

**THE LATTICE BOLTZMANN EQUATION (LBE) METHOD AN
ALTERNATIVE IN THE 2D COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS**

**EL METODO DE LA ECUACION DE LATTICE BOLTZMANN (LBE) UNA
ALTERNATIVA EN LA DINAMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL 2D**

MSc. Elkin G. Florez S.* , PhD. Ildefonso Cuesta **, PhD. Clara Saluela **

* Dpto de Ing. Mecánica-**Universidad de Pamplona**., Pamplona, Colombia.
E-mail: eflorez@unipamplona.edu.co

** Dpto de Ing. Mecánica, **Universidad Rovira i Virgili**, Tarragona, España.
E-mail: { ildefonso.cuesta-clara.saluen }@urv.cat

Abstract: The lattice Boltzmann equation (LBE) method is an approximation based on kinetic theory, used to simulate flow in the fluid mechanics. In this method the fluid is modelled by particles moving on a regular lattice. At each time step particles propagate to neighboring lattice sides and re-distribute their velocities using a local collision phase. Therefore, in the method LBE the kinetic equation of particles velocity distribution function $f(x, \xi, t)$ is solved. Where x is the special position, ξ is the particle velocity and t is the time. The macroscopic properties of the fluid (like density \mathbf{r} and velocity \mathbf{u}) be obtained evaluating the hydrodynamics moments of the distribution function f .

Resumen: El método de la ecuación de lattice Boltzmann (LBE) es una aproximación, basada en la teoría cinética, utilizada para la simulación de flujos en la mecánica de fluidos. En este método el fluido es simulado por partículas moviéndose sobre un lattice regular. En cada paso de tiempo las partículas se propagan al lattice vecino redistribuyendo su velocidad utilizando una fase de colisión local. Además, en el método LBE se resuelve la ecuación cinética para la función de distribución de la velocidad de las partículas $f(x, \xi, t)$. Donde x es el vector posición espacial, ξ es el vector velocidad de la partícula y t es el tiempo. Las propiedades microscópicas del fluido (tales como la densidad \mathbf{r} y la velocidad \mathbf{u}) se obtienen evaluando los momentos hidrodinámicos de la función de distribución f .

Keywords: Lattice Boltzmann, kinetic theory, computational fluid dynamics.

1. INTRODUCTION

Un fluido puede ser descrito o caracterizado en tres niveles [1], (i) Dinámica Molecular: se basa en la mecánica Newtoniana y trabaja con la posición y la velocidad. El sistema normalmente mantiene el orden del número de Avogadro de moléculas. La descripción de la dinámica molecular incluye el seguimiento de las trayectorias las cuales son acordes con la ecuación de Newton-Hamilton. (ii)

Teoría cinética: se basa en la termodinámica estadística de equilibrio y no-equilibrio y trabaja con la función de distribución de partículas (masa), definida como la densidad de probabilidad de que una partícula se encuentre en una posición x , en un tiempo t con una velocidad ξ . La ecuación de cinética clásica es la célebre ecuación de Boltzmann; y (iii) Hidrodinámica: se basa en las leyes de conservación de la física macroscópica, en las que el fluido es tratado como un continuo, y

caracterizado por medio de variables tales como densidad (\mathbf{r}), velocidad (\mathbf{u}), presión (P), temperatura (T), etc. Las variables continuas resultan del promedio colectivo de un gran número de trayectorias individuales. Este es el nivel macroscópico en el cual el fluido es gobernado por la ecuación de continuidad, ecuaciones de Navier-Stokes (N-S) y la ecuación de energía.

La teoría cinética juega un papel de puente para relacionar las propiedades moleculares a los coeficientes de transporte en el nivel de hidrodinámica del continuo.

