice*.

Este modelo permitiu, pela primeira vez, resolver as equações de Navier-Stokes a partir do método LGCA. Além disso, soluções analíticas das funções de distribuição para o escoamento de Poiseuille foram encontradas para o FHP sem qualquer aproximação [117].

*lattice* regulares de dimensão três não têm simetria suficiente para assegurar a propriedade de isotropia macroscópica, isto é, as propriedades físicas independentemente da direção considerada. Assim, surge um modelo de dimensão quatro, adequado, introduzido por d'Humières, Lallemand, Frisch [68]. A *lattice* é um hipercubo centrado nas faces (FCHC), definido como o conjunto de inteiros atribuídos  $(x_1, x_2, x_3, x_4)$  tais que  $x_1 + x_2 + x_3 + x_4$  é par. Cada nó está ligado por segmentos de comprimento  $c = \sqrt{2}$  aos vinte e quatro nós vizinhos, tendo duas coordenadas diferindo por +1 ou -1. Desta forma, o modelo FCHC tem estados de 24-bits.

Existem muitos outros modelos que foram surgindo para colmatar as deficiências dos anteriores.

O método LGCA utiliza um conjunto de variáveis booleanas  $n_i(t, x)$ ,  $i = 1, \dots, p$ , onde  $p$  é o número total de direções da *lattice*. Assim,  $n_i(t, x)$  indica o estado de ocupação das partículas na direção  $i$ , sendo  $n_i(t, x) = 0$  no caso de não existir, ou,  $n_i(t, x) = 1$  no caso de existir, uma partícula na posição  $x$ , no instante de tempo  $t$  e deslocando-se na direção da sua velocidade  $c_i$ . Deste modo, a equação do movimento das partículas é da forma

$$n_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = n_i(x, t) + \Omega_i(n_i(x, t)), \quad i = 1, \dots, p, \quad (5.1)$$

onde, o operador de colisão  $\Omega_i(n_i(x, t))$  é uma expressão booleana que representa a mudança na variável ocupação devido a colisões de partículas, em concordância com as regras de colisão arbitrárias.

## 5.2 LBM - Lattice Boltzmann Method

Historicamente, o LBM surge como uma melhoria do LGCA e, inicialmente, muitas das componentes e propriedades do LGCA transitaram para o LBM. A necessidade da análise numérica das propriedades do LGCA requer cálculos formais de médias da variável de ocupação booleana  $n_i$ . A primeira proposta de utilizar o LBM para simular a dinâmica de fluídos foi feita por McNamara e Zanetti, em 1988, [139], para responder a essa limitação do LGCA, chamada ruído estatístico. A ideia fundamental foi substituir os números de ocupação booleana  $n_i$  do LGCA por populações média-ensemble  $f_i = \langle n_i \rangle$ . Desta forma, surge a equação de *Lattice Boltzmann* (LBE), que é a base deste método LBM, como uma ferramenta de análise intermédia:

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) + \Omega_i(f_i(x, t)), \quad i = 1, \dots, p, \quad (5.2)$$

onde,  $\Omega_i(f_i(x, t))$  é o operador de colisão discreto arbitrário. Esta equação (5.2) é equivalente à equação LGCA, (5.1), exceto que, todas as variáveis booleanas foram agora substituídas por variáveis reais. A função  $f_i(t, x)$  é chamada função de distribuição uma-partícula que indica a probabilidade de encontrar uma partícula no nó  $x$ , no tempo  $t$  e com velocidade  $c_i$ . Se o operador de colisão é linearizado pela aproximação de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK), então o LBM é chamado modelo

*Lattice Bhatnagar-Gross-Krook* (LBGK). Esta abordagem é chamada de aproximação *bottom-up*. O LBM é construído diretamente a partir de sistemas de partículas discretas como o modelo LGCA.

Mais recentemente, foi mostrado que o LBM pode ser deduzido a partir da equação de Boltzmann contínua com a aproximação ao operador de colisão BGK, chamado modelo LBGK, como uma discretização especial. Em primeiro lugar, o espaço das velocidades é discretizado num conjunto finito de velocidades, obtendo-se a equação de Boltzmann discreta. Em segundo lugar, obtém-se a equação de Boltzmann discreta adimensional e, por último, a variável tempo é discretizada através do método de *Euler* e a variável espaço é discretizada pelo método diferenças finitas ascendentes. Esta abordagem, alternativa, é chamada de aproximação *top-down* ( *cf.* Figura 5.1).

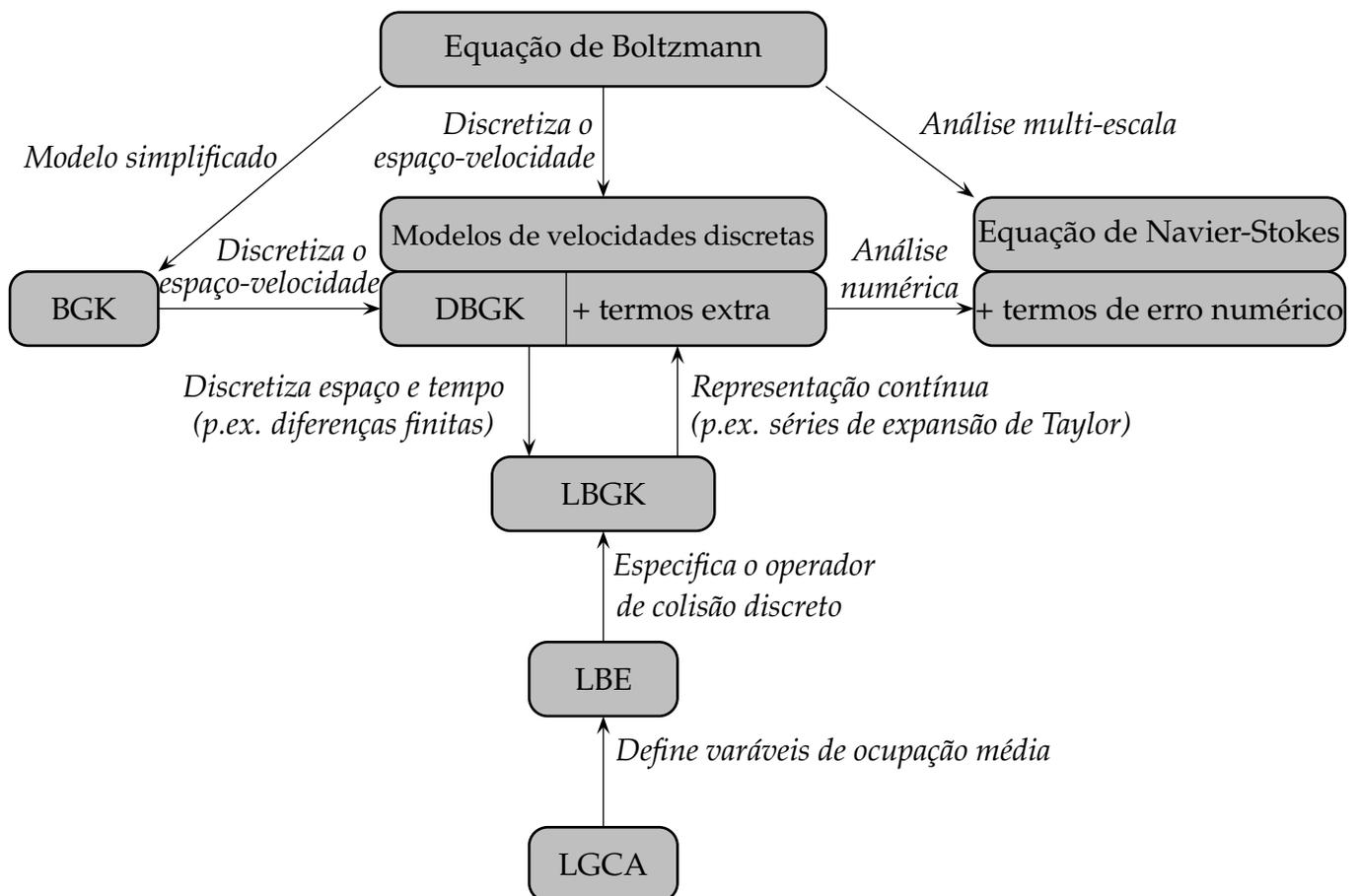


Figura 5.1. Aproximações *top-down* e *bottom-up*.

## 5.2.1 Passagem formal da *LGCA* à equação de Boltzmann contínua

Vamos agora apresentar uma dedução formal da obtenção da equação de Boltzmann contínua a partir da *Lattice-Gas Cellular Automata*. Já vimos que as microdinâmicas da *LGCA* são descritas por equações cinéticas da forma (5.1)

$$n_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = n_i(x, t) + \Omega_i(n_i(x, t)), \quad i = 1, \dots, p, \quad (5.3)$$

onde  $\Omega_i$  é o operador de colisão do respetivo modelo. As equações discretas da forma (5.3) são designadas por *Lattice Boltzmann equations* (LBM). A correspondência para a equação de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = Q(f, f) \quad (5.4)$$

onde  $Q(f, f)$  é o operador de colisão de Boltzmann, e desprezando as forças externas ( $F = 0$ ), pode-se mostrar, pela expansão do lado esquerdo da equação (5.3), que (cf. [185]):

$$n_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = n_i(x, t) + \Delta t \frac{\partial n_i}{\partial t} + c_i \cdot \Delta t \nabla n_i + O((\Delta t)^2).$$

Desprezando termos de ordem mais elevada, obtemos

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + c_i \cdot \nabla_x n_i = \frac{\Omega_i}{\Delta t},$$

onde, substituindo

- $n_i \rightarrow f$ ,
- $c_i \rightarrow v$ ,
- $\frac{\Omega_i}{\Delta t} \rightarrow Q(f, f)$ ,

obtemos formalmente a equação de Boltzmann (5.4).

## 5.2.2 Obtenção da LBGK, a partir da EB com operador BGK

Sterling e Chen (1996) mostraram que a dedução da equação de Boltzmann a partir do LGCA é mais do que uma correspondência meramente formal. Eles deduziram a equação de *lattice* Boltzmann (*LBE - Lattice Boltzmann Equation*), como uma discretização da equação de Boltzmann contínua (EB). Por uma questão de simplicidade, e sem perda de generalidade, a equação de Boltzmann com a aproximação Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) é utilizada na análise seguinte, (*cf.* [185]).

Existem várias aproximações do operador de colisão de Boltzmann. A mais utilizada, e que foi originalmente aplicada à equação de Boltzmann, foi introduzida em 1954 por Bhatnagar, Gross e Krook [20]. É conhecido por modelo de colisão linearizado BGK, que passaremos a designar simplesmente por operador BGK:

$$\Omega = -\frac{1}{\tau} \left( f - f^{(eq)} \right). \quad (5.5)$$

Este modelo expressa que a função de distribuição aproxima-se do seu equilíbrio a um ritmo definido por um tempo de relaxação  $\tau$ , sendo  $f^{(eq)}$  a função de distribuição ao equilíbrio. Quanto menor for o número de colisões mais rápida é essa aproximação.

A equação de Boltzmann com o operador BGK, é da forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = -\frac{1}{\tau} \left( f - f^{(eq)} \right),$$

com a função de distribuição  $f$  dependente das variáveis contínuas espaço, velocidade e tempo,  $f(t, x, v)$ , e o operador de colisão não-linear  $Q(f, f)$  é substituído pelo operador linearizado BGK.

