

DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DE MÉTODOS BASADOS EN EL MODELO DE LATTICE BOLTZMANN PARA APLICACIONES EN MECÁNICA DE FLUIDOS

por
Juan Pablo Giovacchini

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física como parte de los
requerimientos para la obtención del grado de Doctor en Física de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Abril de 2018

Directores:

Dr. Omar E. Ortiz
Dr. Carlos G. Sacco



Desarrollo e implementación de métodos basados en el modelo de lattice Boltzmann para aplicaciones en mecánica de fluidos por Juan Pablo Giovacchini se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-CompartirIgual 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/).

Resumen

En esta tesis se presenta un resumen de los trabajos realizados en el marco del doctorado en física con el tema propuesto. Se introduce y utiliza el método de lattice Boltzmann (LBM) con modelo de colisiones de múltiples tiempos de relajación, consistentes con las ecuaciones compresibles de Navier-Stokes isotérmicas a bajos números de Mach. Se implementa y analizan una variedad de métodos para imponer condiciones de borde en fronteras de geometría regular y arbitraria. Como aporte al LBM se propone un método alternativo, basado en fundamentos elementales de la mecánica, para mostrar la validez de los métodos clásicos de momentum exchange y otras propuestas ad-hoc utilizadas en la evaluación de fuerzas en el LBM. Se realiza una serie de pruebas numéricas donde se puede verificar la validez de la propuesta y la necesidad de utilizar métodos particulares para evaluar fuerzas sobre cuerpos en movimiento [1]. Se desarrolla e implementa un algoritmo basado en LBM para analizar problemas de mecánica de fluidos. Se resuelven problemas típicos de verificación, bidimensionales y tridimensionales isotérmicos a bajos números de Mach y Reynolds. Se analizan problemas con movimiento de fronteras arbitrarias y se implementan refinamiento y movimientos de grilla.

En relación a aplicaciones concretas del LBM, se estudian dos problemas particulares de interés en física. En uno de ellos se estudia la sedimentación de pequeños cristales de hielo en la atmósfera. Un problema de interacción cuerpo rígido - fluido a bajos números de Mach y Reynolds. Se analizan cristales con geometría tipo columnas de sección hexagonal, evaluando su velocidad de sedimentación para una variedad de tamaños y relaciones de aspecto que lo definen. Los resultados numéricos son satisfactorios y comparables con datos experimentales y modelos teóricos disponibles en la literatura [2]. Otro de los problemas que se analiza, es la determinación del campo de velocidad de un fluido contenido en una cavidad con fronteras en movimiento prescrito. Se analiza una serie de geometrías con movimiento, siendo de especial interés evaluar el campo de velocidad en régimen transitorio. El objetivo de estas simulaciones es servir de referencia para mediciones experimentales utilizando un método propuesto en [3] basado en resonancia magnética nuclear (RMN). Este método permite relevar, de manera no invasiva, el campo de velocidad en intervalos de tiempo pequeños.

A mi familia.

Índice general

Resumen	III
Contenido	VII
Nomenclatura	XIII
1. Introducción	1
1.1. Configuraciones típicas de problemas que se analizan	3
1.2. Contenido y sinopsis de este trabajo	5
Capítulo 2 - Métodos de lattice Boltzmann.	5
Capítulo 3 - Condiciones de Borde en el LBM.	6
Capítulo 4 - Evaluación de fuerzas en el LBM.	6
Capítulo 5 - Refinamiento de grilla en el LBM.	6
Capítulo 6 - Simulación y análisis numérico de la sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera.	7
Capítulo 7 - Determinación del campo de velocidad inestacionario de un fluido.	7
Apéndice A - La ecuación de Boltzmann	7
Apéndice B - Análisis multi-escala de la LBE.	8
Apéndice C - Detalles varios del LBM y su implementación en $\{LBM\}$	8
Apéndice D - Problemas adicionales de verificación del algoritmo $\{LBM\}$	8
Apéndice E - Algunos detalles sobre el tratamiento de geometrías arbitrarias.	8
1.3. Aportes y publicaciones científicas	8
1.4. Sobre la notación utilizada	10
2. Métodos de lattice Boltzmann	13
2.1. Discretización de la ecuación de Boltzmann	
LBM-BGK.	13
2.1.1. Discretización temporal y en el espacio de fases	14
Espaciamento de grilla δx y paso temporal δt	18
2.1.1.1. Algunas restricciones del modelo LBM-BGK	18
2.1.1.2. Implementación	19
2.2. Ecuación generalizada de lattice Boltzmann	
LBM-MRT.	19
2.2.1. LBM-MRT esquema de velocidad D2Q9	21

Elección de parámetros de relajación	22
2.2.1.1. Implementación	23
2.3. Esquemas LBM cuasi—incompresible	23
2.3.1. LBM-BGK	24
2.3.2. LBM-MRT	24
2.4. Precisión espacial y temporal	25
2.5. Consistencia del LBM con las ecuaciones de NS	26
2.6. Comentarios y conclusiones	27
3. Condiciones de borde	29
3.1. Definición del problema en la frontera	30
3.2. Condiciones de borde Dirichlet en fronteras de geometría regular	31
3.2.1. Condiciones de borde bounce-back estándar.	31
Implementación:	32
Precisión:	32
3.2.2. Condición de borde de simetría, fronteras con deslizamiento	33
Implementación:	33
3.2.3. Condiciones de borde de presión y velocidad - generalización en fronteras de geometría regular	33
3.2.3.1. Superficies planas	34
Frontera de velocidad:	34
Frontera de presión:	34
3.2.3.2. Bordos y esquinas convexas - unión de superficies planas	35
3.2.3.3. Implementación y precisión	36
Implementación:	36
Precisión:	36
3.3. Condiciones de borde en fronteras de geometría arbitraria no regular	36
3.3.1. Parámetros geométricos y conjuntos de nodos de interés	37
3.3.2. Condiciones de borde de FH-MSL	37
Implementación:	38
Precisión:	38
3.3.3. Condiciones de borde BFL	38
Implementación:	39
Precisión:	39
3.3.4. Condiciones de borde Interpolación de Yu	39
Implementación:	40
Precisión:	40
3.3.5. Condiciones de borde Extrapolación de Guo-Zheng-Shi	40
Implementación:	41
Precisión:	41
3.4. Tratamiento de cuerpos en movimiento	42
3.5. Fronteras abiertas con condición de salida - condición de borde convectiva	42
3.5.1. CBC en fronteras regulares coincidentes con la grilla	43
3.6. Problema de verificación	44
4. Evaluación de fuerzas	49
4.1. Método de momentum exchange	50