El número de Knudsen, definido como $Kn = \lambda/L$, es una medida conveniente para categorizar el régimen del flujo, como se muestra en la figura 1. Aquí, L es la longitud macroscópica característica del flujo y λ es la longitud media entre las moléculas (mean free path). Los modelos continuos basados en las NS y la ecuación de Euler son generalmente válidos cuando $Kn < 0,01$, pero pueden ampliar su aplicación dentro del régimen de flujo-deslizado ($0,01 < Kn < 0,1$) utilizando unas apropiadas condiciones de frontera. Mientras el modelo de partículas discretas basado en la ecuación de Boltzmann gobierna casi todos los regímenes de flujo ($Kn < 100$). Indiscutiblemente, las aproximaciones numéricas basadas en la ecuación de Boltzmann son fundamentales y convenientes para amplios rangos de aplicaciones prácticas.

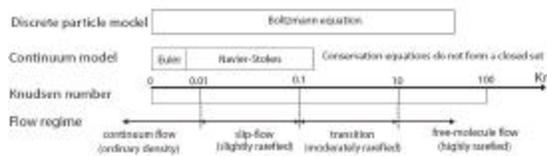


Fig. 1. Regímenes de flujo en función del número de Knudsen y ecuaciones que lo gobiernan [8]

El método de la ecuación de lattice Boltzmann tiene sus orígenes en los autómatas celulares de gases en lattice (LGCA). Un LGCA es un modelo simplificado de un gas en el cual muchas partículas colisionan conservando la masa, la cantidad de movimiento y la energía. Las partículas se mueven en un lattice en tiempos discretos y solo pueden moverse con un conjunto discreto de velocidades. El método LBE tuvo sus principios a finales de los 80's con el trabajo de McNamara y Zanetti [2], luego a principios de los 90's Chen *et al* [3] y Quian *et. al.* [4] propusieron separadamente la

implementación del modelo de colisión BGK [5] para reemplazar el término de colisión existente en la ecuación de Boltzmann y disminuir la complejidad del método. Además a finales de los 90's Luo, He y Lalleman presentaron un trabajo donde soportan el método con la teoría cinética de gases [6,7], hasta llegar en los últimos años a convertirse en una eficiente herramienta para la resolución o simulación de flujos laminares y turbulentos

2. ANTECEDENTES

2.1 Conceptos básicos en los métodos de la ecuación de lattice Boltzmann

El método LBE se basa en la ecuación de Boltzmann y en el concepto de espacio-fase (en un instante dado, un conjunto de partículas tiene una posición y una velocidad definida). En este método se define una función de distribución de las partículas $f(x, \mathbf{x}t)$, la cual determina el número de partículas por unidad de volumen o de espacio-fase. Donde x es la posición espacial, ξ es la velocidad de la partícula en el espacio de fase (x, \mathbf{x}) y t es el tiempo. Tomando el promedio de las cantidades físicas microscópicas (momentos de la función de distribución de las partículas), las propiedades macroscópicas se pueden obtener. Una información detallada del procedimiento anterior se encuentra en [7,8].

El LBM, se basa en la teoría cinética de gases y en la propia ecuación fundamental de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{x} \cdot \nabla f = O \quad (1)$$

Donde O es la función de colisión, que se obtiene al establecer un promedio sobre el conjunto representativo de partículas y despreciar sus correlaciones. En este trabajo se propone la utilización en forma sencilla de la función de colisión, con un solo tiempo de relajación t relacionado con la viscosidad y conocido como la aproximación de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) [2,4].

$$O = -\frac{1}{t}(f - f^{eq}) \quad (2)$$

Donde f^{eq} es función de distribución de equilibrio local. La ecuación (1) queda transformada en:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{x} \cdot \nabla f = -\frac{1}{\tau} (f - f^{(eq)}) \quad (3)$$

Resolviendo numéricamente para f , la ecuación anterior es primero discretizada en el espacio de velocidad usando un conjunto de vectores de velocidades finitas (e_i), en el contexto de las leyes de conservación [6,7], obtenemos la *ecuación de Boltzmann discretizada*:

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{x}_i \cdot \nabla f(\mathbf{x}, t)_i = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t)] \quad (4)$$

En la ecuación anterior, $f_i(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i, t)$ es la función de distribución asociada con la i -ésima velocidad discreta ξ_i y $f_i^{(eq)}$ es la función de distribución de equilibrio en el espacio de velocidad discreto.

