



# ESTUDO DA CONDIÇÃO DE CONTORNO DE VON NEUMANN COM O MÉTODO DE LATTICE BOLTZMANN EM PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS DE CONDUÇÃO DE CALOR

Ivan Talão Martins, EESC - USP, [ivanmartins@usp.br](mailto:ivanmartins@usp.br)  
Luben Cabezas-Gómez, EESC - USP, [lubencg@sc.usp.br](mailto:lubencg@sc.usp.br)

**Resumo.** Neste trabalho, apresenta-se um estudo dos métodos de implementação da condição de contorno de Von Neumann para o Método de Lattice Boltzmann, considerando-se o esquema wet-node, em que as fronteiras computacionais coincidem com as físicas. Para isso, é tomado como base um problema de condução de calor bidimensional em um sólido, testando-se cada método de implementação da condição de contorno. Em seguida, cada solução numérica obtida para o problema é comparada com a analítica, calculando-se os erros relativos e absolutos médios e comparando-os, visando analisar quais os métodos mais precisos para tal condição. Desse modo, pôde-se evidenciar os métodos de implementação mais precisos a serem utilizados com o método de Lattice Boltzmann para tratar uma condição de contorno derivativa em problemas de transferência de calor.

**Palavras chave:** Método de Lattice Boltzmann. Condições de contorno de Von Neumann. Condução de calor bidimensional.

## 1. INTRODUÇÃO

O Método de lattice Boltzmann (MLB) é um método mesoscópico que surgiu na segunda metade do século XX, com o trabalho de Hardy, de Pazzis e Pomeau (1973), no qual desenvolveram um modelo bidimensional (2D) para descrever o comportamento de gases. A partir desse modelo inicial, o MLB foi sendo desenvolvido ao longo dos anos, sendo aplicado em princípio para prescrever o movimento de fluidos (Hou et al., 1995; Succi, Forti e Higuera, 1989). Entretanto, com o avanço dos estudos dessa metodologia, o MLB vem sendo empregado com mais frequência em simulações de processos fluidodinâmicos e de transferência de calor. Por exemplo, trabalhos recentes como os de Chen, Zhang e Zhang (2014), Krüger et al. (2017) e de Mohamad (2019), simulam processos de transferência de calor tanto em sólidos quanto em fluidos, envolvendo inclusive mudança de fase.

Neste trabalho estuda-se a implementação da condição de contorno (CC) de Von Neumann para problemas bidimensionais de condução de calor no MLB, visando analisar a acurácia proporcionada por cada um deles ao comparar-se suas respectivas soluções com a solução analítica.

## 2. METODOLOGIA

### 2.1 O método de lattice Boltzmann

O MLB baseia-se na equação de transporte de Boltzmann (Eq. (1)), na qual  $\Omega$  representa o termo das colisões,  $f$  a função densidade de probabilidade,  $c$  as velocidades das partículas e  $\frac{F}{\rho}$  a força de campo externa específica (Krüger et al., 2017). A partir dessa equação, desprezando-se as forças externas e considerando-se a aproximação do operador de colisão dada por Bhatnagar, Gross e Krook (1954), pode-se discretizar essa equação no espaço, tempo e nas direções de velocidades, obtendo-se então a Eq. (2). Na mesma,  $\tau$  é o fator de relaxação,  $f_i^{eq}$  a função distribuição de equilíbrio discreta, que representa o estado das partículas quando em equilíbrio,  $c_i$  a velocidade em cada direção discreta  $i$  do lattice,  $\Delta t$  o intervalo discreto de tempo adotado e  $\mathbf{r}$  o vetor da coordenada espacial.

$$\partial_t f + c \cdot \partial_r f + \frac{F}{\rho} \cdot \partial_c f = \Omega \quad (1)$$

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \cdot \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) + \frac{\Delta t}{\tau} \cdot [f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_i(\mathbf{r}, t)] \quad (2)$$

Em se tratando de condução de calor pura, pode-se aplicar a mesma equação discretizada, entretanto, ao invés de lidar-se com as funções de distribuição de densidade  $f_i$ , considera-se então as funções de distribuição de energia (ou temperatura)  $g_i$ . Desse modo, a equação final que rege o MLB pode ser dada pela Eq. (3).