4.1.1.	Teorema de transporte de Reynolds	51
4.1.2.	Fuerza	52
4.1.3.	Fuerza sobre cuerpos estáticos	52
4.1.4.	Fuerza sobre cuerpos en movimiento	54
4.1.4.1.	Fuerza sobre cuerpos en movimiento: método 1	55
4.1.4.2.	Fuerza sobre cuerpos en movimiento: método 2	56
4.1.5.	Torque	58
4.1.6.	Torque sobre cuerpos estáticos	58
4.1.7.	Torque sobre cuerpos en movimiento	59
4.1.7.1.	Torque sobre cuerpos en movimiento: método 1	59
4.1.7.2.	Torque sobre cuerpos en movimiento: método 2	60
4.2.	Problemas de verificación	61
4.2.1.	Sedimentación de un disco circular	62
4.2.2.	Sedimentación de un disco elíptico	63
4.3.	Comentarios y conclusiones	64
5.	Refinamiento de grilla	75
5.1.	Método de refinamiento multi-dominio - MD	77
5.1.1.	Evolución temporal	80
5.1.1.1.	Algoritmo de evolución para n_{gs} niveles de refinamiento.	82
5.2.	Acoplamiento entre niveles de refinamiento	83
5.2.1.	Requerimiento sobre cantidades macroscópicas	83
5.2.2.	Requerimiento sobre coeficientes de viscosidad ν y ν_B	84
5.2.3.	Determinación de \mathbf{f}^{neq} y \mathbf{m}^{neq}	84
5.2.3.1.	LBM-SRT	85
5.2.3.2.	LBM-MRT	85
5.2.4.	Acoplamiento entre grillas desde $g_s = i + 1$ a $g_s = i$	87
5.2.5.	Acoplamiento entre grillas desde $g_s = i$ a $g_s = i + 1$	88
5.2.6.	Interpolación temporal y espacial	89
	Interpolación temporal	89
	Interpolación espacial	89
5.3.	Movimiento de grillas	89
5.4.	Problemas de verificación	91
5.4.1.	Problema de Poiseuille 3D	91
5.4.1.1.	Test de convergencia	92
5.4.1.2.	Arreglo alternativo de grillas de refinamiento	93
5.4.2.	Sedimentación de una esfera dentro de un ducto de sección cuadrada	94
5.5.	Comentarios y conclusiones	99
6.	Simulación y análisis numérico de la sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera	101
6.1.	Sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera	101
6.2.	Sedimentación de cristales de hielo tipo columna	103
6.2.1.	Resultados y discusiones	104
6.2.2.	Detalles de la implementación	110
6.3.	Verificación de convergencia de grilla	113
6.4.	Resultados obtenidos del LBM	114

6.5. Conclusiones y comentarios	114
7. Determinación del campo de velocidad inestacionario en un problema de flujo interno	117
7.1. Descripción del problema	118
7.2. Problemas de verificación	119
7.2.1. Detalles generales de la implementación numérica	120
7.2.2. Verificación de convergencia al régimen estacionario	121
7.2.3. Verificación con soluciones 1D	122
7.2.4. Simulación de modelos de celdas electroquímicas	123
Detalles particulares de la implementación numérica	125
7.3. Comparación de resultados LBM vs RMN	125
Generalidades sobre las mediciones experimentales	126
7.3.1. Resultados de la configuración 1	127
7.3.2. Resultados de la configuración 2	131
7.3.3. Evolución de la velocidad máxima	131
7.4. Comentarios y conclusiones	133
A. La ecuación de Boltzmann	135
A.1. Generalidades sobre Mecánica Estadística - Descripción microscópica	135
A.1.1. La ecuación de Liouville	136
A.2. La ecuación de Boltzmann	137
A.2.1. Obtención de la ecuación de Boltzmann desde la ecuación de Liouville	137
A.2.2. Función distribución de Maxwell-Boltzmann	141
A.3. Conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de la dinámica del fluido.	141
A.3.1. Ecuaciones de conservación.	143
Conservación de la masa:	144
Conservación de cantidad de movimiento:	144
Conservación de la energía:	144
B. Análisis multi-escala de la LBE	147
B.1. Definición de parámetros, escalas temporales y espaciales.	147
B.1.1. Diferentes escalas en la ecuación de lattice Boltzmann.	148
B.1.2. Algunas propiedades de simetría del LBM.	150
B.2. Ecuaciones de Navier-Stokes desde LBM-BGK	150
Momento de orden cero sobre (B.13)	150
Momento de orden cero sobre (B.14)	150
Momento de primer orden sobre (B.13)	151
Momento de primer orden sobre (B.14)	151
B.2.1. Conservación macroscópica de la masa	151
B.2.2. Conservación macroscópica de cantidad de movimiento	151
B.3. Ecuaciones de Navier-Stokes desde LBM-MRT	154
B.3.1. Conservación macroscópica de la masa	155
B.3.2. Conservación macroscópica de cantidad de movimiento	155
C. Detalles varios del LBM y su implementación en $\{LBM\}$	159

C.1. Esquemas de velocidad utilizados en $\{LBM\}$	159
C.2. LBM-MRT esquema de velocidad D3Q15	161
C.3. LBM-MRT esquema de velocidad D3Q19	164
C.4. Detalles sobre condiciones de borde Dirichlet de presión y velocidad en fronteras de geometría regular	168
C.4.1. Fronteras superficies planas	169
C.4.1.1. Frontera de velocidad	170
C.4.1.2. Frontera de presión	171
C.4.2. Frontera bordes convexos - unión de dos superficies planas	171
Condiciones de borde velocidad-velocidad en bordes convexos	172
C.4.3. Frontera esquinas convexas - unión de tres superficies planas	173
Condiciones de borde de velocidad	173
C.4.4. Comparación con el método de Zou et al. [46]	174
C.5. Numeración de superficies, bordes y esquinas del dominio en $\{LBM\}$	175
Vectores normales en superficies:	175
Vectores normales en bordes convexos:	176
Vectores normales en esquinas convexas:	176
D. Problemas adicionales de verificación del algoritmo $\{LBM\}$	177
D.1. Problema de Poiseuille 2D - 3 niveles de refinamiento	177
D.2. Rotación de una elipse y un elipsoide en un flujo de Couette	178
Ecuaciones de movimiento.	180
D.2.1. Rotación de una elipse en un flujo de Couette	180
D.2.2. Rotación de un elipsoide en un flujo de Couette	181
E. Algunos detalles sobre el tratamiento de geometrías arbitrarias	183
E.1. Tratamiento de fronteras de geometría arbitraria no coincidentes con la grilla	183
E.1.1. Determinación de puntos de intersección	184
E.1.1.1. Intersección entre dos segmentos de rectas	184
E.1.1.2. Intersección entre un segmento de recta y una superficie triangular	185
E.1.1.3. Criterio de búsqueda	186
E.2. Determinación del conjunto de nodos \mathcal{N}_b y \mathcal{N}_s	187
E.2.1. Problemas 2D - curvas cerradas	188
E.2.2. Problemas 3D - curvas cerradas	189
Bibliografía	191

Nomenclatura

Siglas y abreviaturas

BBGKY : Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood, y Yvon. , véase la ecuación (A.4)

BE: Ecuación de Boltzmann

BFL : Condiciones de borde Bouzidi-Firdaouss-Lallemand, [53].

BGL : Boltzmann gas limit.

CFD: Computational Fluid Dynamic.

ChE: Chapman-Enskog.

FDM: Método de diferencias finitas.

FEM: Método de elementos finitos.

FH-MSL : Condiciones de borde Filippova-Hänel-Mei-Shyy-Luo, [51, 52].

FVM: Método de volúmenes finitos.

LBE: Ecuación de lattice Boltzmann

LBM-BGK: Método de lattice Boltzmann con modelo de colisiones BGK.

LBM-MRT: Método de lattice Boltzmann con modelo de colisiones de múltiples tiempos de relajación.

LBM-SRT: ídem LBM-BGK.

LGCA: Lattice Gas Cellular Automata

MD: Método de refinamiento multi-dominio.

ME: Método de momentum exchange para evaluar fuerzas.

MG: Método de refinamiento multi-grilla.

NS: Navier-Stokes, ecuaciones.

RMN : Resonancia magnética nuclear.

SI: Método de integración de tensiones para evaluar fuerzas.

Símbolos

\bar{i} : Dirección opuesta a una velocidad discreta con índice $i \in \mathcal{N}_q$.

\mathcal{T} Tensor de tensiones.

\mathbf{c} : Conjunto de velocidades discretas del modelo LBM.