Se o espaço das velocidades  $V$  for discretizado através da introdução de um conjunto finito de velocidades  $V_D$  de acordo com (4.1),  $N_i = f(t, x, v_i) = f_i(t, x)$  representar a densidade numérica (ou, função de distribuição) de partículas com velocidade  $v_i \in V_D$ , e o lado direito da *equação de Boltzmann discreta* (DBE), equação (4.8), for substituído pelo operador BGK discretizado, então obtemos a *equação de Boltzmann discreta com operador BGK* (DBGK)

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_i \cdot \nabla_x f_i = -\frac{1}{\tau} \left( f_i - f_i^{(eq)} \right).$$

*Equação de Boltzmann:*

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = Q(f, f)$$

*Equação de Boltzmann com operador BGK:*

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = -\frac{1}{\tau}(f - f^{(eq)})$$

*Equação de Boltzmann discreta com operador BGK (DBGK):*

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_i \cdot \nabla_x f_i = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{(eq)})$$

*Equação de Boltzmann discreta com operador BGK adimensional (DBGK adimensional):*

$$\frac{\partial \hat{f}_i}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_i \hat{\nabla}_x \hat{f}_i = -\frac{1}{\hat{\tau}\epsilon}(\hat{f}_i - \hat{f}_i^{(eq)}) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i \nabla_x f_i = -\frac{1}{\tau\epsilon}(f_i - f_i^{(eq)})$$

*Equação discretizada de Boltzmann com operador BGK:*

$$\begin{aligned} & \frac{f_i(x, t + \Delta t) - f_i(x, t)}{\Delta t} + c_{ix} \frac{f_i(x + \Delta x, t + \Delta t) - f_i(x, t + \Delta t)}{\Delta x} \\ & + c_{iy} \frac{f_i(x + \Delta y, t + \Delta t) - f_i(x, t + \Delta t)}{\Delta y} \\ & + c_{iz} \frac{f_i(x + \Delta z, t + \Delta t) - f_i(x, t + \Delta t)}{\Delta z} = -\frac{1}{\tau\epsilon} (f_i - f_i^{(eq)}) \end{aligned}$$

*Equação de lattice Boltzmann com operador BGK (LBGK):*

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{(eq)})$$

Tabela 1: Da equação de Boltzmann à equação de *lattice* Boltzmann, com operador BGK.

A equação de Boltzmann discreta DBGK será não-dimensionada pela escala de comprimento característica,  $L$ , a velocidade de referência,  $U$ , a densidade de referência,  $n_r$ , e o tempo entre a colisão de partículas,  $t_c$ . Duas escalas de tempo de referência são usadas,

- $t_c$  para representar o tempo entre colisões de partículas, e
- $\frac{L}{U}$  para representar o tempo de escoamento característico.

Assim, as quantidades adimensionais são,

- $\hat{f}_i = \frac{N_i}{n_r}$ ,
- $\hat{t} = \frac{tU}{L}$ ,
- $\hat{c}_i = \frac{v_i}{U}$ ,
- $\hat{\nabla} = L\nabla$ ,
- $\hat{x} = \frac{x}{L}$ ,
- $\hat{\tau} = \frac{\tau}{t_c}$ ,
- $\varepsilon = t_c \frac{U}{L}$ .

O último parâmetro  $\varepsilon$  pode ser interpretado, tanto como a razão entre o tempo de colisão e o tempo de fluxo, ou como a razão entre o caminho livre médio e o comprimento característico (isto é, o número de Knudsen  $Kn$ ). Desta forma, obtém-se a equação de Boltzmann discreta com operador BGK adimensional (DBGK) adimensional

$$\frac{\partial \hat{f}_i}{\partial \hat{t}} + \hat{c}_i \cdot \hat{\nabla}_{\hat{x}} \hat{f}_i = -\frac{1}{\hat{\tau} \varepsilon} \left( \hat{f}_i - \hat{f}_i^{(eq)} \right). \quad (5.6)$$

Fazendo cair todos os acentos circunflexos, considerando daqui para a frente, que a equação está na forma adimensional, tem-se

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i \cdot \nabla_x f_i = -\frac{1}{\tau \varepsilon} \left( f_i - f_i^{(eq)} \right). \quad (5.7)$$

A seguir, aplicando o método de Euler para a variável tempo  $t$  e uma discretização diferenças finitas ascendentes à variável espaço  $x$ , obtém-se uma discretização particular da equação adimensional (5.7), dada por:

$$\begin{aligned} & \frac{f_i(x, t + \Delta t) - f_i(x, t)}{\Delta t} + c_{ix} \frac{f_i(x + \Delta x, t + \Delta t) - f_i(x, t + \Delta t)}{\Delta x} \\ & + c_{iy} \frac{f_i(x + \Delta y, t + \Delta t) - f_i(x, t + \Delta t)}{\Delta y} \\ & + c_{iz} \frac{f_i(x + \Delta z, t + \Delta t) - f_i(x, t + \Delta t)}{\Delta z} \\ & = -\frac{1}{\tau \varepsilon} \left( f_i - f_i^{(eq)} \right), \end{aligned}$$

ou mais simplesmente, na forma

$$\begin{aligned} & \frac{f_i(x, t + \Delta t) - f_i(x, t)}{\Delta t} + c_i \frac{f_i(x + \Delta x, t + \Delta t) - f_i(x, t + \Delta t)}{\Delta x} \\ & = -\frac{1}{\tau \varepsilon} \left( f_i - f_i^{(eq)} \right). \end{aligned} \quad (5.8)$$

De observar que as variáveis  $t$ ,  $x$ ,  $c_i$ ,  $\Delta t$  e  $\tau$ , que aparecem nesta última equação, são quantidades adimensionais. O comportamento Lagrangiano é então obtido pela seleção do espaçamento da *lattice* dividido pelo passo de tempo igual à velocidade da *lattice*, isto é,  $\Delta x / \Delta t = c_i$ . Quando a equação (5.8) é multiplicada por  $\Delta t$ , o resultado é o cancelamento dos dois termos do lado esquerdo da equação, ficando apenas um termo avaliado em  $t + \Delta t$  (e o método revela-se explícito), isto é,

$$\begin{aligned} & \frac{f_i(x, t + \Delta t) - f_i(x, t)}{\Delta t} + \frac{f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t + \Delta t)}{\Delta t} \\ & = \frac{f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t)}{\Delta t} = -\frac{1}{\tau \varepsilon} \left( f_i - f_i^{(eq)} \right). \end{aligned} \quad (5.9)$$

A próxima característica do LBM é a seleção do passo de tempo ser igual ao tempo de colisão de referência ( $\Delta t = t_c$ ), resultando o cancelamento do número de Knudsen ( $Kn = \varepsilon$ ) no denominador do termo do operador de colisão. Assim, obtém-se a LBE com operador BGK, o modelo LBGK,

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} \left( f_i - f_i^{(eq)} \right). \quad (5.10)$$

Portanto, através do LBM o espaço das velocidades é discretizado por um conjunto de vetores de velocidade microscópicas e o espaço é discretizado num conjunto de nós da *lattice* uniformemente espaçados, que representa o domínio. Em cada passo de tempo  $t$ , a atualização é realizada em dois passos: colisão local e propagação global. O LBM é um método numérico alternativo para a simulação de escoamentos de fluídos.

### Comentários finais:

O LGCA e o LBE foram propostos como uma alternativa para a dinâmica de fluídos computacional (CFD) e desde essa altura têm suscitado muito interesse na comunidade científica da área da física. Doolen [51], [59], Monaco [144], Monaco and Preziosi [145], Lebowitz and al. [63], Chen and Doolen [105], Wolf-Gladrow [185].

Em particular, estes métodos têm tido muito sucesso em simulações numéricas de fluídos complexos e com fronteiras complicadas, Strumolo e Viswanathan [169], fluxos laminares com número de Reynolds pequenos, Hou e al. [111], Luo [134], He e Doolen [102], [103], escoamentos turbulentos com números de Reynolds moderados, Amati e al. [2], [3], escoamento de Rayleigh-Taylor, He e al. [106], [107], fluídos multicomponentes, Chen e Doolen [44] e suspensões de partículas no fluido, Qi [160], fluxos reativos químicos, Chen e al. [42], combustões, Filippova e Hanel [66], e outros, Rothman e Zaleski [163], Chen e Doolen [105].

## 5.3 Aplicação computacional do modelo LBGK

Considere-se a equação de evolução da função de distribuição  $f_i(x, t)$ , do modelo LBGK, com nove direções da *lattice*,

$$f_i(\mathbf{x} + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} \left[ f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right],$$

$$i = 0, \dots, 8, \quad (5.11)$$

onde a função  $f_i(\mathbf{x}, t)$  representa a probabilidade de encontrar uma partícula no nó  $\mathbf{x} = (x, y)$  com velocidade  $c_i$  no tempo  $t$ ,  $f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t)$  é a função de distribuição ao equilíbrio e  $\tau$  é o parâmetro do tempo de relaxação.

Por uma questão de simplicidade de notação e clareza, no que vai ser exposto a seguir, vai assumir-se nesta secção que o vetor  $x$ , utilizado ao longo deste trabalho, passa a ser denotado por  $\mathbf{x} = (x, y)$ .

Em cada iteração  $t$ , a atualização do modelo LBGK é realizada em dois passos. O primeiro, é o chamado passo de colisão,

$$f_i^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left[ f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right], \quad i = 0, \dots, 8, \quad (5.12)$$

e, o segundo, é o passo de propagação

$$f_i(\mathbf{x} + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}, t + \Delta t), \quad i = 0, \dots, 8. \quad (5.13)$$

### 5.3.1 modelo D2Q9

Os modelos que vamos utilizar são, genericamente, chamados modelos  $DnQm$ , em que  $n$  indica a dimensão do espaço e  $m$  o número de vetores de velocidades do modelo. Neste trabalho foi considerado o modelo  $D2Q9$ , com espaçamento unitário (cf. Figura 5.2).

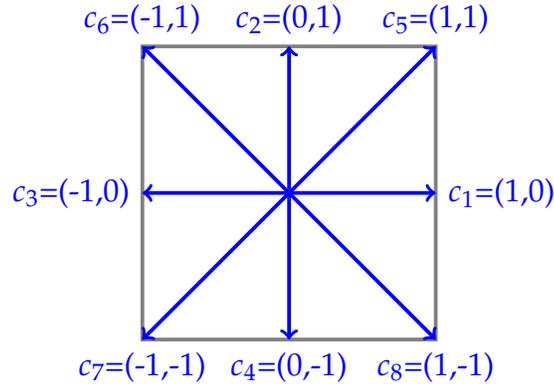


Figura 5.2. A lattice das velocidades modelo  $D2Q9$ .

Cada nó da *lattice* está ligado aos seus oito nós vizinhos, e a partícula  $i$ , localizada no nó  $i$ , desloca-se com velocidade  $c_i$ , de acordo com

$$c_0 = (0,0), \quad (5.14)$$

$$c_i = \left( \cos \left( \frac{i-1}{2} \pi \right), \sin \left( \frac{i-1}{2} \pi \right) \right) c, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.15)$$

$$c_i = \left( \cos \left( \frac{2i-9}{4} \right) \pi, \sin \left( \frac{2i-9}{4} \right) \pi \right) \sqrt{2}c, \quad i = 5, \dots, 8, \quad (5.16)$$

onde  $c = \Delta \mathbf{x} / \Delta t$ .