### 3. RESULTADOS

$$g_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \cdot \Delta t, t + \Delta t) = g_i(\mathbf{r}, t) + \frac{\Delta t}{\tau} \cdot [g_i^{eq}(\mathbf{r}, t) - g_i(\mathbf{r}, t)] \quad (3)$$

Assim, considerando-se a difusão de calor, segundo Mohamad (2019) o tempo de relaxação se relaciona com a difusividade térmica do material ( $\alpha$ ) seguindo-se a Eq. (4), na qual  $c_s^2$  é a velocidade do som em unidades de Lattice e depende do esquema de velocidades escolhido. No caso, escolhendo-se o esquema D2Q9 (bidimensional com 9 direções discretas de velocidade), tem-se que  $c_s^2 = \frac{1}{3}$ . Ademais, seguindo-se o mesmo autor, as funções de distribuição de equilíbrio podem ser dadas por:  $g_i^{eq}(\mathbf{r}, t) = w_i \cdot T(\mathbf{r}, t)$ , sendo  $w_i$  pesos que novamente dependem do esquema de velocidades escolhido. Para o caso, tem-se que  $w_0 = 4/9$ ,  $w_{1,2,3,4} = 1/9$  e  $w_{5,6,7,8} = 1/9$  (Guo e Shu, 2013).

$$\alpha = \frac{\Delta x^2 c_s^2}{\Delta t} \cdot \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \quad (4)$$

Após resolução da Eq. (3), as quantidades macroscópicas desejadas (como a temperatura, no caso) podem ser calculadas pelos momentos da função de distribuição. Assim, tem-se que:  $\sum_{i=0}^N g_i = T$ .

#### 2.2 Métodos de implementação da condição de contorno de Von Neumann

Grande parte dos métodos de implementação da CC de Von Neumann visam transformar essa CC em uma de Dirichlet, para facilitar a sua implementação. Assim, as aproximações para a temperatura no contorno podem-se realizar em diferentes maneiras, sendo a maioria baseada na discretização da lei da condução de Fourier:  $q = -k \frac{\partial T}{\partial x}$ , sendo  $k$  a condutividade térmica do material e  $q$  o fluxo de calor (Zhang et al., 2012).

- **Diferenças finitas (primeira ordem):** Considerando-se uma discretização por diferenças finitas de primeira ordem da lei de Fourier, tem-se a relação:

$$T_w = T_{w+1} + \frac{q \Delta x}{k} \quad (5)$$

sendo  $T_w$  a temperatura da parede, e  $T_{w+1}$  o valores de temperatura no lattice próximo ao que se encontra na parede, em sua direção normal (apontando para o interior do domínio).

- **Diferenças finitas (segunda ordem):** Considerando uma discretização por diferenças finitas de segunda ordem deslocada, tem-se:

$$T_w = \frac{1}{3} \cdot \left( 4T_{w+1} + \frac{2 \cdot q \cdot \Delta x}{k} - T_{w+2} \right) \quad (6)$$

sendo também  $T_{w+2}$  o lattice próximo ao  $T_{w+1}$  na direção normal.

- **Volumes finitos:** Já no caso de uma discretização por volumes finitos (VF), a mesma baseia-se na integração da equação da conservação da energia, discretizando-a logo em seguida para obter-se  $T_w$ , segundo Chatterjee e Chakraborty (2008), Huo e Rao (2015) e Mondal e Mishra (2009), o que resulta em:

$$T_w^{n+1} = \left( 1 - \frac{a_{w+1}}{a_w} \right) \cdot T_w^n + \frac{a_{w+1}}{a_w} \cdot T_{w+1}^n + \frac{q}{a_w} \quad (7)$$

Nesta relação,  $\rho$  é a densidade,  $C_p$  o calor específico,  $n$  o nível temporal,  $a_w = \frac{\rho \cdot C_p \cdot \Delta y}{2 \Delta t}$  e  $a_{w+1} = \frac{k}{\Delta y}$ .

### 3. RESULTADOS

O exemplo estudado trata de um problema de condução bidimensional (2D) em uma placa de silício, que pode ser representado pela Eq. (8), sendo  $T_p = 20^\circ C$ ,  $a = 0,5m$ ,  $b = 0,3m$  e  $q = 1000W/m^2$ . Além disso, a condutividade térmica do sólido foi tomada a uma temperatura de filme de  $T_f = 39,5^\circ C$ , encontrando-se  $k = 141,795W/mK$ . A solução analítica para o problema estudado pode ser dada pela Eq. (9), definindo-se  $\lambda_n = \frac{(1+2n)\pi}{2a}$ .