\mathbf{w} : Pesos de la cuadratura utiliza en el LBM.

ξ : Velocidad de la partícula.

ξ_r : Velocidad de la partícula relativa a la macroscópica, *peculiar velocity*.

$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$: Hamiltoniano del sistema de partículas.

\mathcal{C} : Matriz de colisiones del LBM.

\mathcal{N}_b : Conjunto de *nodos de borde*, ver figura 3.1 y referencias en la sección 3.1.

\mathcal{N}_c : Conjunto de q velocidades discretas.

\mathcal{N}_F : Conjunto de nodos en la región del fluido, *nodos fluido*, ver figura 3.1 y referencias en la sección 3.1.

\mathcal{N}_f : Subconjunto de *nodos fluido* \mathcal{N}_F que no pertenecen a \mathcal{N}_b , ver figura 3.1 y referencias en la sección 3.1.

\mathcal{N}_q : Conjunto de índices que identifican las q velocidades discretas.

\mathcal{N}_s : Conjunto de *nodos sólidos*, ver figura 3.1 y referencias en la sección 3.1.

δt : Paso temporal.

δx : Distancia mínima entre dos nodos primeros vecinos en la grilla.

γ : Relación de calor específico.

Γ : Espacio cerrado, dominio fluido.

\mathcal{G}_i : Conjunto de nodos ganados en el desplazamiento de un sistema de partículas de t a $t + \delta t$.

$\mathbf{k} = (\mathbf{x}, \mathbf{p})$: Punto en el espacio de fases con posición \mathbf{x} y cantidad de movimiento \mathbf{p} .

κ Coeficiente de conductividad térmica.

λ : Segundo coeficiente de viscosidad.

\mathcal{L}_i : Conjunto de nodos perdidos en el desplazamiento de un sistema de partículas de t a $t + \delta t$.

- M** : Arreglo de autovectores de la matriz de colisiones \mathcal{C} .
- m** = $\mathbf{m}(\mathbf{x}_A, t)$: Vector de momentos del LBM-MRT.
- m**^{eq} = $\mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}_A, t)$: Vector de momentos de equilibrio del LBM-MRT.
- Ma : Número de Mach.
- \mathcal{G} : Fuerza externa por unidad de masa actuando sobre las partícula.
- $\mathcal{Q}(f, f)$: Integral u operador de colisiones de la ecuación de Boltzmann
- \mathcal{V} : Espacio de las velocidades
- $\mathfrak{C}(f)$: Modelo de colisiones.
- q** : Flujo de calor.
- μ : Viscosidad dinámica o primer coeficiente de viscosidad.
- μ_B : Coeficiente de viscosidad volumétrica (o bulk viscosity).
- ν : Viscosidad cinemática.
- Ω : Espacio cerrado que ocupa un cuerpo inmerso en un dominio fluido.
- ω_γ : Pesos de la cuadratura de la LBE.
- p** : Cantidad de movimiento de una partícula en el espacio d dimensional.
- $\partial\Omega$: Bordes del espacio cerrado Ω que ocupa un cuerpo inmerso en un dominio fluido.
- Re : Número de Reynolds.
- $\rho(\mathbf{x}, t)$: Densidad de masa del fluido.
- σ : Parámetro que caracteriza el alcance de la fuerza interpartículas.
- S** : Matriz diagonal de parámetros de relajación.
- τ : Tiempo de relajación característico.
- u**(\mathbf{x}, t) : Velocidad macroscópica del fluido.
- P** _{i,t} (t') : Cantidad de movimiento a tiempo t' del sistema de partículas asociado a $\mathcal{P}_{i,t}(t')$.
- F** _{f} : Fuerza del flujo de fluido sobre un frontera arbitraria.
- F** _{i} : Fuerza actuante sobre la i -ésima partícula.
- H** _{i,t} (t') : Cantidad de movimiento angular del sistema de partículas a tiempo t' con respecto a un punto fijo \mathbf{x}_0 .
- T** _{f} : Torque del flujo de fluido sobre una frontera arbitraria.

- \mathbf{x} : Posición de un partícula en el espacio d dimensional.
- a_r : Relación de aspecto de los cristales de hielo tipo columna hexagonal.
- c : Velocidad de grilla.
- d : Dimensión espacial del problema.
- $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$: Función distribución de densidad en el espacio de fases (\mathbf{x}, \mathbf{p}) de una partícula (densidad de masa esperada).
- f_γ^{eq} : Función distribución de equilibrio discretizada.
- f^{neq} : Función distribución de no equilibrio.
- f_M : Función distribución de Maxwell-Boltzmann.
- g_s : Nivel de refinamiento, indica el tamaño de grilla en una lista indexada.
- I_j^+ : Conjuntos de índices de velocidad con componente positiva en la dirección $j = x, y, z$.
- I_j^- : Conjuntos de índices de velocidad con componente negativa en la dirección $j = x, y, z$.
- I_j^0 : Conjuntos de índices de velocidad con componente nula en la dirección $j = x, y, z$.
- Kn : Número de Knudsen.
- m : Masa de una partícula.
- N : Número de partículas.
- n_{gs} : Número máximo de niveles de refinamiento.
- n_i : Nodos de la grilla LBM en dirección de ejes ortogonales $i = x, y, z$.
- P : Presión termodinámica.
- q : Número de velocidad utilizadas en el modelo LBM.
- R : Constante del gas ideal.
- r_f : Factor de refinamiento.
- s_i : i -ésimo parámetros de relajación del modelo LBM-MRT.
- T : Temperatura del fluido.
- t : Tiempo.
- v_c : Velocidad terminal de un cuerpo rígido en condiciones de sedimentación arbitraria.

v_T : Velocidad terminal de un cuerpo rígido en sedimentación libre.

$\mathcal{P}_{i,t}(t')$: Conjunto de nodos asociado al sistema de partículas a tiempo t' .

$\mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \mathcal{F}_N$: Función densidad de probabilidad de N partículas en el espacio de fases.

Capítulo 1

Introducción

En este trabajo se analiza e implementa un método numérico para resolver un modelo que determina, en escalas macroscópica, la dinámica de fluidos compresibles e isotérmicos en dominios de geometría arbitraria. El modelo del fluido que se utiliza es una descripción en escalas mesoscópicas, consistente a bajos números de Mach (Ma) con las ecuaciones de Navier-Stokes (NS).

El modelo de fluido está asociado a la descripción física del fluido, caracterizada por variables particulares y ecuaciones diferenciales que determinan su evolución y estado para todo tiempo. Definido un modelo, puede existir una variedad de métodos analíticos y numéricos para resolver estas ecuaciones que describen o simulan la dinámica del fluido. En este trabajo estamos particularmente interesados en los métodos numéricos; el conjunto de estos métodos numéricos, utilizados para la simulación de flujos de fluido, se los agrupa en la literatura dentro de la dinámica de fluido computacional (CFD).

Es posible realizar una descripción física del fluido en tres escalas espaciales diferentes: microscópica, mesoscópica y macroscópica. En la descripción del fluido en escala microscópica, se considera un volumen macroscópico que contiene un gran número N de moléculas. Ignorando efectos cuánticos, las moléculas son representadas como partículas (masa puntual o con un número pequeño de grados de libertad) cuyo movimiento puede ser descrito por la mecánica clásica. El estado del sistema de partículas está determinado por la posición y cantidad de movimiento de cada partícula, $2N \times d$ variables describen el sistema, con d la dimensión espacial. Conociendo las fuerzas de interacción entre las partículas y especificado un punto en el espacio de fases, es posible de las ecuaciones de movimiento, determinar el estado del sistema para todo tiempo t ¹. Resolver este problema, conocer con precisión la posición y velocidad de las N partículas, carece de sentido práctico. Se obtiene información detallada que en principio no es necesaria si se quiere conocer una descripción macroscópica del fluido en términos de algún observable. Por otro lado es imposible dada la incapacidad de conocer con precisión el estado inicial del sistema. Existen métodos numéricos de dinámica molecular que resuelven el problema en esta escala.