As funções  $f_i$  são construídas de forma que as variáveis macroscópicas do escoamento do fluido são definidas pelos seus momentos. Em particular, a densidade local da massa,

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (5.17)$$

e a densidade local da quantidade de movimento,

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i c_i f_i. \quad (5.18)$$

Desta forma, a velocidade local  $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ , é dada por

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_i c_i f_i. \quad (5.19)$$

Além disso, as funções de distribuição ao equilíbrio dependem somente da densidade local  $\rho$  e velocidade local  $\mathbf{u}$ , e precisam de ser escolhidas por forma a que as equações de Navier-Stokes sejam recuperadas. As distribuições ao equilíbrio usadas neste trabalho, foram propostas em [161], e são

$$f_i^{(eq)} = \rho w_i \left[ 1 + 3c_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2} (c_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right], \quad i = 0, \dots, 8, \quad (5.20)$$

com os pesos  $w_0 = 4/9$ ,  $w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = 1/9$ ,  $w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = 1/36$ , e verificam as relações

$$\rho = \sum_i f_i^{(eq)}, \quad (5.21)$$

e

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i c_i f_i^{(eq)}. \quad (5.22)$$

Para um fluxo contínuo, no limite incompressível ( $Ma \rightarrow 0$  e densidade  $\rho$  constante), podemos aplicar a expansão multi-escala de Chapman-Enskog à equação (5.11), (cf. [111], [129]) e as correspondentes equações macroscópicas do modelo LBGK  $D2Q9$ , são da forma,

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (5.23)$$

$$\partial_t (\rho u_x) + \partial_y (\rho u_x u_y) = -\partial_x p + \rho \nu \partial_y (\partial_x u_y + \partial_y u_x), \quad (5.24)$$

onde a pressão é  $p = c_s^2 \rho$ , a velocidade do som  $c_s = 1/\sqrt{3}$  e a viscosidade é dada por  $\nu = (2\tau - 1)/6$ .

Considere-se ainda o caso de um fluxo ser incompressível estacionário (velocidade e pressão são independentes do tempo), satisfazendo as seguintes condições

$$\partial_x u_x = 0, \quad \partial_x u_y = 0, \quad \rho = \rho_0,$$

em que  $\rho_0$  é uma constante. Então, substituindo as últimas condições nas equações da continuidade (5.23) e da quantidade de movimento (5.24) do modelo, obtemos as correspondentes equações macroscópicas do modelo LBGK  $D2Q9$ ,

$$\partial_y (\rho u_x) = 0, \quad (5.25)$$

$$\partial_y (\rho u_x u_y) = -\partial_x p + \nu \partial_y^2 (\rho u_x). \quad (5.26)$$

A velocidade e a densidade deste modelo LBGK satisfazem, aproximadamente, as equações de Navier-Stokes, para um fluido incompressível e estacionário (cf. [104], [129]).

As equações de Navier-Stokes incompressíveis em regime estacionário, na forma exata, são:

$$\partial_y u_x = 0, \quad (5.27)$$

$$\partial_y (u_x u_y) = -\partial_x \left( \frac{p}{\rho_0} \right) + \nu \partial_y^2 u_x. \quad (5.28)$$

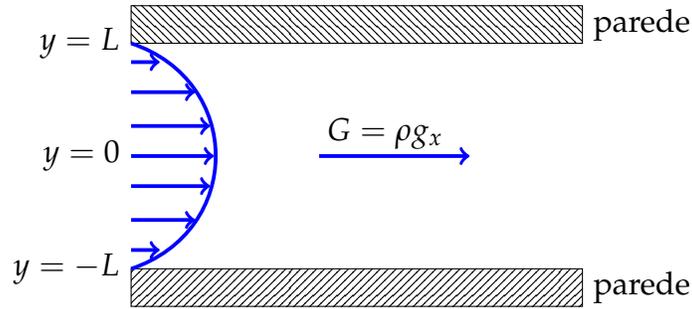
A solução analítica do escoamento de Poiseuille bidimensional num canal com largura  $2L$  é dada por:

$$u_x(y) = u_c \left( 1 - \left( \frac{y}{L} \right)^2 \right), \quad u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = -G \quad \frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad (5.29)$$

onde o gradiente da pressão  $G$  é uma constante relacionada com a velocidade da linha central do canal  $u_c$  por

$$G = 2\rho\nu u_c/L^2, \quad (5.30)$$

e a densidade do fluxo  $\rho$  é uma constante. O escoamento de Poiseuille é uma solução exata das equações de Navier-Stokes incompressíveis estacionárias (5.27) e (5.28).



**Figura 5.3.** Escoamento de Poiseuille entre duas paredes paralelas.

Para aproximar o escoamento de Poiseuille usando o modelo LBGK, equações (5.25) e (5.26), é conveniente substituir o gradiente da pressão constante por uma força  $\mathbf{g}$  tal que  $\rho\mathbf{g} = -\nabla p$ . A força de corpo é assumida estar ao longo da direção- $x$  do canal, isto é,  $\rho g_x = G_x$  e  $g_y = 0$ , onde a pressão é mantida constante (Figura 5.3). A equação da quantidade do movimento (5.26) com uma força de corpo é

$$\partial_y (u_x u_y) = \nu \partial_y^2 u_x + \rho g_x. \quad (5.31)$$

Neste caso, com a presença de uma força de corpo no modelo LBGK, é necessária uma modificação da equação (5.11). Isto é dado por

$$f_i(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{c}_i, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} \left[ f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right] + \frac{(\Delta t)^2}{\Delta \mathbf{x}} h_i(\mathbf{x}, t),$$

$$i = 0, \dots, 8, \quad (5.32)$$

onde os  $h_i$  são escolhidos como, (cf. [185]),

$$h_{0,2,4} = 0, \quad h_{1,5,8} = +|g|/6, \quad h_{3,6,7} = -|g|/6, \quad (5.33)$$

### 5.3.2 Condições de fronteira

A escolha das condições de fronteira para o modelo LBGK é um fator muito importante para obter resultados com precisão física, nas simulações computacionais. As condições de fronteira implementadas neste trabalho foram as condições de fronteira periódicas e as do tipo *bounceback*.

As condições periódicas aplicam-se à entrada e à saída do fluxo, no canal. A ideia básica é conectar diretamente as duas regiões de fronteira, de modo que, todas as partículas que saírem de uma região de fronteira chegam à outra nas direções correspondentes. Estas condições implementam-se em problemas com uma periodicidade física no mesmo, como neste caso, que trata de um escoamento de um fluido num canal, ao longo da direção- $x$ , de acordo com a Figura 5.3. Mais concretamente, à entrada do canal temos nove funções de distribuição num nó. As funções  $f_2, f_6, f_3, f_7$  e  $f_4$  podem ser calculadas pela equação (5.11), sendo as três funções de distribuição,  $f_5, f_1$  e  $f_8$  desconhecidas. Por sua vez, à saída do canal, as funções de distribuição  $f_2, f_5, f_1, f_8$  e  $f_4$  são conhecidas e as funções desconhecidas são  $f_6, f_3$  e  $f_7$ . Assim, as funções desconhecidas à entrada, passam a ter valores iguais às respetivas funções à saída, que são conhecidas, e vice-versa.

As condições de fronteira do tipo *bounceback* aplicam-se às paredes (superior e inferior) do canal, de forma a garantir a condição de não-escorregamento, isto é, que a velocidade na parede é zero. Neste trabalho, vamos aplicar dois tipos de condições de fronteira de não-escorregamento, as *bounceback standard* e as *half-bounceback*. Usamos os termos nós do fluido, para os nós do interior do domínio, e nós sólidos, para os nós que pertencem à parede. A diferença principal destas condições de fronteira é que nas *bounceback standard* se assume que a parede está sobre a linha dos nós sólidos, Figura 5.4, e nas *half-bounceback* a parede está a meia distância da linha dos nós sólidos e da linha dos nós do fluido, Figura 5.6.

Nas condições de fronteira *bounceback standard*, quando uma partícula colide com a parede é devolvida com o sentido oposto com que chegou (Figura 5.4). Mais concretamente, vamos situar-nos no nó  $P$  localizado na parede superior. As funções de distribuição que apontam para fora do domínio (isto é só uma forma de representação),

$f_6$ ,  $f_2$  e  $f_5$  são conhecidas, e também,  $f_3$  e  $f_1$ . As funções desenhadas a tracejado,  $f_7$ ,  $f_4$  e  $f_8$ , são desconhecidas. Então, o que acontece no processo de colisão, no passo de tempo  $t$ , é assumir que  $f_7 = f_5$ ,  $f_4 = f_2$  e  $f_8 = f_6$ . A seguir, ainda na mesma iteração, realiza-se o passo de propagação. As setas desenhadas a contínuo, no interior do domínio, dão a indicação da forma como as funções se distribuem na *lattice*.

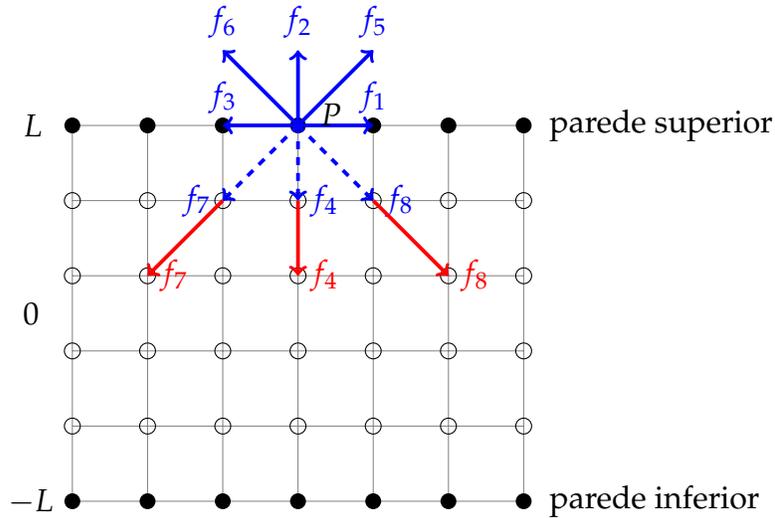


Figura 5.4. Esquema do tipo *bounceback standard* na parede superior.

A Figura 5.5 representa a forma como as funções de distribuição  $f_7$ ,  $f_4$  e  $f_8$  se situam na *lattice*, no final do passo de propagação no instante  $t - \Delta t$  e antes do processo de colisão no passo de tempo  $t$ . A parede está localizada a meio caminho entre a linha dos nós sólidos e a linha dos nós do fluido.