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0, & \text{para } 0 < x < a \text{ e } 0 < y < b; \\ T(x, y) = T_p, & \text{para } x = 0; \\ \frac{\partial T}{\partial x} = 0, & \text{para } x = a; \\ \frac{\partial T}{\partial y} = 0, & \text{para } y = 0; \\ q'' = k \frac{\partial T}{\partial y}, & \text{para } y = b; \end{cases} \quad (8)$$

$$T(x, y) = T_p + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2 \cdot q \cdot \sin(\lambda_n \cdot x) \cdot \cosh(\lambda_n \cdot y)}{k \cdot \lambda_n^2 \cdot \sinh(\lambda_n \cdot b) \cdot a} \quad (9)$$

Assim, os resultados obtidos com a solução analítica podem ser representados pela Fig. (1) e pela Fig. (2), nas quais é possível visualizar o perfil de temperaturas formado e as respectivas isotermas no domínio.

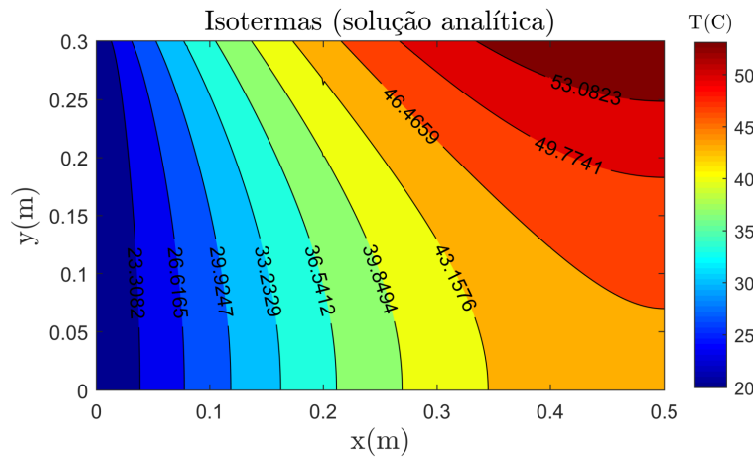


Figura 1: Isotermas dadas pela solução analítica do problema.

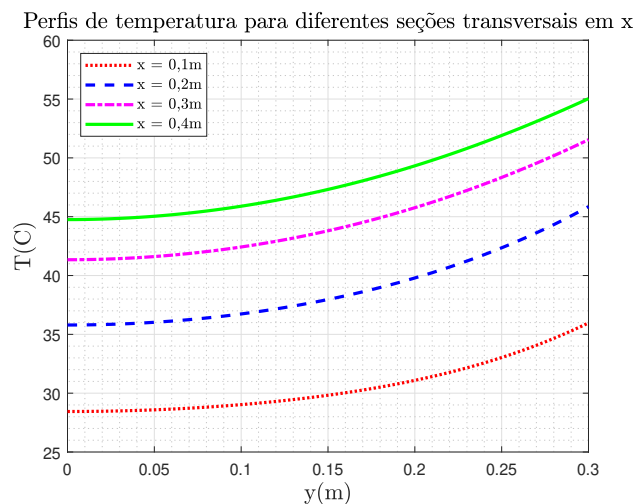


Figura 2: Perfis de temperatura em y para várias seções transversais em x, dadas pela solução analítica.

Várias simulações foram realizadas, alterando-se as discretizações temporais e espaciais ( $\Delta t$  e  $\Delta x$ ), mas mantendo-se  $\tau$  constante, visando estudar a interferência das CC na ordem do método. Em seguida, calculou-se os erros relativos globais (Eq. (10)) e médios absolutos (Eq. (11)) para cada CC em comparação com a solução analítica do problema. Os resultados obtidos podem ser verificados na Fig. (3). Percebe-se, que a discretização por diferenças finitas de primeira ordem apresenta os menores erros relativos e absolutos. Isso ocorre apesar de ser um esquema de primeira ordem. As