La descripción del fluido en escalas macroscópicas está basado en la hipótesis de continuidad. Un fluido compresible en esta escala, está caracterizado por sus variables macroscópicas: densidad ρ , velocidad \mathbf{u} , presión P , y temperatura T . Las ecuaciones de Navier-Stokes describen la dinámica de estas variables y se derivan utilizando argumentos de la mecánica del continuo [4–7]. Esta es la descripción clásica del fluido y la más

¹Determinar la dinámica de un sistema de partículas en \mathbb{R}^3 implica resolver gran cantidad de ecuaciones de movimiento, aproximadamente 6×10^{23} para 1 m^3 compuesto por un gas a presión y temperatura atmosférica estándar.

difundida en la literatura. Existe una gran variedad de métodos numéricos para resolver las ecuaciones que describen la física del fluido a nivel macroscópico. Algunos de los más utilizados son: método de diferencias finitas (FDM), método de volúmenes finitos (FVM), métodos de elementos finitos (FEM), y métodos espectrales (SM).

La descripción mesoscópica del fluido es una descripción intermedia entre la microscópica y la macroscópica. La descripción es estadística, no es de interés determinar la evolución de las partículas individuales, las variables que lo describen son funciones de distribución de densidad de probabilidad que representan una colección de partículas. La mecánica estadística brinda una conexión entre las escalas microscópica y macroscópica [8, 9]. La ecuación de Boltzmann (BE) [10–14] es la que describe la evolución de la función distribución de densidad de probabilidad de una partícula $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, con \mathbf{x} y $\boldsymbol{\xi}$ la posición y velocidad de la partícula en el espacio de fases. Si no se consideran fuerzas másicas externas, la BE es:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \mathcal{Q}(f, f) \quad ; \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \boldsymbol{\xi} \in \mathcal{V}, t \in [0, T] \quad (1.1)$$

con $\Gamma \in \mathbb{R}^3$ y $\mathcal{V} \in \mathbb{R}^3$ son el dominio fluido y el espacio de las velocidades respectivamente. Por simplicidad en la notación suele utilizarse $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, con $\mathcal{Q}(f, f)$ el operador o integral de colisiones, y $f : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Para obtener soluciones de la BE, es necesario resolver el operador de colisiones $\mathcal{Q}(f, f)$, un operador integral que contiene información de la interacción entre partículas a través de colisiones binarias. Este presenta los mayores inconvenientes cuando se buscan soluciones de la BE [10–13]. El detalle contenido en $\mathcal{Q}(f, f)$ sobre la interacción entre partículas a nivel microscópico, no tiene influencia significativa en la descripción macroscópica del fluido [13]. Si no es de interés obtener una descripción detallada de la interacción entre las partículas, es posible encontrar buenos resultados reemplazando el operador de colisiones $\mathcal{Q}(f, f)$ por algún *modelo de colisiones*, $\mathfrak{C}(f)$. Si se utiliza un modelo de colisiones para representar $\mathcal{Q}(f, f)$, la ecuación de evolución de la función distribución (1.1) es denominada frecuentemente como *modelo cinético*. Los modelos de colisiones no representan una descripción microscópica o individual de las partículas, brindan una descripción mesoscópica, representativa de un conjunto de partículas. Como modelo de colisiones es posible utilizar expresiones con menor grado de detalle, en general más simples, que conservan algunas propiedades del operador de colisiones [13]: conservar los invariantes de colisiones (A.32) y asegurar que el sistema evolucione hacia el equilibrio. La primera condición garantiza la recuperación de las ecuaciones macroscópicas. Uno de los modelos de colisiones más utilizados y simples, que satisface las restricciones anteriores, es el BGK. Denominado así por las iniciales de los apellidos: Bhatnagar, Gross y Krook, quienes lo propusieron [15]

$$\mathfrak{C}(f) = -\frac{1}{\hat{\tau}} (f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f_M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)) \quad (1.2)$$

donde $f_M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = f_M$ es la función distribución de equilibrio de Maxwell-Boltzmann (ver ecuación (A.17)), $\hat{\tau}$ es un parámetro de relajación. El efecto promedio de las colisiones es modificar la función distribución f por una cantidad proporcional a la diferencia entre f y f_M .

En este trabajo se tiene especial interés en métodos numéricos para resolver la BE utilizando algún modelo de colisión. Estos métodos numéricos utilizan una discretización particular de la BE en el tiempo y en el espacio de fases [16, 17], la ecuación discreta obtenida se denomina *ecuación de lattice Boltzmann* (LBE). La LBE determina la dinámica de un conjunto discreto $\mathbf{f} = \{f_i : i = 0, \dots, q - 1\}$ de funciones distribución

de densidad de probabilidad en una grilla espacial regular (*lattice*). $f_i = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_i, t)$ es la función distribución de densidad de probabilidad discreta de una partícula ficticia en la dirección de velocidad $\boldsymbol{\xi}_i$, con las $\boldsymbol{\xi}_i$ formando un conjunto finito $\mathcal{N}_c \subset \mathcal{V}$ ($|\mathcal{N}_c| = q$) de velocidades discretas. Las velocidades en el conjunto \mathcal{N}_c debe tener simetría suficiente para brindar consistencia con las ecuaciones de NS, y garantizar invariancia rotacional (isotropía) [16, 18].

Los métodos numéricos que utilizan alguna ecuación de evolución discreta de un modelo cinético como la LBE, operando sobre una grilla espacial regular y en un conjunto finito de velocidades discretas \mathcal{N}_c , se denominan de manera general como *métodos de lattice Boltzmann* (LBM)². El LBM utiliza modelos cinéticos simplificados que emulan la física de los procesos microscópicos o mesoscópicos, a través del modelo de colisiones, tal que las cantidades macroscópicas promedio satisfagan las ecuaciones que describen el fluido en escala macroscópica (ecuaciones de NS).

El LBM surgió históricamente como una evolución de los modelos de lattice gas cellular automata (LGCA) [18–21], las primeras aproximaciones fueron propuestas por McNamara et al. [22, 23] e Higuera et al. [24] con la intención explícita de solucionar problemas de ruido estadístico del LGCA. La idea básica era remplazar los números booleanos de ocupación por sus correspondientes promedios en ensamble. Con posterioridad, He et al. [16] derivaron formalmente la LBE desde la ecuación continua de Boltzmann (1.1), demostrando que el LBM es independiente del LGCA. En la literatura contemporánea, la conexión entre el LBM y el LGCA solo se menciona por motivos históricos, siendo entendido el LBM como una discretización particular de la BE.

Siguiendo la idea del BGK, la utilización de operadores de colisiones del tipo relajación al equilibrio es extensamente utilizada en el LBM, incluso desde las primeras propuesta [22, 24, 25]. Existen diferentes modelos de colisiones en el LBM, se pueden destacar: LBM-BGK (o LBM-SRT) [16–18, 26] basado en el modelo BGK o de tiempo de relajación simple (SRT); LBM-MRT [25, 27–32] donde se utiliza un operador de colisiones con múltiples tiempos de relajación; y LBM-TRT [33, 34] con dos tiempos de relajación. Siendo los modelos SRT y TRT casos especiales del LBM-MRT. Otro modelo frecuentemente utilizado es el Entropic lattice Boltzmann (ELBM) [35, 36]. Los modelos ELBM y LBM-TRT no se utilizan en éste trabajo.