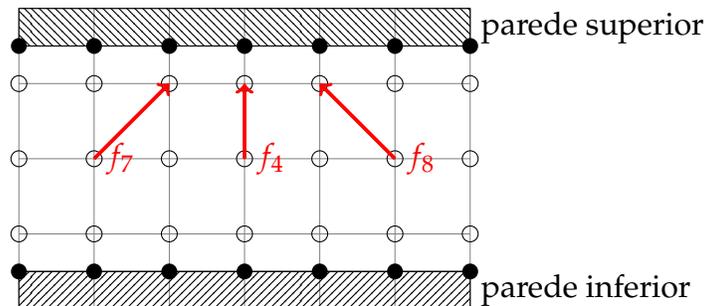


Figura 5.5. Funções de distribuição  $f_7$ ,  $f_4$  e  $f_8$  no passo de tempo  $t - \Delta t$ .

A Figura 5.6 representa as condições de fronteira *half-bounceback* na parede superior, no passo de tempo  $t$ . As partículas originárias do passo de tempo anterior (Figura 5.5) colidem agora com a parede, no passo de tempo  $t$ , o que é representado pelas funções de distribuição que apontam para o exterior:  $f_6, f_2$  e  $f_5$ . Seguidamente, são devolvidas com o sentido contrário, isto é  $f_6 = f_8, f_2 = f_4$  e  $f_5 = f_7$ , propagando-se, finalmente, para o interior da *lattice*, no mesmo passo de tempo  $t$ .

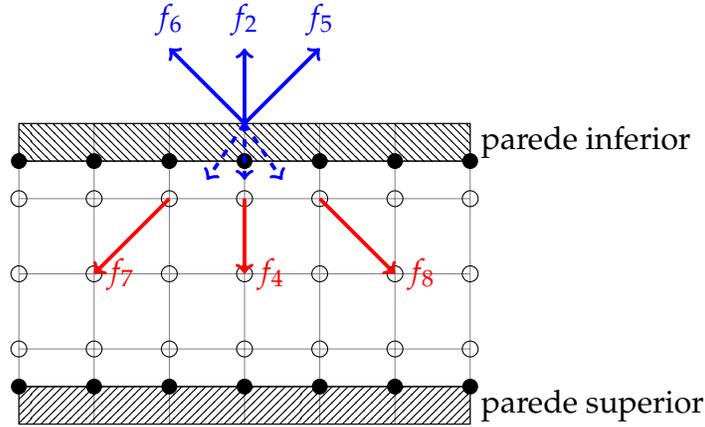


Figura 5.6. Esquema *half-bounceback*, no passo de tempo  $t$ .

### 5.3.3 Implementação do modelo LBGK ao escoamento de Poiseuille

Nesta secção, apresentamos a validação do modelo LBGK para o escoamento de Poiseuille bidimensional, entre duas paredes paralelas, e das condições de fronteira aplicadas. As paredes estão em repouso, mas o fluido é conduzido pela ação de uma força de corpo constante (aceleração)  $G = \rho g_x$ , na direção- $x$  (da entrada para a saída). O canal tem a largura  $2L = Ny - 1$ , onde  $Ny$  é o número de pontos da malha na direção- $y$  e  $Nx$  é o número de pontos da malha na direção- $x$ . Consideramos  $Ny = Nx = 20$ . O canal é modelado por condições de fronteira periódicas na direção- $x$  e condições de fronteira do tipo *bounceback* nas paredes (inferior e superior). Os primeiros e últimos nós na direção- $y$ , correspondem aos índices  $j = 1$  e  $j = Ny$ , e são nós sólidos (na parede). Nós com índice  $j = 2, \dots, Ny - 1$  são nós do fluido. O tempo de relaxação é  $\tau = 1$ , a densidade de fluido é  $\rho = 1$  e a velocidade macroscópica inicial é zero. As funções  $f_i(x, t)$  são inicializadas com as respetivas funções  $f_i^{(eq)}(x, t)$ . A atualização das funções de distribuição, em cada iteração  $t$ , é dividida em dois passos. No início do passo de colisão estabeleceram-se as condições de fronteira do tipo *bounceback*. Só depois, se completa o passo de colisão, de acordo com a equação (5.12). A seguir,

ocorre o passo de propagação, de acordo com a equação (5.13). Assim, uma função de distribuição  $f_i$ , correspondente a uma partícula com velocidade  $c_i$ ,  $i = 0, \dots, 8$ , resultante do processo de colisão, que ocorreu no nó  $x$ , é propagada para o nó vizinho mais próximo de  $x$ , o nó  $x + c_i$ . Nesta fase impõem-se as condições de fronteira periódicas e é concluída a atualização dos valores das funções de distribuição  $f_i$ , no passo de tempo  $t$ . Com estes novos valores, as quantidades  $\rho$  e a velocidade macroscópica  $u$ , podem ser recalculadas.

Na Figura 5.7 é testado o escoamento de Poiseuille, de um fluido incompressível, num canal de largura  $2L = 19$ , ao longo da direção- $x$ . As condições de fronteira, impostas nas paredes superior e inferior, foram do tipo *bounceback standard*. A fronteira está situada na parede, de acordo com a figura 5.4. A solução analítica está desenhada a contínuo e a solução aproximada, obtida pelo modelo LBGK  $D2Q9$ , a pontilhado. A maior diferença de valores, entre as duas soluções, verifica-se na velocidade máxima da solução aproximada.

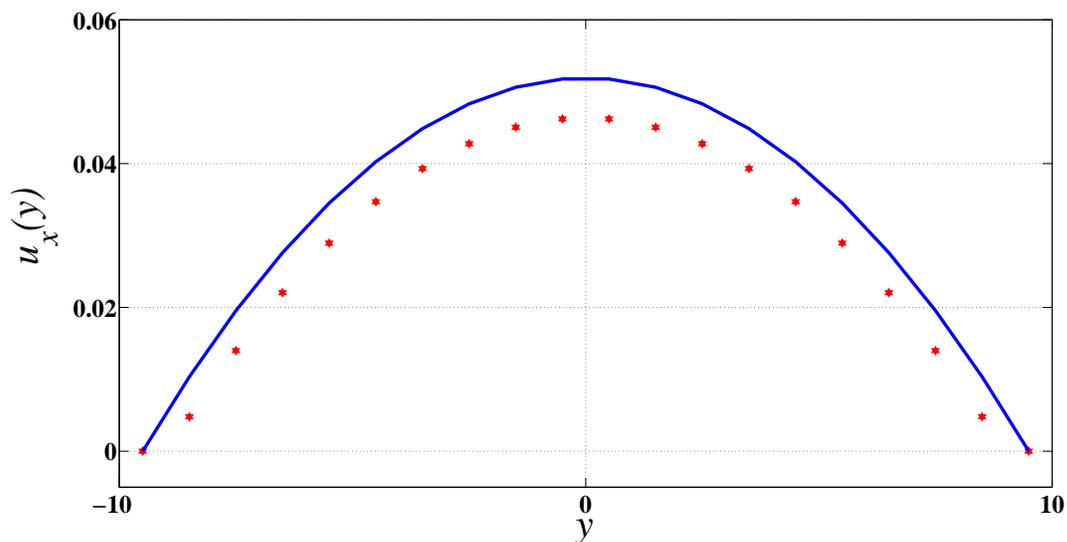


Figura 5.7. Perfil de velocidade com esquema *bounceback standard*.

No gráfico apresentado a seguir, Figura 5.8, observa-se que o fluido está em repouso no início e depois acelera lentamente. Após  $t = 1200$  passos de tempo, a média da quantidade de movimento- $x$  estabiliza.

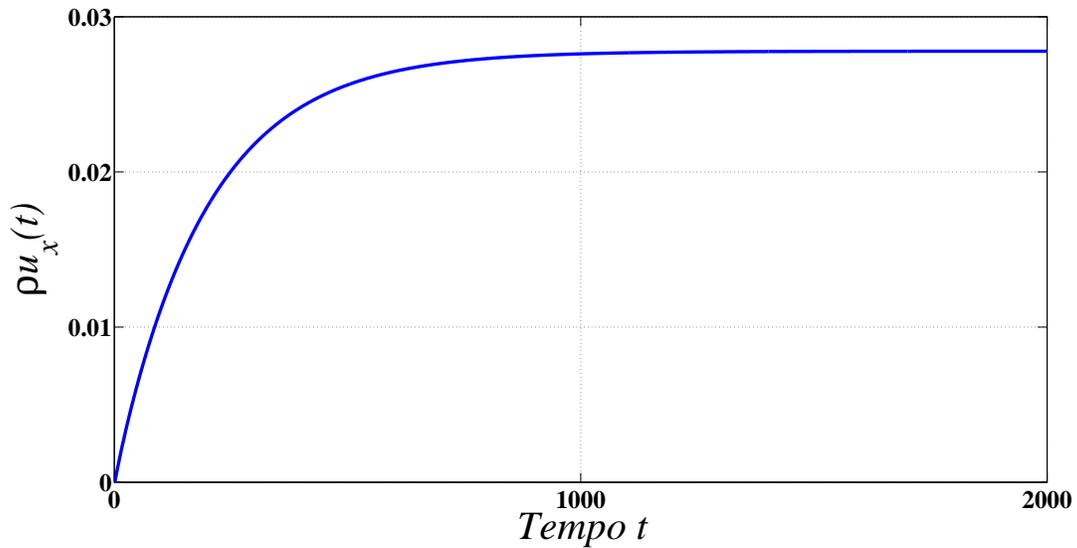


Figura 5.8.  $\rho u_x(t)$  média, com esquema *bounceback standard*.

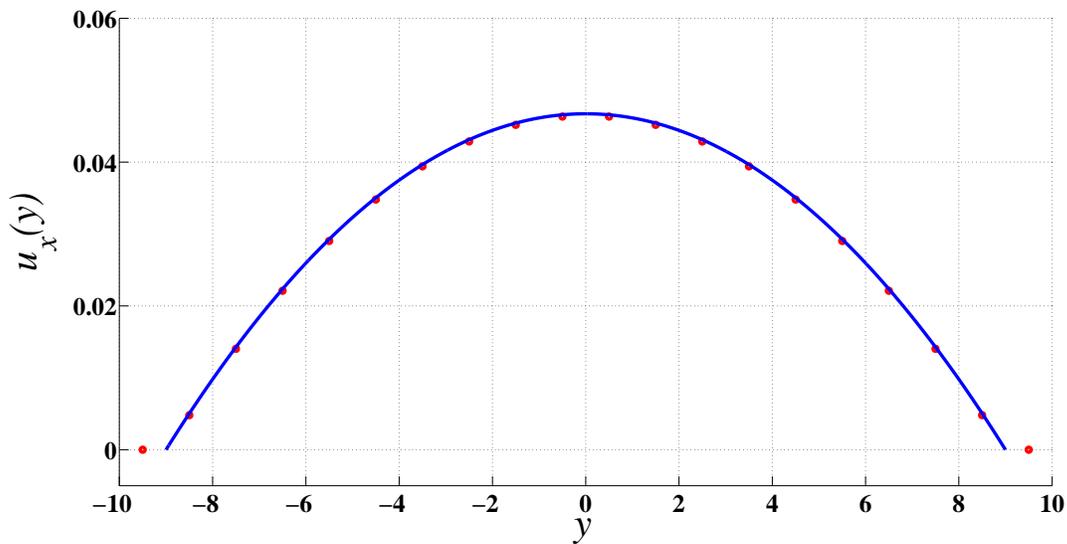


Figura 5.9. Perfil de velocidade com esquema *half-bounceback*.