### 3. RESULTADOS

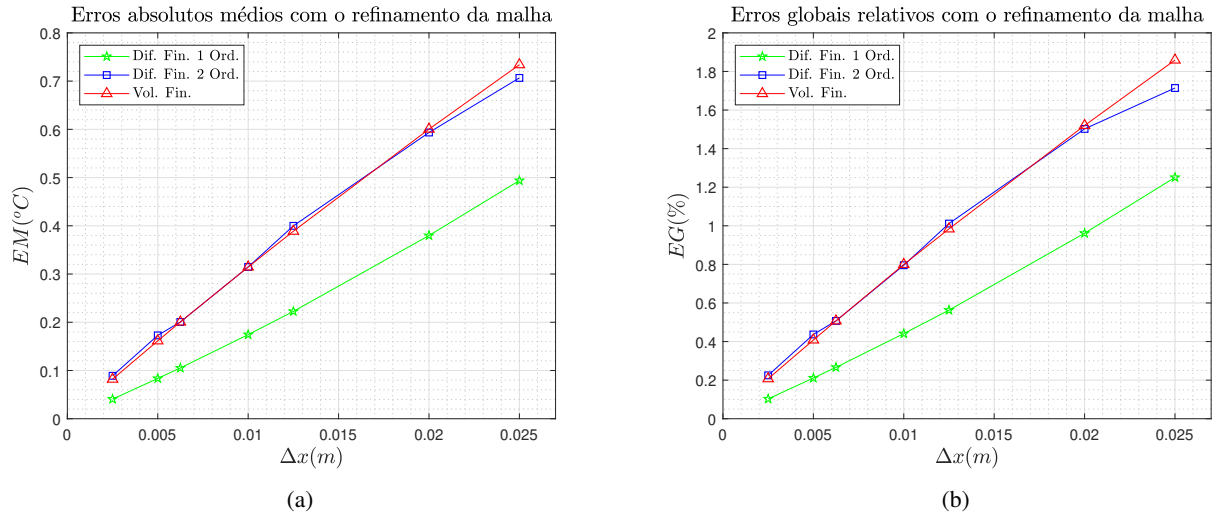


Figura 3: Erros médios absolutos (a) e globais relativos (b) observados para cada um dos métodos de implementação de CC, com a variação do  $\Delta x$  e do  $\Delta t$ , mantendo  $\tau$  constante.

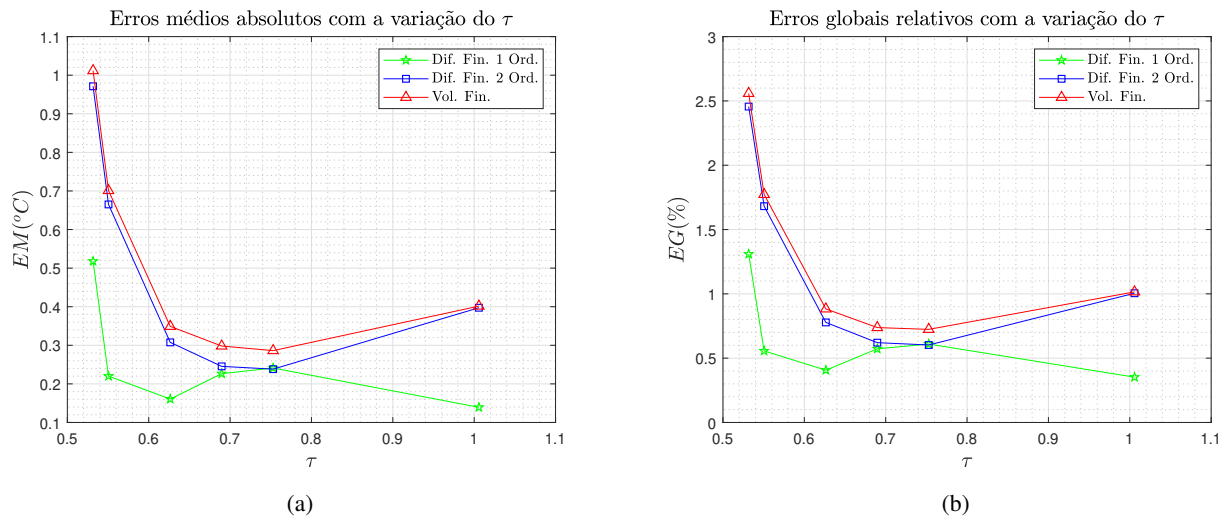


Figura 4: Erros médios absolutos (a) e globais relativos (b) observados para cada um dos métodos de implementação de CC, com a variação do  $\tau$ , mantendo-se constante  $\Delta x = 0,01m$ .

outras duas discretizações consideradas mostram uma variação dos erros própria de esquemas de primeira ordem, apesar de serem discretizações de segunda ordem.

Outrossim, também analisou-se a influência do valor do tempo de relaxação  $\tau$  na precisão dos resultados simulados, comparando-os também com a solução analítica. Na Fig. (4) percebe-se que, conforme  $\tau$  se aproxima de 0,5, os erros tendem a aumentar e o método tende a ficar instável. Similarmente, conforme o tempo de relaxação se aproxima de 1,0, o método perde precisão aos poucos, comportamento característico do MLB como comentado por Krüger et al. (2017). Entretanto, percebe-se que a condição de contorno de aproximação por diferenças finitas de 1ª ordem foi a menos suscetível a essas instabilidades e imprecisões devido ao fator  $\tau$ , apesar de ainda apresentá-las.