2.2 Derivación de LBE de la Ecuación de Boltzmann

Sin la inclusión de fuerzas externas la ecuación de Boltzmann con colisión BGK esta dada por la ecuación (3). Con la función de distribución de equilibrio de Maxwell-Boltzmann

$$f^{eq} = \frac{\mathbf{r}}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{u})^2}{2RT}\right), \quad (5)$$

Donde R es la constante del gas, D es la dimensión espacial, y \mathbf{r} es la densidad, \mathbf{u} la velocidad del flujo y T la temperatura. Las variables macroscópicas son obtenidas tomando diferentes momentos de la función de distribución

$$\mathbf{r} = \int f \, d\mathbf{x} \quad \mathbf{r}\mathbf{u} = \int f \mathbf{x} \, d\mathbf{x} \quad (6)$$

La ecuación (6) es una ecuación diferencial parcial y se puede utilizar cualquier método numérico para resolverla. Después de discretizar la ecuación (3) en el espacio fase y reemplazando ξ por e_i . Si se aplica el esquema de diferencias finitas de primer orden en el tiempo, y tomando los términos de primer orden para los términos convectivos obtenemos:

$$f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{d}{dt} [f_i(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t)] - \frac{\Delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t)] \quad (7)$$

Donde $d = D\mathbf{t} e_i/Dx$, y Δt y Δx son el paso de tiempo y el tamaño de la malla, respectivamente. Escogiendo $d=1$ y denotando a $\tau = \tau/\Delta t$, la ecuación (7) llega a ser la ecuación de lattice Boltzmann estándar,

$$f_i(\mathbf{x} + e_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t)] \quad (8)$$

Aunque únicamente los esquemas de primer orden son utilizados para obtener la ecuación diferencial discretizada como lo muestra Sterling and Chen (1996), el error de discretización tiene una forma especial el cual puede ser incluida dentro del termino viscoso, y la solución de la ecuación (8) da una exactitud de segundo orden para las variables macroscópicas en tiempo y espacio.

3. MODELOS 2D LOS LBM

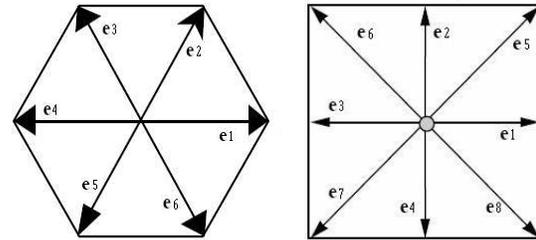


Fig. 2. a) Lattice hexagonal D2Q7, b) Lattice cuadrado D2Q9

La figura 2 muestra los dos lattice mas utilizados en el método LBE bidimensional, el lattice hexagonal y el lattice cuadrado, con 7 y 9 velocidades discretas respectivamente. Comúnmente estos lattice son conocidos como D2Q9 y D2Q7.

El conjunto de velocidades discretas en los modelos D2Q7 y D2Q9 están definidas por los vectores e_i como lo muestra la figura 2 y sus respectivos valores están dados por:

$$\mathbf{e}_0 = (0,0) \quad \mathbf{e}_i = (\cos \mathbf{q}_i, \sin \mathbf{q}_i)c, \quad \mathbf{q}_i = (i-1)\pi/3, \quad i=1,2,3,4,5,6 \quad (9)$$

y

$$\mathbf{e}_0 = (0,0) \quad \mathbf{e}_i = (\pm c, 0), (0, \pm c), \quad i=1,2,3,4 \quad (10) \quad \mathbf{e}_i = (\pm c, \pm c), \quad i=5,6,7,8$$