El problema está completamente definido si se especifican condiciones iniciales y de contorno para resolver la LBE con un modelo de colisiones arbitrario. La aplicación de condiciones de borde macroscópicas en el LBM es un procedimiento sutil, deben imponerse restricciones apropiadas sobre las variables mesoscópicas tal que en el límite macroscópico se recuperen las condiciones correctas en la frontera. Típicamente, el número requerido de condiciones sobre las variables mesoscópicas excede al número de condiciones macroscópicas disponibles en el problema de NS. Disponer de un método sistemático que permita imponer condiciones de borde en problemas de fluidos con geometría arbitraria es un objetivo que se persiguió desde las primeras aplicaciones en el LBM, existe una variedad de propuestas en la literatura y es un área en la que aún se continúa trabajando.

1.1. Configuraciones típicas de problemas que se analizan

Con motivo de generalizar y unificar la descripción de los problemas de interés, en esta sección se presentan configuraciones típicas de los problemas de fluido que se analizan en

²Se adoptan las siglas en inglés para referenciarlo *LBM* (lattice Boltzmann method).

este trabajo. También se introducen definiciones y nomenclatura de algunos conjuntos de nodos de la grilla que serán de utilidad en los capítulos posteriores.

Es necesario hacer una distinción entre el *dominio físico* y el *dominio computacional* del problema. El dominio físico es el espacio donde está contenido el fluido que se quiere analizar. El dominio computacional es el espacio discreto que ocupa la grilla del problema. Existen problemas donde es posible utilizar, mediante condiciones de borde apropiadas, un dominio computacional más pequeño que el dominio físico. Esta configuración tiene el objetivo de reducir el costo computacional. Debido a la configuración de grillas cartesianas uniformes que se utiliza en el LBM, y por simplicidad en la implementación, es poco frecuente encontrar problemas donde ambos dominios coinciden. Esto es cierto aún cuando no existen limitaciones asociadas al costo computacional. De manera general, el dominio computacional de los problemas que se abordan estarán formados por un arreglo de grillas regulares. Cada grilla se trata como un subdominio y se resuelve de manera independiente con condiciones de borde adecuadas que permiten vincularla con el resto del problema.

En la figura 1.1 se muestran dos esquemas que representan configuraciones de los problemas de interés. El dominio físico es Γ , mientras que el dominio computacional es $\Gamma \cup \Omega$, compuesto por una grilla uniforme de nodos identificados con coordenadas \mathbf{x}_A ; con $A = (j, k, l)$ ($A = (j, k)$ en el caso bidimensional) un multi-índice de números enteros utilizado para identificar un nodo en la grilla. Se denota con n_i al número de nodos de la grilla para cada una de las tres direcciones ortogonales $i = x, y, z$. Por simplicidad y

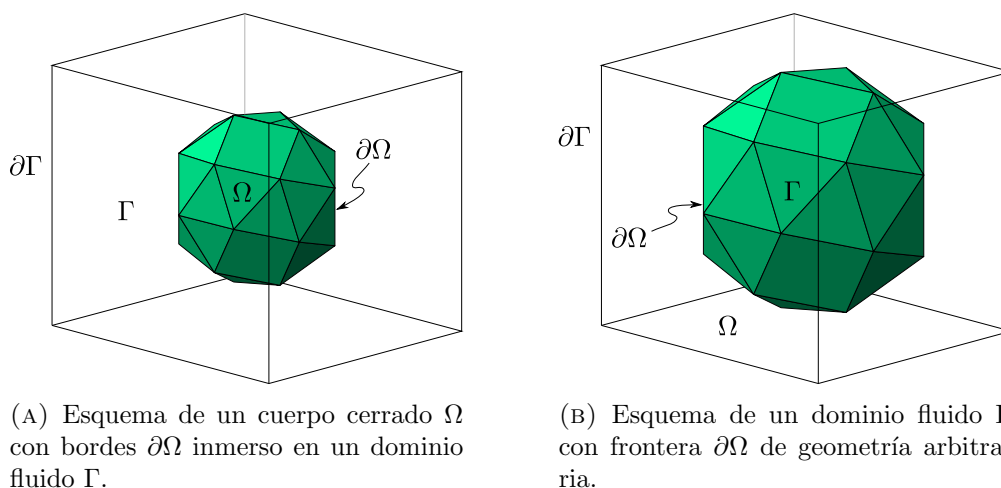


FIGURA 1.1: Esquemas de dos configuraciones típicas de los problemas que se analizan. Ω no pertenece al dominio físico del problema, el dominio computacional en ambos casos es $\Omega \cup \Gamma$.

claridad, los nodos de la grilla LBM se agrupan en diferentes conjuntos. Los nodos en la región Ω se denominan *nodos sólidos* y pertenecen al conjunto $\mathcal{N}_s = \{\mathbf{x}_A \in \Omega\}$. Los nodos que pertenecen a la región del fluido Γ se denominan *nodos fluido* y pertenecen al conjunto $\mathcal{N}_F = \{\mathbf{x}_A \in \Gamma\}$.

La evaluación de la LBE ocurre en los nodos $\mathbf{x}_A \in \mathcal{N}_F$; sin embargo, por trabajar con grillas regulares, es más simple en la implementación tratar todos los nodos del dominio computacional como nodos fluido. Luego la solución encontrada en los $\mathbf{x}_A \in \mathcal{N}_s$ representa una solución ficticia que no tiene interés en el problema. La configuración mejor optimizada computacionalmente en cuanto a utilización de la memoria se da cuando el dominio computacional es igual a \mathcal{N}_F . Existe un subconjunto de nodos en \mathcal{N}_F que representan

los nodos de borde \mathcal{N}_b del problema y deben tratarse de manera particular para poder imponer las condiciones de borde.

En el esquema de la figura 1.1a se muestra un cuerpo cerrado Ω inmerso en un dominio fluido Γ , con $\partial\Omega$ y $\partial\Gamma$ fronteras de geometría arbitraria y regular respectivamente. En el esquema de la figura 1.1b se muestra un dominio fluido Γ con fronteras $\partial\Omega$ de geometría arbitraria, Ω no pertenece al dominio físico del problema. En ambos casos las fronteras de geometría regular $\partial\Gamma$, son también fronteras del dominio computacional. La geometría de $\partial\Omega$ se representa mediante un arreglo de superficies discretas simples como se muestra de manera esquemática en la figura 1.1. Es de utilidad hacer esta distinción entre $\partial\Gamma$ y $\partial\Omega$ ya que se utilizan métodos particulares para imponer condiciones de borde en ambos tipos de fronteras. Si las fronteras de geometría regular no pertenecen al dominio físico, como es el caso de la figura 1.1b, se imponen condiciones de borde ficticias (de periodicidad por ejemplo) para poder evolucionar temporalmente sobre toda la grilla del dominio computacional. Si las fronteras de geometría regular son fronteras del dominio físico, se utilizan condiciones de borde Dirichlet de velocidad; si no pertenecen a un frontera física se utilizan condiciones de borde Dirichlet de presión o condiciones de borde para representar fronteras abiertas. Las fronteras de geometría arbitraria son siempre fronteras del dominio físico en las implementaciones realizadas, se utilizan únicamente condiciones de borde Dirichlet de velocidad.