$$EG(\%) = 100 \cdot \frac{\sum_{i=1}^N |T_{analitica} - T_{MLB}|}{\sum_{i=1}^N |T_{analitica}|} \quad (10)$$

$$EM(^{\circ}C) = \frac{\sum_{i=1}^N |T_{analitica} - T_{MLB}|}{N} \quad (11)$$

#### 4. CONCLUSÕES E DISCUSSÕES

Os resultados obtidos dos erros médios e relativos permitem concluir que os 3 métodos analisados se comportam como esquemas de primeira ordem. Isso acontece mesmo que as aproximações por DF de 2ª ordem e por VF sejam discretizações de segunda ordem em relação a  $\Delta x$ . Outrossim, pode-se perceber que o método por DF de 2ª ordem provocou o surgimento de um pequeno caráter quadrático na curva dos erros. Entretanto, esse caráter quadrático não é tão expressivo, indicando que há outra fonte de erro maior, que mantém uma relação de primeira ordem entre o erro e o  $\Delta x$ , quando se mantém o  $\tau$  constante.

Quanto à influência do tempo de relaxação na precisão das respostas, um  $\tau$  muito próximo de 0,5 deprecia os resultados devido a instabilidades, assim como um  $\tau$  muito próximo ou superior a 1 pode provocar certa perda de precisão. Entretanto, dentre os tipos de implementação de condições de contorno estudadas, a discretização por diferenças finitas de primeira ordem foi a que apresentou-se menos susceptível a esses efeitos, apesar de ainda contemplá-los.

Os resultados com menores erros foram observados para a aproximação por diferenças finitas de primeira ordem. Uma razão para esse comportamento pode ser como os contornos físicos e computacional se relacionam. No presente trabalho se emprega a discretização *wet-node*, no qual o contorno computacional coincide com o contorno físico.

#### 5. REFERÊNCIAS

Bhatnagar PL, Gross EP e Krook M. A model for collision processes in gases I: small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*. 1954: 94511-94525.

Chatterjee D e Chakraborty S. An enthalpy-source based lattice boltzmann model for conduction dominated phase change of pure substances. *International Journal of Thermal Sciences*. 2008(47):552–559. doi:10.1016/j.ijthermalsci.2007.06.004.

Chen Q, Zhang X e Zhang J. Numerical Simulation of Neumann Boundary Condition in the Thermal Lattice Boltzmann Model. *International Journal of Modern Physics C*. 2014 (25):1450027. doi:10.1142/S0129183114500272.

Guo Z e Shu C. *Lattice Boltzmann Method and its application in engineering*. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2013.

Hardy J, de Pazzis O e Pomeau Y. Time evolution of a two-dimensional classical lattice system. *Physical Review Letters*. 1973(31):276–279. doi:10.1103/PhysRevLett.31.276.

Hou S, Zou Q, Chen S, Doolen G e Cogley AC 1995. Simulation of cavity flow by the Lattice Boltzmann method. *Journal of Computational Physics*. 1995(118:2):329-347.

Huo Y e Rao Z. Lattice boltzmann simulation for solid–liquid phase change phenomenon of phase change material under constant heat flux. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2015(86):197–206. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.03.006.

Jiaung WS, Ho J-R e Kuo C-P. Lattice Boltzmann Method for the Heat Conduction Problem with Phase Change. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals: An International Journal of Computation and Methodology*. 2001(39:2):167-187. doi:10.5540/03.2013.001.01.0177.

Krüger T, Kusumaatmaja H, Kuzmin A, Shardt O, Silva G e Viggen EM. *Lattice Boltzmann Method - Principles and Practice*, 2a. edição. Cham: Springer, 2017.

Mohamad AA. *Lattice Boltzmann Method - Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*, 2a. edição. Londres: Springer, 2019.

Mondal B. e Mishra SC. The lattice boltzmann method and the finite volume method applied to conduction–radiation problems with heat flux boundary conditions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2009(78:2):172–195. doi: 10.1002/nme.2482.

Succi S, Foti E e Higuera F. Three dimensional flows in complex geometries with the lattice Boltzmann method. *Europhysics Letters*. 1989: 10433-10438.



## 7. RESPONSABILIDADE PELAS INFORMAÇÕES

Zhang T, Shi B, Guo Z, Chai Z e Lu J. General bounce-back scheme for concentration boundary condition in the lattice-boltzmann method. *Physical Review*. 2012(85:2):016701.doi: 10.1103/PhysRevE.85.016701.

## 6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o auxílio financeiro concedido pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), processo 2019/21022-9.

## 7. RESPONSABILIDADE PELAS INFORMAÇÕES

Os autores são os únicos responsáveis pelas informações incluídas neste trabalho.