Donde $c = Dx/Dt = Dy/Dt$ y Dt , son la constante lattice y el tamaño del paso de tiempo, respectivamente. La constante lattice esta relacionada con la velocidad del sonido del sistema c_s , por medio de la ecuación de estado. Esto es, para el modelo D2Q7 tenemos: $RT=c_s=c^2/4$. Y para el modelo D2Q9; $RT=c_s=c^2/9$ [6]. La función de distribución de equilibrio ($f_i^{(eq)}$) para los modelos D2Q7 y D2Q9 respectivamente son:

$$f_i^{(eq)} = \mathbf{r} w_i \left[1 + \frac{4}{c^2} e_i \cdot \mathbf{u} + \frac{8}{c^4} (e_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{2}{c^2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right] \quad (11)$$

$$f_i^{(eq)} = \mathbf{r} w_i \left[1 + \frac{3}{c^2} e_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2c^4} (e_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right] \quad (12)$$

Donde w_i es el factor de peso y para el modelo D2Q7 esta dado por

$$w_i = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{2}, & i = 0 \\ \frac{1}{12}, & i = 1, 2, 3, 4, 5, 6 \end{array} \right\} \quad (13)$$

Y para el modelo D2Q9 son

$$w_i = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{4}{9}, & i = 0, \\ \frac{1}{9}, & i = 1, 2, 3, 4, \\ \frac{1}{36}, & i = 5, 6, 7, 8 \end{array} \right\} \quad (14)$$

En el espacio de velocidad discretizada (discretizando la ecuación 6), la densidad y la cantidad de movimiento del flujo pueden ser evaluados como:

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^8 f_i = \sum_{i=1}^8 f_i^{(eq)} \quad (15)$$

$$\mathbf{r} \mathbf{u} = \sum_{i=1}^8 e_i f_i = \sum_{i=1}^8 e_i f_i^{(eq)} \quad (16)$$

Utilizando la ecuación de estado de un gas ideal la presión se puede obtener de;

$$P = \frac{\mathbf{r} k_B T}{m} = \mathbf{r} c_s^2, \quad (17)$$

Además utilizando el parámetro de relajación t mencionado en la ecuación 2, obtenemos la viscosidad cinemática

$$\begin{aligned} v &= \frac{k_B T}{m} \left(\frac{1}{w} - \frac{1}{2} \right) \Delta t = \frac{c^2}{3} \left(\frac{1}{w} - \frac{1}{2} \right) \Delta t \\ &= \frac{2-w}{6w} c^2 \Delta t = \frac{c^2}{3} \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) \Delta t \end{aligned} \quad (18)$$

3.1 Implementación del método

Para el desarrollo del código bidimensional la ecuación (4) es discretizada en una forma particular y utilizando un paso de tiempo igual a Dt y el paso de espacio igual a $Dx = e_i Dt$, es

$$\begin{aligned} f_i(x_k + e_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x_k, t) = \\ - \omega \left[f_i(x_k, t) - f_i^{(eq)}(x_i, t) \right] \end{aligned} \quad (19)$$

Donde $\omega = Dt / l$, es la frecuencia de colisión entre partículas, el cual es igual al inverso del tiempo de relajación o tiempo de colisión entre partículas ($1/t$), y x_k es un punto en el espacio físico discretizado. Finalmente la ecuación (19) es usualmente resuelta en los siguientes dos pasos:

(i) Paso de colisión:

$$\begin{aligned} f_i(x_k + \Delta t) = \\ f_i(x_k, t) - \omega \left[f_i(x_k, t) - f_i^{(eq)}(x_i, t) \right] \end{aligned} \quad (15)$$

(ii) Paso de propagación:

$$f_i(x_k + e_i \Delta t, t + \Delta t) = \tilde{f}_i(x_k, t + \Delta t) \quad (16)$$

Donde \tilde{f}_i representa el estado de post-colisión. El paso de colisión es totalmente local y define el cambio en la densidad o el cambio en el número de partículas dentro del elemento de volumen o espacio fase del lattice. El paso de propagación define el movimiento de las partículas dentro del elemento de volumen o espacio fase del dominio. Las ecuaciones 15 y 16 son explícitas y por lo tanto es fácil implementar un algoritmo en paralelo [9].