Configuraciones como las presentadas en la figura 1.1a pueden ser utilizadas para modelar problemas de *flujo externo*, ya que es de interés conocer la dinámica del fluido que rodea algún cuerpo arbitrario. Esta denominación es frecuente en problemas de aerodinámica donde las fronteras del paralelepípedo están en general lejos del cuerpo Ω , las fronteras $\partial\Gamma$ son ficticias y deben garantizar continuidad del campo de fluido, ya que el dominio físico es en general más extenso que el computacional. Existen problemas de *flujo interno* de interés, donde el dominio fluido está contenido frecuentemente por una frontera de geometría arbitraria. Este caso se representa en la figura 1.1b donde el dominio fluido Γ tiene fronteras $\partial\Omega$ de geometría arbitraria, el dominio computacional es $\Gamma \cup \Omega$.

1.2. Contenido y sinopsis de este trabajo

El contenido de esta tesis se puede considerar segmentado en dos partes, una que introduce los tópicos más relevantes y contribuciones realizadas al LBM, Capítulos 2-5; y otra donde se muestran problemas de aplicación analizados con el LBM, Capítulo 6 y 7. Estos problemas se analizan utilizando un programa de computadora donde se implementa un algoritmo basado en el LBM, al que por simplicidad citaremos de aquí en más como $\{LBM\}$.

La organización de los capítulos es aproximadamente uniforme, una parte inicial donde se introduce el contenido principal, y una final donde se analizan casos de prueba con problemas típicos de verificación. Esta tesis posee también una serie de apéndices donde se incluye toda la información considerada relevante, que por claridad en la presentación, puede postergarse al final sin afectar el desarrollo de cada capítulo.

Al final de cada capítulo, si se considera necesario y relevante, se introduce una sección de comentarios y conclusiones. Por claridad se elige este formato de conclusiones y comentarios parciales por sobre uno donde se haga una conclusión global del trabajo.

Capítulo 2 - Métodos de lattice Boltzmann. En este capítulo se presentan detalles de una discretización particular, en el tiempo y en el espacio de fases, de la ecuación de

Boltzmann (BE). Se incluye una derivación formal, motivada en los trabajos de He et al. [16, 17], de la ecuación de lattice Boltzmann (LBE) desde la BE utilizando el modelo de colisiones BGK (LBM-SRT). Se presenta una ecuación generalizada de lattice Boltzmann [25, 31] que da origen al LBM con múltiples tiempos de relajación (MRT), junto con una forma clásica para obtener los elementos que lo componen [27–32, 37]. Por simplicidad y sin perder generalidad, en ambos casos se dan detalles solo de un modelo bidimensional simple (D2Q9), en el apéndice C pueden encontrarse detalles adicionales de otros modelos LBM-MRT implementados. Se presentan modelos cuasi—incompresibles utilizados en el LBM-BGK [38] y el LBM-MRT [31, 39]. Se propone uno ad-hoc para LBM-MRT que brinda consistencia con las ecuaciones de Navier-Stokes (NS) incompresibles. También se introducen resultados sobre precisión espacial y temporal en el LBM [40–43], así como comentarios generales sobre consistencia con las ecuaciones de NS [31, 42].

Capítulo 3 - Condiciones de Borde en el LBM. Se presentan los métodos de condiciones de borde utilizados en esta tesis para resolver diferentes problemas de interés. Se implementan y utilizan dos tipos de condiciones de borde: Dirichlet y tipo Sommerfeld. Para las condiciones de borde de Dirichlet — velocidad o presión — se utilizan los métodos basados en bounce-back (BB) [44–56]. Además se implementan en $\{LBM\}$ otros métodos de condición de borde denominados de reconstrucción [56–58]. Las condiciones de borde tipo Sommerfeld, se utilizan para representar dominios físicos cuasi-infinitos mediante dominios computacionales finitos. Se adoptan las propuestas formuladas en variables macroscópicas [59–61] para problemas de flujo cuasi—incompresible. Por simplicidad se diferencia el problema en fronteras de geometría regular y fronteras de geometría arbitraria.

Para los métodos que se presentan en este capítulo se particularizan detalles sobre implementación y precisión. Se presenta también una descripción de como se aborda el problema de condiciones de borde con cuerpos en movimiento [54, 62–64]. Se muestra un problema de verificación de los métodos de condiciones de borde implementados. La verificación es de manera indirecta, se analiza la influencia de los métodos de condiciones de borde sobre las fuerzas que el fluido ejerce sobre un arreglo plano de esferas.

Capítulo 4 - Evaluación de fuerzas en el LBM. El contenido de este capítulo está basado en el trabajo publicado [1], donde proponemos una derivación formal del método de *momentum exchange* (ME). Desde una perspectiva de la mecánica de fluidos, se encuentran las expresiones del ME y algunos términos de corrección previamente introducidos ad-hoc en la literatura para la evaluación de fuerzas sobre cuerpos en movimiento. En particular se encuentra que el ME clásico [65] es válido únicamente para evaluar fuerzas del fluido sobre cuerpos estáticos. Se muestra que las correcciones propuestas por Wen et al. [66] y Aidun et al. [62] son adecuadas cuando se evalúan fuerzas en un marco de referencia fijo a la grilla LBM. Siendo también válidas las correcciones alternativas de Wen et al. [67] y Krithivasan et al. [64], formulada en un marco de referencia en movimiento con la frontera del cuerpo.

Se analizan una serie de problemas de verificación para comprobar el método propuesto. Se evalúan problemas de sedimentación bidimensionales con resultados conocidos, sedimentación de un disco circular y una elipse.

Capítulo 5 - Refinamiento de grilla en el LBM. En este capítulo se presentan dos métodos utilizados ampliamente para refinamiento de grilla en el LBM [52, 68–71]. Hacemos especial énfasis en el método implementado, denominado *multi-dominio*. Mostramos

los detalles de la implementación para los modelos LBM-SRT y LBM-MRT, proponiendo un algoritmo particular para resolver el problema de refinamiento de grilla cuando se considera un número de grillas y niveles de refinamiento arbitrario. También se presentan detalles de un método utilizado para el movimiento de grillas en tiempo de ejecución, esta estrategia permite reducir el costo computacional en los problemas de sedimentación de partículas que se analizan en este trabajo. Se presentan una serie de problemas de verificación. En uno de ellos, problema de Poiseuille 3D, se muestra de manera numérica el orden de convergencia del error de aproximación a la solución exacta para diferentes esquemas de velocidad. Esto permite comprobar la precisión del algoritmo de refinamiento propuesto. Se analiza también un problema de sedimentación de una esfera en un ducto de sección cuadrada. Este problema tiene resultados experimentales conocidos, permite verificar el algoritmo de refinamiento en problemas típicos de sedimentación de cuerpos rígidos e interacción cuerpo rígido - fluido.

Capítulo 6 - Simulación y análisis numérico de la sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera. Este capítulo es un extracto de los métodos utilizados y resultados encontrados en el análisis numérico de la sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera. Los resultados, métodos y algoritmo propuesto fueron publicados [2]. Este trabajo es el resultado de una colaboración con el grupo³ de Física de la Atmósfera de la Facultad de Matemática, Astronomía y Física (FaMAF) de la Universidad Nacional de Córdoba (UNC). El problema de interés es uno de interacción cuerpo rígido - fluido, donde es necesario resolver de manera adecuada la dinámica del cuerpo y su interacción con el fluido. Utilizando el LBM se determina la dinámica de partículas de hielo en la atmósfera. Se analizan cristales de hielo con geometrías tipo columnas de sección hexagonal. En especial se evalúa la velocidad de sedimentación de los cristales para una variedad de tamaños y relaciones de aspecto que lo definen.

