

Diss. ETH No 15534

## Minimal Kinetic Modeling of Hydrodynamics

A dissertation submitted to the  
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

for the degree of  
Doctor of Technical Sciences

presented by  
Santosh Ansumali  
Master of Science - Chemical Engineering  
Indian Institute of Science, Bangalore (India)

born February 27, 1977  
citizen of India

Accepted on the recommendation of  
Prof. H. C. Öttinger, examiner  
Dr. Iliya V. Karlin, co-examiner  
Prof. S. Succi, co-examiner  
2004

# Summary

Sub-sonic flows in continuum to near continuum regime constitute a major portion of the applied fluid mechanics. Two important examples of such flows are incompressible fluid turbulence and flow through micro-devices. The computational fluid dynamics has not yet realized its full potential for turbulence or flow through micro-devices. While in the case of micro-flows it is the failure of continuum field description by the Navier-Stokes-Fourier equations, for turbulence the difficulty lies in the inability to reduce the description in terms of a few discrete modes.

Simulation algorithms based on kinetic theory are well suited to describe the flow in near-continuum as well as continuum regime. Traditionally, two distinct classes of kinetic algorithms are available to perform such simulations. The first class of kinetic simulation algorithms attempts to keep the details of molecular interactions intact and is used to perform purely molecular simulation of the flow. This class of model is computationally too expensive to be used in a realistic simulation in continuum or near continuum sub-sonic regime. The second class of model known as the lattice Boltzmann method tries to construct a bottom-up approach where an extremely simplified kinetic theory is built from the macroscopic equation of motion. This approach is now a well established method for computational fluid dynamics primarily due to a simple and efficient discretization scheme. However, such an approach has worked till now, with a reasonable degree of success, for incompressible continuum hydrodynamics only.

In this thesis an alternate view-point, on the minimal kinetic modeling such as the lattice Boltzmann method is presented. Such models are viewed as an efficient temporal integration scheme for model kinetic equations. A class of minimal kinetic models is developed to simulate the

sub-sonic hydrodynamics in continuum to near-continuum regime. The hydrodynamic limit for these models is established and a nonlinearly stable extension of the lattice Boltzmann method is proposed to solve these kinetic models in the continuum and near continuum regime.

A closed form sub-grid model for hydrodynamics was obtained using the minimal kinetic model. This is the first result which shows the clear advantage of using kinetic models for the construction of coarse-grained hydrodynamic models. The derived sub-grid model and simulation results show that kinetic theory provides a promising alternative approach to the modeling of turbulence.

For micro-flows, it is shown that the minimal kinetic models can be used as a reliable simulation tool for the one component gaseous flows. Thus the present minimal kinetic model enlarge the domain of applicability of kinetic solvers of fluid dynamics.

# Zusammenfassung

Unterschallströmungen im Kontinuum zum Nahkontinuum stellen einen bedeutenden Teilaspekt der angewandten Strömungsmechanik dar. Zwei wichtige Beispiele solcher Strömungsformen sind Turbulenzströmungen inkompressibler Flüssigkeiten und der Fluss durch Mikro-Geometrien. Das Potential der rechnergestützten Strömungsmechanik wurde bezüglich dieser Strömungsformen noch nicht vollständig ausgeschöpft. Während die kontinuumsmechanische Beschreibung durch die Navier-Stokes-Fourier Gleichungen für Mikroströmungen versagt, ist bei Turbulenzen eine auf diskrete Zustände reduzierte Beschreibung nicht möglich.

Simulations Algorithmen basierend auf der kinetischen Theorie sind sehr gut geeignet für die Beschreibung von Strömungen im Kontinuum und im Nahkontinuum. Traditionell sind zwei Kategorien kinetischer Algorithmen für solche Simulationen zu unterscheiden. Die erste Klasse dieser Simulations Algorithmen stützt sich auf die detaillierte Beschreibung der Vorgänge auf molekularer Ebene. Diese Algorithmen werden lediglich für molekulare Simulationen verwendet. Für die numerische Behandlung praktischer Anwendungen im Kontinuum oder im Nahkontinuum im Unterschallbereich sind diese Modelle rechentechnisch zu aufwendig. Die zweite Kategorie der Modelle, die als Lattice Boltzmann Methode bekannt ist, stellt einen "bottom up" Ansatz dar. Von der Kontinuumsmechanik ausgehend wird eine stark vereinfachte kinetische Theorie abgeleitet. Aufgrund eines einfachen und effizienten Diskretisierungsschemas ist die Lattice Boltzmann Methode mittlerweile ein gängiges Verfahren der rechnergestützten Strömungsmechanik. Eine erfolgreiche Anwendung gelang jedoch bis jetzt nur innerhalb der Kontinuumshydrodynamik inkompressibler Flüssigkeiten.

In dieser Arbeit wird ein alternativer Ansatz des minimalen kinetischen Modellierens, wie dies die Lattice Boltzmann Methode darstellt,

vorgestellt. Diese Modelle werden als ein leistungsfähiges zeitliches Integrationsschema für die minimale kinetische Theorie betrachtet. Eine Reihe von minimalen kinetischen Modellen wird entwickelt, um die Unterschallhydrodynamik im Kontinuum zum Nahkontinuum zu simulieren. Die hydrodynamische Grenze dieser Modelle wurde festgestellt und eine nicht-lineare stabile Erweiterung der Lattice Boltzmann Methode wurde für das Lösen dieser kinetischen Modelle im Kontinuum und im Nahkontinuum vorgeschlagen.

Durch die Verwendung des minimalen kinetischen Modells wurde ein geschlossenes sub-grid Modell für die Hydrodynamik erhalten. Dadurch wurde der wesentliche Vorteil in der Verwendung von kinetischen Modellen für den Aufbau von grob-körnigen hydrodynamischen Modellen gezeigt. Das abgeleitete sub-grid Modell und die Ergebnisse der Simulation verdeutlichen, dass die kinetische Theorie eine vielversprechende Alternative zum Modellieren von Turbulenzen darstellt.

Wie für Mikroströmungen gezeigt wurde, sind die minimalen kinetischen Modelle eine zuverlässige Methode für die Simulation der Strömung von Einkomponenten-Gasen. Auf diese Weise erweitert das vorliegende minimale kinetische Modell das Anwendungsgebiet der kinetischen Lösungsverfahren innerhalb der Strömungsmechanik.