O gráfico da Figura 5.9 mostra a solução analítica (desenhada a contínuo) juntamente com a solução numérica (pontilhado) do escoamento de Poiseuille, num canal de largura  $2L = 18$ , ao longo da direção- $x$ . As condições de fronteiras impostas foram do tipo *half-bounceback*. Neste caso, a fronteira inferior está localizada em  $j = 3/2$  (a meia distância do primeiro e segundo nó) e a fronteira superior está localizada na linha de nós  $j = Ly - 1/2$ , na direção- $y$ . Como se pode observar a solução numérica aproxima muito bem a solução analítica, com exceção dos nós inicial e final, que devem ser interpretados como nós auxiliares. Como tal, a velocidade nestes nós não deve ser

interpretada como velocidades do fluido.

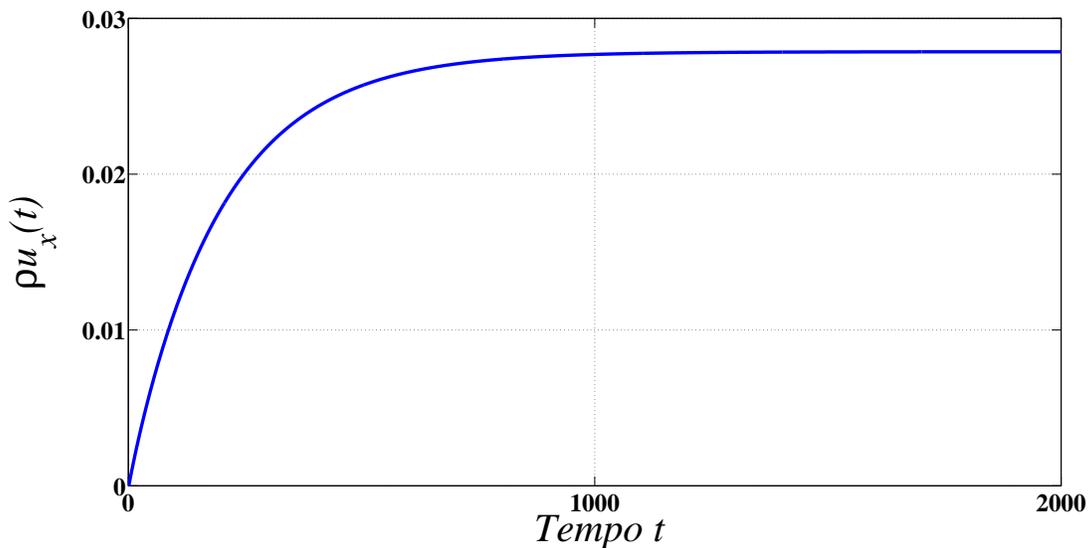


Figura 5.10.  $\rho u_x(t)$  média, com esquema *half-bounceback*.

No gráfico apresentado na Figura 5.10 observa-se que o comportamento do fluido é semelhante ao do gráfico 5.8, como era esperado.

Comparando os gráficos das Figuras 5.7 e 5.9 observa-se que o modelo LBGK  $D2Q9$  aproxima o escoamento de Poiseuille de um fluido incompressível estacionário. Além disso, valida-se que, a implementação das condições de fronteira *half-bounceback* produz melhores resultados, relativamente às condições de fronteira *bounceback standard*.

### Comentários finais:

Os *Lattice-Gas Cellular Automata* apresentam-se como um meio viável de resolver as equações de Navier-Stokes do movimento de fluídos, com o aparecimento do modelo FHP, em (1986). Este foi o primeiro modelo de *Lattice-Gas* com a capacidade de simular adequadamente as equações de Navier-Stokes bidimensionais. As propriedades de simetria da *lattice* triangular equilátero foram fundamentais para que o modelo fornecesse uma solução isotrópica.

O *Lattice Boltzmann Method* desenvolveu-se como uma alternativa aos métodos numéricos para a simulação de escoamentos de fluídos e modelação de fluídos. A ideia fundamental do LBM é de construir modelos cinéticos simplificados que incorporam as propriedades físicas essenciais dos processos microscópicos ou mesoscópicos, de modo que as propriedades macroscópicas médias obedecem às equações macroscópicas desejadas. A premissa básica para a utilização desses métodos simplificados do tipo cinético para escoamentos de fluídos macroscópicos é que o resultado da dinâmica macroscópica de um fluido é o resultado do comportamento coletivo de muitas (numerosas) partículas microscópicas no sistema e que a dinâmica macroscópica não é sensível aos detalhes subjacentes à física microscópica (Kadanoff [116]).

A equação cinética do LBM, denominada LBE, fornece um grande número das vantagens da dinâmica molecular, incluindo imagens claras físicas, fácil implementação de condições de fronteira e programação paralela.

Antes de serem formulados os métodos de LGCA e LBM, foram propostos os modelos de velocidades discretas (DVM) de Broadwell. A ideia de utilizar a equação cinética simplificada com uma só velocidade de partículas para simular escoamentos de fluídos foi empregue por Broadwell (1964) para estudar estruturas de choque. Eles foram principalmente usados como modelos teóricos para estudar propriedades analíticas de gases ou fluídos, tais como soluções analíticas da equação de Boltzmann para escoamentos simples (Broadwell [27]) ou choques (Broadwell [28]). De facto, pode-se ver o modelo Broadwell como uma simples LBE unidimensional.

Soluções analíticas do escoamento de Poiseuille foram obtidas, quer através do modelo FHP [117], quer através do modelo LBGK [104]. Simulações do escoamento de Poiseuille, com o modelo LBGK para as equações de Navier-Stokes incompressíveis foram realizadas em [101], [104], [105],[185].

Muitos desenvolvimentos importantes na conceção de condições de fronteira ocorreram no período 1990 – 2000. As condições de fronteira do tipo *bounceback* para condições de não escorregamento, historicamente vieram do LGCA e continuam as ser as mais usadas, pela sua simplicidade de implementação e adequação para simulações em geometrias complexas. No entanto, as condições *bounceback standard* têm a desvantagem de só terem precisão de primeira ordem, exceto para casos de geometria simples nas fronteiras. Por essa razão, surgiram outros esquemas de condição fronteira que garantem uma precisão de segunda ordem. Nomeadamente, as condições de fronteira

*half-bounceback*, introduzidas por Ziegler [190], de reflexão [50], *half-bounceback* da distribuição não-equilíbrio [191], extrapolação [43], [192], condições de Zou e He [99]. Os esquemas *bounceback* e os esquemas de reflexão são fáceis de implementar e são computacionalmente muito eficientes. Ambos podem ser aplicados à LBE com algumas variações, Chen e al. [168], Matthaeus e al. [41], Zou e He [192], Filippova e Hanel [65], Mei e al. [140], [141], Bouzidi e al. [26].

A facilidade de lidar com condições de fronteira com geometrias complexas é uma característica muito importante do LGCA e do LBM.

Para um estudo mais detalhado dos AC, LGCA, LBM e suas aplicações, consultar [170] e [185].



# Capítulo 6

## Conclusões e perspectivas de evolução futura

Este trabalho abordou vários aspetos relativos à modelização e simulação numérica da equação de Navier-Stokes na forma da equação de Boltzmann:

- Foi estabelecida a relação entre três fórmulas de representação do operador de colisão da equação de Boltzmann, frequentemente encontradas na literatura.
- Foram apresentadas deduções formais das principais equações da dinâmica de fluídos a partir da equação de Boltzmann, modelo da teoria cinética que descreve a evolução de um gás rarefeito.
- Foram apresentadas deduções do modelo LBGK.
- Foi estabelecida a formulação computacional do modelo LBGK e condições de fronteira, para o escoamento de Poiseuille.

No Capítulo 2 apresentou-se a equação de Boltzmann clássica e estudaram-se três fórmulas de representação do operador de colisão. A seguir, descreveram-se as principais grandezas macroscópicas do modelo e as propriedades físicas do operador de colisão. Estas últimas incluem a equação de transporte, a função de distribuição *Maxwelliana* e de estado de equilíbrio *Maxwelliano* e o teorema-*H* de Boltzmann.

No Capítulo 3, foram estabelecidos os limites hidrodinâmicos da equação de Boltzmann para as equações da hidrodinâmica. Usaram-se os conceitos de expansão de Hilbert, expansão de Chapman-Enskog e analisaram-se vários procedimentos de

escala-tempo, necessários para a dedução das principais equações da hidrodinâmica. Em particular, foram deduzidas as equações de Euler e as equações de Navier-Stokes quer para escoamentos de fluídos compressíveis e incompressíveis.

No Capítulo 4, abordou-se a equação de Boltzmann discreta e as suas principais características. Esta equação revelou-se de grande importância na exposição do Capítulo 5. Seguiu-se a apresentação de alguns modelos de velocidades discretas, tendo sido dada especial atenção aos modelos de Broadwell, para os quais foi estabelecida a sua dedução.

No Capítulo 5, apresentou-se a equação de *lattice* Boltzmann (LBE), equação principal do *Lattice Boltzmann Method* (LBM). Inicializou-se o capítulo com uma exposição dos Autómatos celulares e, de seguida, apresentou-se uma classe especial, os modelos *Lattice Gas Cellular Automata* (LGCA), que incluem os modelos HPP, FHP e FCHC. A seguir, a LBE em combinação com o modelo BGK, chamado modelo LBGK foi abordado de duas formas diferentes. Primeiro, foi estabelecido a partir do LGCA e depois foi deduzido como uma versão discretizada da equação de Boltzmann clássica com o modelo BGK. Depois, estabeleceram-se as fórmulas computacionais do modelo LBGK para as equações de Navier-Stokes incompressíveis e descreveram-se as condições de fronteira aplicadas, bem como a implementação do modelo LBGK. Por último, foram discutidos os resultados obtidos na simulação numérica do escoamento de Poiseuille.

Como acontece em todos os trabalhos científicos, desenvolveu-se trabalho numa área que se reconhece limitada e vislumbram-se vários outros temas que merecem estudo no futuro. Assim, de uma forma sucinta e limitando as perspetivas a resultados que seguem de perto a formulação apresentada, pode-se mencionar:

- Implementação do modelo LBGK a diferentes condições de fronteira, forças, gradientes de pressão, tempos de relaxação, números de *Reynolds*, modelos de *lattice*, em particular, o modelo D2Q9i.
- Extensão do modelo LBGK a diversos problemas da dinâmica de fluídos.
- Aplicação da ferramenta matemática Cálculo Fracionário.

# Bibliografia

- [1] Alves, A. S. "Study of a discrete kinetic model of a gas under a newtonian potential." *European journal of mechanics. B, Fluids* 9.5 (1990): 457-467.
- [2] Amati, Giorgio, Sauro Succi, and Renzo Piva. "Massively parallel lattice-Boltzmann simulation of turbulent channel flow." *International Journal of Modern Physics C* 8.04 (1997): 869-877.
- [3] Amati, Giorgio, Sauro Succi, and Roberto Benzi. "Turbulent channel flow simulations using a coarse-grained extension of the lattice Boltzmann method." *Fluid Dynamics Research* 19.5 (1997): 289-302.
- [4] Aristov, V. V. "Solution of the Boltzmann equation for discrete velocities." *Soviet Physics Doklady. Vol. 30* (1985).
- [5] Bardos, Claude, François Golse, and David Levermore. "Sur les limites asymptotiques de la théorie cinétique conduisant à la dynamique des fluides incompressibles." *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série 1, Mathématique* 309.11 (1989): 727-732.
- [6] Bardos, Claude, François Golse, and David Levermore. "Fluid dynamic limits of kinetic equations. I. Formal derivations." *Journal of statistical physics* 63.1-2 (1991): 323-344.
- [7] Bardos, Claude, and Seiji Ukai. "The classical incompressible Navier-Stokes limit of the Boltzmann equation." *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 1.02 (1991): 235-257.
- [8] Bardos, Claude, François Golse, and C. David Levermore. "The acoustic limit for the Boltzmann equation." *Archive for rational mechanics and analysis* 153.3 (2000): 177-204.