El interés principal fue evaluar el LBM como una herramienta numérica precisa para resolver este tipo de problemas. Los resultados numéricos obtenidos fueron satisfactorios y comparables con los datos experimentales y modelos teóricos disponibles en la literatura.

Capítulo 7 - Determinación del campo de velocidad inestacionario de un fluido. En este capítulo analizamos, utilizando el método de lattice Boltzmann (LBM) y un método de resonancia magnética nuclear (RMN) [3], el campo de velocidad inestacionario de un fluido contenido en una cavidad con fronteras en movimiento prescrito. El contenido de éste capítulo surge de una colaboración con el grupo de Resonancia Magnética Nuclear⁴(RMN) de la FaMAF, UNC. Tenemos especial interés en determinar numéricamente el campo de velocidad transitorio para dos fluidos diferentes, agua y 2-propanol (alcohol isopropílico). Los resultados numéricos hallados mediante el LBM tienen el propósito de servir como solución de referencia para verificar el método experimental. Se muestran una variedad de problemas de verificación con soluciones conocidas, válidas en casos particulares del problema de interés para comprobar la precisión de los resultados obtenidos con el algoritmo LBM implementado.

Apéndice A - La ecuación de Boltzmann En este apéndice se introduce notación, generalidades y se muestra una derivación acotada de la ecuación de Boltzmann (BE). El objetivo es explicitar algunos resultados relevantes de la teoría de la BE. En especial, el

³Dra. Nesvit Castellano y Dr. Rodrigo Bürguesser

⁴Lic. Raquel Serial y Dr. Rodolfo Acosta

problema que modela, los límites de aplicación y las hipótesis bajo las cuales se deriva la BE. Se obtiene la BE desde la ecuación de Liouville, siguiendo un procedimiento estándar como el propuesto por Grad [14]. Se dice que la derivación es acotada ya que algunos detalles fundamentales se muestran y utilizan, sin una demostración formal y rigurosa.

Se presenta la conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de la dinámica de fluido, las ecuaciones macroscópicas fundamentales y las de conservación (ecuaciones de Navier-Stokes).

Apéndice B - Análisis multi-escala de la LBE. Este apéndice está basado en el método de análisis multi-escala de la LBE, denominado frecuentemente como análisis multi-escala de Chapman-Enskog (ChE). Se presenta el método utilizado para comprobar consistencia de la LBE con las ecuaciones de Navier-Stokes. Se brindan detalles del procedimiento, y se explicitan los resultados para dos casos de interés, el LBM-SRT y el LBM-MRT para un esquema de velocidad bidimensional.

Apéndice C - Detalles varios del LBM y su implementación en $\{LBM\}$. En este apéndice se muestra detalles adicionales del LBM y particularidades menores de la implementación. Se muestra un detalle de los esquemas de velocidad implementados D2Q9, D3Q15, D3Q19 y D3Q27; se explicitan las direcciones de velocidad discretas, su nomenclatura y los coeficientes o pesos de la cuadratura utilizada en el esquema. También se muestran la matriz de colisiones y momentos de equilibrio para los esquemas D3Q15 y D3Q19 en el LBM-MRT. Adicionalmente se brindan detalles sobre la generalización de condiciones de borde Dirichlet de presión y velocidad en fronteras de geometría regular. Se muestran expresiones para casos particulares de fronteras planas de presión y velocidad, bordes y esquinas convexas.

Apéndice D - Problemas adicionales de verificación del algoritmo $\{LBM\}$. En este apéndice se muestran algunos problemas adicionales de verificación del algoritmo implementado, donde por claridad se los introduce en un apéndice. Se presentan resultados de un problema de Poiseuille 2D para verificar la correcta implementación del algoritmo de refinamiento en problemas bidimensionales, se utilizan tres niveles de refinamiento. Se muestran resultados del análisis de dos problemas de rotación de cuerpos rígidos en un flujo de Couette. Se analiza la rotación de una elipse (problema 2D) y un elipsoide (problema 3D). La utilidad de estos casos de verificación es comprobar el algoritmo implementado en problemas de rotación sin traslación, permitiendo evaluar la correcta implementación de las ecuaciones de movimiento y su acoplamiento con el problema de fluidos.

Apéndice E - Algunos detalles sobre el tratamiento de geometrías arbitrarias.

En este Apéndice se introducen algunos detalles y comentarios sobre el tratamiento de fronteras de geometría arbitraria no coincidentes con la grilla. Presentamos los métodos utilizados para encontrar los conjuntos de nodos necesarios en la implementación de las condiciones de borde. En todos los casos se utilizan métodos elementales que lejos están de ser computacionalmente eficientes.

1.3. Aportes y publicaciones científicas

Como resultados de este trabajo de tesis surgen diferentes aportes y publicaciones científicas, por claridad las diferenciamos en tres categorías: *aporte al LBM*, *aplicaciones*

del LBM y desarrollo de un algoritmo basado en LBM y su implementación en un programa de computadora. La primera es considerado un aporte directo al LBM, de carácter teórico y básico. La segunda son aplicaciones del LBM para resolver problemas particulares de mecánica de fluidos que motivaron parte de este trabajo. Una importante cantidad de trabajo y tiempo insumido se invirtió en desarrollar un algoritmo basado en LBM e implementarlo en un programa de computadora para resolver los problemas de interés. El algoritmo con los diferentes métodos implementados fue utilizado para encontrar los resultados publicados y los que se presentan en este trabajo. Esta parte importante del trabajo se encuentra parcialmente documentada y no se muestra de manera explícita en esta tesis. Se mencionan en esta sección algunas de las características principales y modelos implementados en $\{LBM\}$.

Se resumen los aportes y contribuciones según los siguientes ítem:

- Aporte al LBM: Propuesta alternativa para mostrar la validez de los métodos clásicos y otros utilizados en el LBM para la evaluación de fuerzas sobre cuerpos en movimiento inmersos en un fluido. Este trabajo se encuentra resumido en el Capítulo 4. Los resultados encontrados fueron también publicados:

Juan P. Giovacchini y Omar E. Ortiz. *Flow force and torque on submerged bodies in lattice-boltzmann methods via momentum exchange*. Phys. Rev. E, 92:063302, Dec 2015. doi: 10.1103/PhysRevE.92.063302.

- Aplicación del LBM: Simulación y análisis numérico de la sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera. Este trabajo se encuentra resumido en el Capítulo 6. Los resultados encontrados fueron también publicados:

Juan P. Giovacchini. *Sedimentation analysis of small ice crystals by lattice Boltzmann method*. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. ISSN 1477-870X. doi:10.1002/qj.3164.

- Aplicación del LBM: Determinación del campo de velocidades inestacionario de un fluido contenido en una cavidad con fronteras en movimiento prescrito. Este trabajo se encuentra resumido en el Capítulo 7. Los resultados encontrados están en proceso de publicación:

M. R. Serial, E.V. Silletta, J. P. Giovacchini, M. I. Velasco, E.D. Danieli, B. Blümich, F. Casanova, and R. H. Acosta. *Single shot velocity mapping with rewinding of the velocity encoding with echo-planar imaging*. En proceso de publicación.

- Desarrollo de un algoritmo basado en LBM e implementación en un programa de computadora para analizar problemas de mecánica de fluidos, $\{LBM\}$. Como parte del trabajo de doctorado, se implementó en un programa de computadora — utilizando el lenguaje C++ — un algoritmo basado en LBM para resolver problemas de fluidos isotérmicos, compresibles y cuasi—incompresibles en dominios bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D) de geometría arbitraria. Se destacan las siguientes características generales de $\{LBM\}$:

- Esquemas de velocidad D2Q9, D3Q15, D3Q19, y D3Q27.
- Modelos LBM de relajación simple (SRT) y de múltiples tiempos de relajación (MRT), isotérmicos, compresibles y cuasi—incompresibles.