4. CONDICIONES DE FRONTERA

Como en cualquier método computacional las condiciones de frontera juegan un papel importante y en el método LBE no es la excepción. Algunos investigadores han propuesto diferentes modelos para implementar las condiciones de frontera. Estos dependen del problema que se este abordando [11,12]. En CFD (*Computational Fluid Dynamics*) dos tipos de fronteras son frecuentemente encontradas: fronteras abiertas y paredes sólidas. Las fronteras abiertas incluyen líneas (o planos) de simetría, en las secciones transversales con entrada y salida periódicas. En estas fronteras, la velocidad y la presión son usualmente especificadas en la descripción macroscópica del flujo.

Una dificultad del método LBE en la implementación de las condiciones de contorno es que se deben imponer valores correctos de las funciones de distribución f_i a partir de los valores de las variables macroscópicas. Sólo para condiciones de contorno de simetría y periódicas pueden determinarse los valores de f_i sin problemas. Las condiciones utilizadas para este caso se conocen como; condiciones periódicas para la entrada y salida del flujo, las cuales son utilizadas siempre y cuando en el modelo simulado no existan perturbaciones u objetos que modifiquen el flujo en la vecindad de las mismas. El otro esquema típico utilizado para condiciones defrontera, es el de frontera cellada y fija, conocida comúnmente como *bounce-back*.

El procedimiento para fijar condición de no deslizamiento en la pared consiste en reflejar especularmente las funciones de distribución que viajan hacia la pared. Este esquema es de segundo orden cuando la pared está ubicada en la mitad de dos nodos. Una descripción detallada de este tipo de implementación en pared se puede consultar en el trabajo de Bouzidi *et al* [13].

Diferente a las condiciones de frontera utilizadas en los métodos tradicionales para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes, donde las cantidades microscópicas (velocidad, presión, etc) y sus derivadas pueden ser explícitamente impuestas, en los LBM se requiere que estas estén cambiando de acuerdo a la función de distribución f .

5. CONCLUSIONES

El presente artículo es para los lectores un pequeño acercamiento al método de LBE, para la simulación de problemas que involucran flujos, ya sean de tipo teórico o industrial. Y que quieran iniciar en el mundo de la dinámica de fluidos computacional, con una mirada mesoscópica del sistema.

Los modelos presentados aquí son aplicables a sistemas bi-dimensionales. Para la simulación de sistemas tridimensionales se debería revisar la teoría existente en cuanto al tipo de lattice utilizado y el número de velocidades discretas involucradas.

Para los principiantes en este tema y para conocer aspectos preliminares de la programación de un código que utiliza el método LBE en lenguaje FORTRAN.

REFERENCIAS

- [1]. Frisch U, Hasslacher B, Pomeau Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations. *Phys Rev Lett* **56** 1505–8, 1986.
- [2]. McNamara GR, Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Phys. Rev. Lett.* 61:2332–35, 1988.
- [3]. Quian Y. H., d'Humières D., Lallemand P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhysics Lett* **17** (6), 479-84, 1992.
- [4]. Chen H, Chen S, Matthaeus WH. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. *Phys. Rev. A.* 45:R5339–42, 1992.
- [5]. P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, and M. Krook. A model for collision processes in gases. I Small amplitude processes in charged and neutral one-component system, *Phys. Rev.*, 94 pp. 511-25, 1954.
- [6]. X. He, L-S Luo. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E* **56** (6) 6811-17, 1997.
- [7]. P. Lallemand, L-S Luo. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Phys. Rev. E* **61** (6) 6546-62, 1999.
- [8]. Anderson J. Hypersonic and high temperature gas dynamics. New York: McGraw-Hill Inc., 1989.
- [9]. Dazhi Yu, Renwei Mei, Li-Shi Luo, Wei Shyy. Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation. *Progress in Aerospace Sciences.* Elsevier Science Ltd, 2003.
- [10]. Dieter A. Wolf-Gladrow. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models. Springer, 2000.
- [11]. Skordos P. A., Initial and Boundary Conditions for the lattice Boltzmann method, *Phys. Rev, E* **48** (6), 4823(20), 1993.
- [12]. Zou Q., He X., On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *Phys Fluid* **9** (6), 1997.
- [13]. M. Bouzidi, M. Firadaouss, and P. Lallemand, *Phys. Fluids* 13, 452, 2001.