- [9] Beale, J. Thomas. "Large-time behavior of the Broadwell model of a discrete velocity gas." *Communications in Mathematical Physics* 102.2 (1985): 217-235.
- [10] Beale, J. Thomas. "Large-time behavior of discrete velocity Boltzmann equations." *Communications in mathematical physics* 106.4 (1986): 659-678.
- [11] Bellomo, Nicola, Andrzej Palczewski, and Giuseppe Toscani. *Mathematical topics in nonlinear kinetic theory*. Vol. 1. Singapore: World Scientific (1988).
- [12] Bellomo, N., and T. Gustafsson. "The discrete Boltzmann equation: a review of the mathematical aspects of the initial and initial-boundary value problems." *Reviews in Mathematical Physics* 3.02 (1991): 137-162.
- [13] Bellomo, Nicola, ed. *Lecture notes on mathematical theory of the Boltzmann equation*. Vol. 33. World scientific (1995).
- [14] Bellouquid, Abdelghani. "The hydrodynamical limit of the non linear Boltzmann equation." *Transport theory and statistical physics* 28.1 (1999): 57-82.
- [15] Bellouquid, Abdelghani. "Limite hydrodynamique de quelques modeles de la théorie cinétique discrete." *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series I-Mathematics* 330.10 (2000): 951-956.
- [16] Bellouquid, A. "The incompressible Navier-Stokes for the nonlinear discrete velocity models." *Journal of Nonlinear Mathematical Physics* 9.4 (2002): 426-445.
- [17] Bellouquid, A. "From microscopic to macroscopic models: Asymptotic analysis of the broadwell model toward the wave equation." *Mathematical and computer modelling* 36.11 (2002): 1169-1181.
- [18] Bellouquid, A. "A diffusive limit for nonlinear discrete velocity models." *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 13.01 (2003): 35-58.
- [19] Bernardin, Cédric, and Patricia Goncalves. "From Particle Systems to Partial Differential Equations." *Proceedings of the Particle Systems and PDEs Conference, Braga, Portugal* (2012).
- [20] Bhatnagar, Prabhu Lal, Eugene P. Gross, and Max Krook. "A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems." *Physical review* 94.3 (1954): 511.

- [21] Boltzmann, L. "Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gas-  
molekülen, Sitzungsberichte der keiserlichen Akademie der Wissenschaften in  
Wien 66 (1872), 275-370. Translation: Further studies on the thermal equilibrium  
of gas molecules." *Kinetic Theory of Gases: An Anthology of Classic Papers With  
Historical Commentary*; SG Brush, NS Hall, (eds.), Imperial Colledge Press, Lon-  
don, UK (2003): 362-368.
- [22] Bony, Jean-Michel. "Solutions globales bornées pour les modèles discrets de  
l'équation de Boltzmann en dimension 1 d'espace." *Journées équations aux  
dérivées partielles* (1987): 1-10.
- [23] Bony, Jean-Michel. "Eestence Globale à Donnée de Cauchy Petites pour les modé-  
les discrets de l'équation de Boltzmann." *Communications in partial differential  
equations* 16.4-5 (1991): 533-545.
- [24] Bouchut, François, and Laurent Desvillettes. "A proof of the smoothing properties  
of the positive part of Boltzmann's kernel." *Revista Matem atica Iberoamericana*  
14.1 (1998).
- [25] Bouchut, François, François Golse, and Mario Pulvirenti. "Kinetic equations and  
asymptotic theory." (2000): 162.
- [26] Bouzidi, M'hamed, et al. "Lattice Boltzmann equation on a two-dimensional rec-  
tangular grid." *Journal of Computational Physics* 172.2 (2001): 704-717.
- [27] Broadwell, James E. "Study of rarefied shear flow by the discrete velocity  
method." *Journal of Fluid Mechanics* 19.03 (1964): 401-414.
- [28] Broadwell, James E. "Shock structure in a simple discrete velocity gas." *Physics of  
Fluids* (1958-1988) 7.8 (1964): 1243-1247.
- [29] Cabannes, H. "Global solution of the Cauchy problem in discrete kinetic  
theory." *Journal de Mecanique* 17 (1978): 1-22.
- [30] Cabannes, H., "The Discrete Boltzmann Equation: Theory and Applications", Lec-  
ture Notes at the Uniiversity of California, Berkeley (1980).
- [31] Cabannes, H., and S. Kawashima. "Le problème aux valeurs initiales en théorie  
cinétique discrète." *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série 1, Mathé-  
matique* 307.9 (1988): 507-511.

- [32] Caflisch, Russel E. "Navier-stokes and boltzmann shock profiles for a model of gas dynamics." *Communications on Pure and Applied Mathematics* 32.4 (1979): 521-554.
- [33] Caflisch, Russel E. "The fluid dynamic limit of the nonlinear Boltzmann equation." *Communications on Pure and Applied Mathematics* 33.5 (1980): 651-666.
- [34] Caflisch, Russel E., and George C. Papanicolaou. "The fluid dynamical limit of a nonlinear model boltzmann equation." *Communications on Pure and Applied Mathematics* 32.5 (1979): 589-616.
- [35] Carleman, Torsten. *Problemes mathématiques dans la théorie cinétique de gaz*. Vol. 2. Almqvist Wiksell (1957).
- [36] Cercignani, Carlo. *Theory and application of the Boltzmann equation*. Scottish Academic Press (1975).
- [37] Cercignani, Carlo. "The Boltzmann equation." *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Springer New York, (1988): 40-103.
- [38] Cercignani, Carlo, Reinhard Illner, and Mario Pulvirenti. *The mathematical theory of dilute gases*. Vol. 106. Springer Science & Business Media (2013).
- [39] Chapman, Sydney. "The kinetic theory of simple and composite monatomic gases: viscosity, thermal conduction, and diffusion." *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 93.646 (1916): 1-20.
- [40] Chapman, Sydney, and Thomas George Cowling. *The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. Cambridge university press (1970).
- [41] Chen, Hudong, Shiyi Chen, and William H. Matthaeus. "Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method." *Physical Review A* 45.8 (1992): R5339.
- [42] Chen, Shiyi, et al. "Lattice methods and their applications to reacting systems." *Computers & chemical engineering* 19.6 (1995): 617-646.
- [43] Chen, Shiyi, Daniel Martinez, and Renwei Mei. "On boundary conditions in lattice Boltzmann methods." *Physics of Fluids (1994-present)* 8.9 (1996): 2527-2536.

- [44] Chen, Shiyi, and Gary D. Doolen. "Lattice Boltzmann method for fluid flows." *Annual review of fluid mechanics* 30.1 (1998): 329-364.
- [45] Chopard, Bastien, et al. "Cellular automata and lattice Boltzmann techniques: An approach to model and simulate complex systems." *Advances in complex systems* 5.02n03 (2002): 103-246.
- [46] Clausius, Rudolf. "Über die Art der Bewegung, welche wir Wärme nennen." *Annalen der Physik* 176.3 (1857): 353-380.
- [47] Conway, John. "The game of life." *Scientific American* 223.4 (1970): 4.
- [48] Cornille, H. "Exact Solutions of the Broadwell Model for a Discrete Velocity Gas." *Journal Mathematical Physics* 12 (1987): 315-326.
- [49] Cornille, H. "Exact solutions of the Broadwell model in 1+ 1 dimensions." *Journal of Physics A: Mathematical and General* 20.8 (1987): 1973.
- [50] Cornubert, R., D. Dhumieres, and D. Levermore. "A Knudsen layer theory for lattice gases." *NASA STI/Recon Technical Report N 91* (1990): 10248.
- [51] Dahlburg, Jill P., David Montgomery, and Gary D. Doolen. "Noise and compressibility in lattice-gas fluids." *Physical Review A* 36.5 (1987): 2471.
- [52] De Masi, A., R. Esposito, and J. L. Lebowitz. "Incompressible navier-stokes and euler limits of the boltzmann equation." *Communications on Pure and Applied Mathematics* 42.8 (1989): 1189-1214.
- [53] Desvilletes, Laurent. "About the use of the Fourier transform for the Boltzmann equation." *Riv. Mat. Univ. Parma* 7.2 (2003): 1-99.
- [54] Desvilletes, L., and F. Golse. "A remark concerning the Chapman-Enskog asymptotics. In "Advances in kinetic theory and computing", B; Perthame ed., 191-203." *Ser. Adv. Math. Appl. Sci* 22.
- [55] Deutsch, A., and S. Dormann. "Cellular automaton modeling of biological formation: characterization, applications and analysis." (2005).
- [56] Dimarco, Giacomo, and Lorenzo Pareschi. "Numerical methods for kinetic equations." *Acta Numerica* 23 (2014): 369-520.

- [57] DiPerna, Ronald J., and Pierre-Louis Lions. "On the Cauchy problem for Boltzmann equations: global existence and weak stability." *Annals of Mathematics* (1989): 321-366.
- [58] DiPerna, Ronald J., and Pierre Louis Lions. "Global solutions of Boltzmann's equation and the entropy inequality." *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 114.1 (1991): 47-55.
- [59] Doolen, Gary D. *Lattice gas methods: theory, applications, and hardware*. MIT press (1991).
- [60] Ellis, Richard S., and Mark A. Pinsky. "The first and second fluid approximations to the linearized Boltzmann equation." *J. Math. Pures Appl* 54.9 (1975): 125-156.
- [61] Ellis, Richard S., and Mark A. Pinsky. "The projection of the Navier-Stokes equations upon the Euler Equations (1')." (1975).
- [62] Enskog, David. "Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünnten Gasen." (1917).
- [63] Esposito, R., J. L. Lebowitz, and R. Marra. "The Navier-Stokes limit of stationary solutions of the nonlinear Boltzmann equation." *Journal of statistical physics* 78.1-2 (1995): 389-412.
- [64] Esposito, R., J. L. Lebowitz, and R. Marra. "On the derivation of hydrodynamics from the Boltzmann equation." *Physics of Fluids (1994-present)* 11.8 (1999): 2354-2366.
- [65] Filippova, Olga, and Dieter Hänel. "Grid refinement for lattice-BGK models." *Journal of Computational Physics* 147.1 (1998): 219-228.
- [66] Filippova, Olga, and Dieter Hänel. "A novel lattice BGK approach for low Mach number combustion." *Journal of Computational Physics* 158.2 (2000): 139-160.
- [67] Frisch, Uriel, Brosl Hasslacher, and Yves Pomeau. "Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation." *Physical review letters* 56.14 (1986): 1505.
- [68] Frisch, Uriel, et al. "Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions." *Complex systems* 1.4 (1987): 649-707.
- [69] Gatignol, R. "Théorie cinétique d'un gaz à répartition discrete des vitesses." *Z. Flugwissensch.* 18 (1970): 93-97.

- [70] Gatignol, Renée. Contribution à la théorie cinétique des gaz à répartition discrète de vitesses. Diss. (1973).
- [71] Gatignol, Renée. Théorie cinétique des gaz à répartition discrète de vitesses. Springer (1975).
- [72] Gatignol, Renée. "Kinetic theory for a discrete velocity gas and application to the shock structure." *Physics of Fluids (1958-1988)* 18.2 (1975): 153-161.
- [73] Gatignol, R. "Unsteady Couette flow for a discrete velocity gas." *Rarefied Gas Dynamics*. Vol. 1. (1979).
- [74] Goldstein, D., B. Sturtevant, and J. E. Broadwell. "Investigations of the motion of discrete-velocity gases." *Progress in Astronautics and Aeronautics* 117 (1989): 100-117.
- [75] Golse, François, et al. "Regularity of the moments of the solution of a transport equation." *Journal of functional analysis* 76.1 (1988): 110-125.
- [76] GOLSE, FRANCOIS. "Fluid Dynamic Limits of Kinetic Equations I1 Convergence Proofs for the Boltzmann Equation." *Communications on pure and applied mathematics* 46 (1993): 667-753.
- [77] Golse, François, and C. David Levermore. "Stokes-Fourier and acoustic limits for the Boltzmann equation: Convergence proofs." *Communications on pure and applied mathematics* 55.3 (2002): 336-393.
- [78] Golse, François, and Laure Saint-Raymond. "The Navier-Stokes limit of the Boltzmann equation for bounded collision kernels." *Inventiones mathematicae* 155.1 (2004): 81-161.
- [79] Golse, François, and C. David Levermore. "Hydrodynamic limits of kinetic models." *Fields Institute Communications* 46 (2005): 1-75.
- [80] Golse, François, and Laure Saint-Raymond. "Hydrodynamic limits for the Boltzmann equation." *Riv. Mat. Univ. Parma (7)* 4 (2005): 1-144.
- [81] Golse, François. "The Boltzmann equation and its hydrodynamic limits." *Handbook of Differential Equations: Evolutionary Equations* 2 (2006): 159-301.

- [82] Golse, François, and Laure Saint-Raymond. "The incompressible Navier-Stokes limit of the Boltzmann equation for hard cutoff potentials." *Journal de mathématiques pures et appliquées* 91.5 (2009): 508-552.
- [83] Golse, François. "From the Kinetic Theory of Gases to Continuum Mechanics." *27TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON RAREFIED GAS DYNAMICS*. Vol. 1333. No. 1. AIP Publishing, (2011).
- [84] Golse, François. "From the Boltzmann equation to the Euler equations in the presence of boundaries." *Computers & Mathematics with Applications* 65.6 (2013): 815-830.
- [85] Grad, Harold. "Principles of the kinetic theory of gases." *Thermodynamik der Gase/Thermodynamics of Gases*. Springer Berlin Heidelberg, (1958): 205-294.
- [86] Grad, Harold. "Asymptotic theory of the Boltzmann equation." *Physics of Fluids* (1958-1988) 6.2 (1963): 147-181.
- [87] Grad, Harold. "Asymptotic Theory of the Boltzmann Equation, II." *Third International Rarefied Gas Dynamics Symposium, 1*, J.A. Laurmann ed., Academic Press, New York, (1963): 26-59.
- [88] Grad, Harold. "Asymptotic equivalence of the Navier-Stokes and nonlinear Boltzmann equations." No. NYO-1480-7; MF-41; CONF-640602-1. New York Univ., New York. Courant Inst. of Mathematical Sciences (1964).
- [89] Greenberg, William, P. F. Zweifel, and J. Polewczak. "Global existence proofs for the Boltzmann equation." *Nonequilibrium Phenomena I: The Boltzmann Equation* 1 (1983): 19-49.
- [90] Gressman, Philip, and Robert Strain. "Global classical solutions of the Boltzmann equation without angular cut-off." *Journal of the American Mathematical Society* 24.3 (2011): 771-847.
- [91] Gropengiesser, F., Neunzert, H., Struckmeier, J., *Computational Methods for the Boltzmann-Equation* AGTH report. N0 43, University Of Kaiserslautern (1990).
- [92] Guo, Zhaoli, Baochang Shi, and Nengchao Wang. "Lattice BGK model for incompressible Navier-Stokes equation." *Journal of Computational Physics* 165.1 (2000): 288-306.

- [93] Guo, Yan. "Classical solutions to the Boltzmann equation for molecules with an angular cutoff." *Archive for rational mechanics and analysis* 169.4 (2003): 305-353.
- [94] Guo, Yan. "The Boltzmann equation in the whole space." *Indiana University mathematics journal* 53.4 (2004): 1081-1094.
- [95] Guo, Yan. "Boltzmann diffusive limit beyond the Navier-Stokes approximation." *Communications on pure and applied mathematics* 59.5 (2006): 626-687.
- [96] Hamdache, Kamel. "Existence globale et comportement asymptotique pour l'équation de Boltzmann à répartition discrète des vitesses." *J. de Mecan. Th. Appl* 3.5 (1984): 761-785.
- [97] Hamdache, Kamel. "Existence in the Large and Asymptotic behaviour for the Boltzmann equation." *Japan Journal of Applied Mathematics* 2.1 (1985): 1-15.
- [98] Hardy, J., Y. Pomeau, and O. De Pazzis. "Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions." *Journal of Mathematical Physics* 14.12 (1973): 1746-1759.
- [99] He, Xiaoyi, and Qisu Zou. "Analysis and boundary condition of the lattice Boltzmann BGK model with two velocity components." *arXiv preprint comp-gas/9507002* (1995).
- [100] He, Xiaoyi, Li-Shi Luo, and Micah Dembo. "Some progress in lattice Boltzmann method. Part I. Nonuniform mesh grids." *Journal of Computational Physics* 129.2 (1996): 357-363.
- [101] He, Xiaoyi, and Li-Shi Luo. "Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation." *Journal of statistical Physics* 88.3-4 (1997): 927-944.
- [102] He, Xiaoyi, and Gary Doolen. "Lattice Boltzmann method on curvilinear coordinates system: flow around a circular cylinder." *Journal of Computational Physics* 134.2 (1997): 306-315.
- [103] He, Xiaoyi, and Gary D. Doolen. "Lattice Boltzmann method on a curvilinear coordinate system: Vortex shedding behind a circular cylinder." *Physical Review E* 56.1 (1997): 434.
- [104] He, Xiaoyi, et al. "Analytic solutions of simple flows and analysis of nonslip boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model." *Journal of Statistical Physics* 87.1-2 (1997): 115-136.

- [105] He, Xiaoyi, Shiyi Chen, and Gary D. Doolen. "A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit." *Journal of Computational Physics* 146.1 (1998): 282-300.
- [106] He, Xiaoyi, Shiyi Chen, and Raoyang Zhang. "A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability." *Journal of Computational Physics* 152.2 (1999): 642-663.
- [107] He, Xiaoyi, et al. "On the three-dimensional Rayleigh-Taylor instability." *Physics of Fluids (1994-present)* 11.5 (1999): 1143-1152.
- [108] Heintz, A., and V. Panferov. "A new consistent discrete-velocity model for the Boltzmann equation." preprint 11 (1999).
- [109] Hilbert, David. "Begründung der kinetischen Gastheorie." *Mathematische Annalen* 72.4 (1912): 562-577.
- [110] Hirsch, Charles. *Computational methods for inviscid and viscous flows*. Vol. 2. New York: Wiley (1990).
- [111] Hou, Shuling, et al. "Simulation of Cavity Flow by the Lattice Boltzmann Method." *Journal of Computational Physics* 2.118 (1995): 329-347.
- [112] Illner, R., and H. Neunzert. "Global existence for two-velocity models of the Boltzmann equation." *Mathematical Methods in the Applied Sciences* 1.2 (1979): 187-193.
- [113] Illner, Reinhard. "Global existence results for discrete velocity models of the Boltzmann equation in several dimensions." *Journal de Mecanique Theorique et Appliquee* 1 (1982): 611-622.
- [114] Illner, Reinhard, and Marvin Shinbrot. "The Boltzmann equation: global existence for a rare gas in an infinite vacuum." *Communications in Mathematical Physics* 95.2 (1984): 217-226.
- [115] Inoue, Kiyoshi, and Takaaki Nishida. "On the Broadwell model of the Boltzmann equation for a simple discrete velocity gas." *Applied Mathematics and Optimization* 3.1 (1976): 27-49.
- [116] Kadanoff, Leo P. "On two levels." *Physics today* 39 (1986): 7.

- [117] Kadanoff, Leo P., Guy R. McNamara, and Gianluigi Zanetti. "From automata to fluid flow: comparisons of simulation and theory." *Physical Review A* 40.8 (1989): 4527.
- [118] Karafyllidis, Ioannis, and Adonios Thanailakis. "A model for predicting forest fire spreading using cellular automata." *Ecological Modelling* 99.1 (1997): 87-97.
- [119] Kawashima, Shuichi. "Global solution of the initial value problem for a discrete velocity model of the Boltzmann equation." *Proceedings of the Japan Academy, Series A, Mathematical Sciences* 57.1 (1981): 19-24.
- [120] Kawashima, Shuichi. "Global existence and stability of solutions for discrete velocity models of the Boltzmann equation." *North-Holland Mathematics Studies* 98 (1984): 59-85.
- [121] Kawashima, Shuichi. "Large-time behavior of solutions of the discrete Boltzmann equation." *Communications in Mathematical Physics* 109.4 (1987): 563-589.
- [122] Kawashima, Shuichi, and Yasushi Shizuta. "The Navier-Stokes equation in the discrete kinetic theory." *Journal de mécanique théorique et appliquée* 7.5 (1988): 597-621.
- [123] Kawashima, Shuichi, Akitaka Matsumura, and Takaaki Nishida. "On the fluid-dynamical approximation to the Boltzmann equation at the level of the Navier-Stokes equation." *Communications in Mathematical Physics* 70.2 (1979): 97-124.
- [124] Kolodner, Ignace I. "On the Carleman's model for the Boltzmann equation and its generalizations." *Annali di Matematica Pura ed Applicata* 63.1 (1963): 11-32.
- [125] Krönig, August. "Grundzüge einer theorie der gase." *Annalen der Physik* 175.10 (1856): 315-322.
- [126] Lachowicz, M., and Roberto Monaco. "Existence and quantitative analysis of the solutions to the initial value problem for the discrete Boltzmann equation in all space." *SIAM Journal on Applied Mathematics* 49.4 (1989): 1231-1241.
- [127] Leray, Jean. "Etude de diverses équations intégrales non linéaires et de quelques problèmes que pose l'hydrodynamique." *Thèses françaises de l'entre-deux-guerres* 142 (1933): 1-82.

- [128] Levermore, C. David, and Nader Masmoudi. "From the Boltzmann equation to an incompressible Navier-Stokes-Fourier system." *Archive for rational mechanics and analysis* 196.3 (2010): 753-809.
- [129] Lim, C. Y., et al. "Application of lattice Boltzmann method to simulate microchannel flows." *Physics of Fluids (1994-present)* 14.7 (2002): 2299-2308.
- [130] Lions, P. L. "Mathematical topics in fluid mechanics, vol. 1, incompressible models (1996)." *Zbl0866 76002*.
- [131] Lions, P-L., and Nader Masmoudi. "From the Boltzmann Equations to the Equations of Incompressible Fluid Mechanics, I." *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 158.3 (2001): 173-193.
- [132] Lions, P. L., and N. Masmoudi. "From Boltzmann equation to the Navier-Stokes and Euler equations II." *Archive Rat. Mech. & Anal* 158 (2001): 195-211.
- [133] Longo, Eugenia, and Roberto Monaco. "On the thermodynamics of the discrete models of the Boltzmann equation for gas-mixtures." *Transport Theory and Statistical Physics* 17.4 (1988): 423-442.
- [134] Luo, Li-Shi. "Symmetry breaking of flow in 2D symmetric channels: simulations by lattice-Boltzmann method." *International Journal of Modern Physics C* 8.04 (1997): 859-867.
- [135] Machado, JA Tenreiro. "Fractional order modelling of dynamic backlash." *Mechatronics* 23.7 (2013): 741-745.
- [136] Machado, José. "Dynamics of a backlash chain." *Open Physics* 11.10 (2013): 1268-1274.
- [137] Marchuk, Guri I. "Splitting and alternating direction methods." *Handbook of numerical analysis*. 1 (1990): 197-462.
- [138] McLennan, James A. "Convergence of the Chapman-Enskog Expansion for the Linearized Boltzmann Equation." *Physics of Fluids (1958-1988)* 8.9 (1965): 1580-1584.
- [139] McNamara, Guy R., and Gianluigi Zanetti. "Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata." *Physical Review Letters* 61.20 (1988): 2332.

- [140] Mei, Renwei, Li-Shi Luo, and Wei Shyy. "An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method." *Journal of computational physics* 155.2 (1999): 307-330.
- [141] Mei, Renwei, et al. "Lattice Boltzmann method for 3-D flows with curved boundary." *Journal of Computational Physics* 161.2 (2000): 680-699.
- [142] Michel, P., and J. Schneider. "A quadrature formula for the Boltzmann equation." *SIAM J. Num. Anal* (1994).
- [143] Mischler, Stéphane. "Convergence of discrete-velocity schemes for the Boltzmann equation." *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 140.1 (1997): 53-77.
- [144] Monaco, Roberto. *Discrete kinetic theory, lattice gas dynamics and foundations of hydrodynamics*. Proceedings of the workshop held in Torino, September 20-24, 1988. World Scientific Publishing Co., Inc, 1989.
- [145] Monaco, Roberto, and Luigi Preziosi. *Fluid dynamic applications of the discrete Boltzmann equation*. Vol. 3. World Scientific (1991).
- [146] Monaco, Roberto, M. Pandolfi Bianchi, and A. Rossani. "Chapman-Enskog expansion for a discrete velocity model of a gas mixture with bi-molecular chemical reactions." *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 4.03 (1994): 355-372.
- [147] Nishida, Takaaki, and Masayasu Mimura. "On the Broadwell's model for a simple discrete velocity gas." *Proceedings of the Japan Academy* 50.10 (1974): 812-817.
- [148] Nishida, Takaaki, and Kazuo Imai. "Global solutions to the initial value problem for the nonlinear Boltzmann equation." *Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences* 12.1 (1976): 229-239.
- [149] Nishida, Takaaki. "Fluid dynamical limit of the nonlinear Boltzmann equation to the level of the compressible Euler equation." *Communications in Mathematical Physics* 61.2 (1978): 119-148.
- [150] Palczewski, A., and G. Toscani. "Global solution of the Boltzmann equation for rigid spheres and initial data close to a local Maxwellian." *Journal of Mathematical Physics* 30.10 (1989): 2445-2450.

- [151] Palczewski, Andrzej, Jacques Schneider, and Alexandre V. Bobylev. "A consistency result for a discrete-velocity model of the Boltzmann equation." *SIAM journal on numerical analysis* 34.5 (1997): 1865-1883.
- [152] Palczewski, Andrzej, and Jacques Schneider. "Existence, stability, and convergence of solutions of discrete velocity models to the Boltzmann equation." *Journal of statistical physics* 91.1-2 (1998): 307-326.
- [153] Pandolfi Bianchi, M., and Ana Jacinta Soares. "The discrete Boltzmann equation for gases with autocatalytic reversible reactions." *COMMUNICATIONS ON APPLIED NONLINEAR ANALYSIS* 1 (1994): 25-48.
- [154] Panferov, Vladislav. "Convergence of discrete-velocity models to the Boltzmann equation." (1997).
- [155] Pareschi, Lorenzo, and Giovanni Russo. "An introduction to the numerical analysis of the Boltzmann equation." *Riv. Mat. Univ. Parma* (7) 4 (2005): 145-250.
- [156] Platkowski, Tadeusz, and Reinhard Illner. "Discrete velocity models of the Boltzmann equation: a survey on the mathematical aspects of the theory." *SIAM review* 30.2 (1988): 213-255.
- [157] Polewczak, Jacek. "Classical solution of the nonlinear Boltzmann equation in all  $\mathbb{R}^3$ : Asymptotic behavior of solutions." *Journal of statistical physics* 50.3-4 (1988): 611-632.
- [158] Polewczak, Jacek. "New estimations of the nonlinear Boltzmann operator and their application to existence theorems." *Transport Theory and Statistical Physics* 18.2 (1989): 235-247.
- [159] Pozrikidis, C. "Introduction to theoretical and computational fluid dynamics." (1997).
- [160] Qi, Dewei. "Lattice-Boltzmann simulations of particles in non-zero-Reynolds-number flows." *Journal of Fluid Mechanics* 385 (1999): 41-62.
- [161] Qian, Y. H., Dominique d'Humières, and Pierre Lallemand. "Lattice BGK models for Navier-Stokes equation." *EPL (Europhysics Letters)* 17.6 (1992): 479.
- [162] Rogier, François, and Jacques Schneider. "A direct method for solving the Boltzmann equation." *Transport Theory and Statistical Physics* 23.1-3 (1994): 313-338.

- [163] Rothman, Daniel H., and Stiphane Zaleski. "Lattice-gas cellular automata: simple models of complex hydrodynamics." Cambridge University Press 5 (2004).
- [164] Schneider, Jacques. Une méthode déterministe pour la résolution de l'équation de Boltzmann. Diss. (1993).
- [165] Shinbrot, Marvin. "The Carleman model." *Mathematical Problems in the Kinetic Theory of Gases* (1980): 129.
- [166] Soares, Ana Jacinta Pereira da Costa. "Teoria Cinética Discreta de Gases Quimicamente Activos. Ondas de Detonação (1997).
- [167] Sone, Yoshio. "Kinetic Theory and Fluid Dynamics." *Kinetic theory and fluid dynamics*/Yoshio Sone. Boston: Birkhauser, c2002. Modeling and simulation in science, engineering, and technology 1 (2002).
- [168] Sterling, James D., and Shiyi Chen. "Stability analysis of lattice Boltzmann methods." *Journal of Computational Physics* 123.1 (1996): 196-206.
- [169] Strumolo, G. and Viswanathan, B. "New Directions in Computational Aerodynamics." *Physics World* 10 (1997): 45-49.
- [170] Succi, Sauro. *The lattice Boltzmann equation: for fluid dynamics and beyond*. Oxford university press (2001).
- [171] Tan, Zhiqiang, et al. "New numerical strategy to evaluate the collision integral of the Boltzmann equation." *Progress in Astronautics and Aeronautics* 118 (1989): 337-342.
- [172] Tartar, L. "Existence globale pour un système hyperbolique semi-linéaire de la théorie cinétique des gaz." *Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)* (1975): 1-10.
- [173] Tartar, Luc C. *Some Existence Theorems for Semilinear Hyperbolic Systems in One Space Variable*. No. MRC-TSR-2164. WISCONSIN UNIV-MADISON MATHEMATICS RESEARCH CENTER (1981).
- [174] Toscani, G. "On the discrete velocity models of the Boltzmann equation in several dimensions." *Annali di matematica pura ed applicata* 138.1 (1984): 297-308.

- [175] Toscani, G. "Global existence and asymptotic behavior for the discrete velocity models of the Boltzmann equation." *Journal of mathematical physics* 26.11 (1985): 2918-2921.
- [176] Toscani, G. "On the non-linear Boltzmann equation in unbounded domains." *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 95.1 (1986): 37-49.
- [177] Truesdell, Clifford, and Robert G. Muncaster. "Fundamentals of Maxwell's kinetic theory of a simple monatomic gas: treated as a branch of rational mechanics." Research supported by the National Science Foundation. New York, Academic Press, Inc. (Pure and Applied Mathematics, No. 83), 1980. 621 p. 1 (1980).
- [178] Ulam, S. M., and John von Neumann. "Random ergodic theorems." *Bull. Amer. Math. Soc* 51 (1945): 660.
- [179] Ukai, Seiji, and Kiyoshi Asano. "The Euler limit and initial layer of the nonlinear Boltzmann equation." *Hokkaido Math. J* 12.3 (1983): 311-332.
- [180] Valougeorgis, D., and S. Naris. "Acceleration schemes of the discrete velocity method: Gaseous flows in rectangular microchannels." *Siam Journal on Scientific Computing* 25.2 (2003): 534-552.
- [181] Villani, Cédric. "Regularity estimates via the entropy dissipation for the spatially homogeneous Boltzmann equation without cut-off." *Revista Matemática Iberoamericana* 15 (1999): 335-352.
- [182] Villani, Cédric. "A review of mathematical topics in collisional kinetic theory." *Handbook of mathematical fluid dynamics* 1 (2002): 71-305.
- [183] Von Neumann, John, and Arthur W. Burks. "Theory of self-reproducing automata." *IEEE Transactions on Neural Networks* 5.1 (1966): 3-14.
- [184] White, Frank M. "Fluid mechanics chap 6.9." *Mechanical engineering series*, 2nd edn. McGraw-Hill, New York (1988).
- [185] Wolf-Gladrow, Dieter A. *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models: an introduction*. Springer Science & Business Media (2000).
- [186] Wolfram, Stephen. "Universality and complexity in cellular automata." *Physica D: Nonlinear Phenomena* 10.1 (1984): 1-35.

- [187] Wolfram, Stephen. "Cellular automaton fluids 1: Basic theory." *Journal of statistical physics* 45.3-4 (1986): 471-526.
- [188] Wolfram, Stephen. *Theory and applications of cellular automata*. Vol. 1. Singapore: World scientific (1986).
- [189] Wolfram, Stephen. *A new kind of science*. Vol. 5. Champaign: Wolfram media (2002).
- [190] Ziegler, Donald P. "Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations." *Journal of Statistical Physics* 71.5-6 (1993): 1171-1177.
- [191] Zou, Qisu, and Xiaoyi He. "On pressure and velocity flow boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model." *arXiv preprint comp-gas/9508001* (1995).
- [192] Zou, Qisu, and Xiaoyi He. "On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model." *Physics of Fluids (1994-present)* 9.6 (1997): 1591-1598.