- Métodos de condiciones de borde para imponer condiciones Dirichlet de presión y velocidad sobre fronteras de geometría regular aplicables a todos los esquemas de velocidad. Los métodos implementados se detallan en la sección 3.2.
- Métodos de condiciones de borde para imponer condiciones Dirichlet de velocidad en fronteras de geometría arbitraria estáticas y con movimiento prescrito. Algunos de los métodos implementados se detallan en la sección 3.3 y 3.4.
- Métodos de condiciones de borde para modelar fronteras abiertas con condiciones de salida tipo Sommerfeld, condiciones de borde convectivas. El método utilizado se detalla en la sección 3.5.
- Métodos de condiciones de borde para modelar fronteras abiertas con condiciones de borde absorbentes o no reflectantes [72, 73]. Dado que no se utiliza en los problemas presentados, estos métodos no se incluyen en esta tesis pero fueron implementaron en $\{LBM\}$.
- Diferentes métodos para la evaluación de fuerzas que el fluido ejerce sobre las fronteras. Acoplamiento del problema de fluidos con las ecuaciones de movimiento de cuerpos rígidos formuladas en cuaterniones, necesario para analizar los problemas de sedimentación de partículas. Los métodos utilizados se muestran en el capítulo 4.
- Método de refinamiento de grilla para resolver problemas 2D y 3D en modelos SRT y MRT, junto con un algoritmo para resolver problemas con grillas en movimiento prescrito. Se utiliza un método de partición de dominio denominado *multi-bloque*, una discretización del dominio fluido en múltiples subdominios regulares. Este método en combinación con refinamiento de grilla nos permite resolver problemas de mecánica de fluidos a costo computacional y requerimiento de memoria aceptable. Los métodos implementados se muestran en el capítulo 5

Adicional a las publicaciones en revistas que se citan anteriormente, se presentó y publicó un proceeding [74] en el congreso MECOM-2012 donde se muestran algunas aplicaciones para resolver problemas de fluido con fronteras de geometrías no regulares.

1.4. Sobre la notación utilizada

En esta tesis se utiliza una notación estándar. Los vectores y tensores se denotan de manera general con símbolos o caracteres en negrita, \mathbf{a} y \mathbf{A} pueden representar un vector o un tensor, sin distinción. Preferentemente se utilizan letras mayúsculas para representar tensores. Las componentes de estas cantidades vectoriales se identifican con un subíndice a_i y $A_{i,j}$, $i, j = 1, \dots, d$, con d la dimensión del espacio \mathbb{R}^d . Se utiliza indistintamente dos tipos de notaciones para expresar operaciones algebraicas entre vectores y tensores. En la notación indicial se explicitan todos los índices y no se utilizan símbolos de sumatoria (notación de Einstein), esta es implícita cuando un índice se repite en la expresión. A continuación se listan algunos ejemplos de referencia:

	notación vectorial	notación indicial
Producto escalar	$e = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	$e = a_i b_i$
Gradiente	$\mathbf{c} = \nabla e$	$c_i = \partial_i e$
Divergencia	$e = \nabla \cdot \mathbf{a}$	$e = \partial_i a_i$
Divergencia de un tensor	$\mathbf{a} = \nabla \cdot \mathbf{A}$	$a_i = \partial_j A_{i,j}$

Esta nomenclatura no es estricta, para indicar productos vectoriales en el espacio \mathbb{R}^q de las q velocidades discretas se utiliza frecuentemente el símbolo de la sumatoria y no la convención de índices repetidos que se menciona. Se elige esta notación ya que es la clásica en la literatura.

Se utiliza la notación \mathcal{O} para indicar el comportamiento de una función en el límite cuando los argumentos tienden a un valor particular.

Capítulo 2

Métodos de lattice Boltzmann

En este capítulo se presentan detalles de una discretización particular, en el tiempo y en el espacio de fases, de la ecuación de Boltzmann (BE). Se incluye una derivación formal de la ecuación de lattice Boltzmann (LBE) desde la BE utilizando el modelo de colisiones BGK. Se presenta una ecuación generalizada de lattice Boltzmann que da origen al LBM con múltiples tiempos de relajación (MRT), junto con una forma clásica para obtener los elementos que lo componen. Por simplicidad y sin perder generalidad, en ambos casos se dan detalles solo de un modelo bidimensional simple, en el apéndice C pueden encontrarse detalles adicionales de otros modelos LBM implementados.

Se presentan modelos cuasi—incompresibles utilizados en el LBM-BGK y LBM-MRT. También se introducen resultados sobre precisión espacial y temporal en el LBM, así como comentarios generales sobre consistencia con las ecuaciones de Navier-Stokes que se tratan en el Apéndice B.

No es la intención de este capítulo hacer una revisión extensa de los diferentes métodos de lattice Boltzmann propuestos en la literatura. Por el contrario, es una presentación resumida enfatizando características principales y limitaciones de los métodos y modelos que se utilizan en este trabajo.

2.1. Discretización de la ecuación de Boltzmann LBM-BGK.

Se presenta una derivación de la LBE a partir de la ecuación de Boltzmann utilizando el modelo de colisiones BGK (1.2). La discretización de la BE en el tiempo y en el espacio de fases que se presenta está motivada en el trabajo de He et al. [16, 17].

De la BE (A.16), utilizando el modelo BGK (1.2) como término de colisiones, considerando problemas isotérmicos y en ausencia de fuerzas externas (tales como la gravedad) se tiene:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{1}{\hat{\tau}} (f - f_M) \quad (2.1)$$

donde, por simplicidad en la notación, se utiliza $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ para denotar la función distribución de densidad de probabilidad de una partícula, con \mathbf{x} y $\boldsymbol{\xi}$ la posición y velocidad de la partícula en el espacio de fases, y t el tiempo. $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$ es la derivada total o material a lo largo de una línea característica $\boldsymbol{\xi}$. Se utiliza sin distinción la notación equivalente: $\boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \xi_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$; $\alpha = 0, \dots, d$, con d la dimensión espacial del problema.

En la literatura es frecuente presentar el modelo de colisiones BGK como una linealización del término de colisiones. Esto no es estrictamente cierto, la no linealidad de $\mathfrak{C}(f)$ en el BGK es más fuerte que la del término de colisiones $\mathcal{Q}(f, f)$. Este último es cuadrático en f mientras que en $\mathfrak{C}(f)$, f está contenida en las variables macroscópicas que definen f_M .

Existen tres discretizaciones en el LBM: temporal, en el espacio físico y en el espacio de las velocidades. El LBM tiene la particularidad, como se muestra en la próxima sección, de acoplar estas tres discretizaciones dando origen a una ecuación de evolución simple sobre una grilla cartesiana uniforme.

2.1.1. Discretización temporal y en el espacio de fases

El término izquierdo de (2.1) se puede expresar en diferencias utilizando una expansión en Taylor de $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ a lo largo de una línea característica $\boldsymbol{\xi}$:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) \quad (2.2)$$

Despreciando términos $\mathcal{O}(\delta t)$ y reemplazando en (2.1) se obtiene:

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\frac{\delta t}{\tau} (f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f_M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)) \quad (2.3)$$

donde $\tau = \frac{\hat{\tau}}{\delta t}$ es el tiempo de relajación característico adimensional en unidades δt . La expresión (2.3) es una discretización temporal de la LBE-BGK de precisión $\mathcal{O}(\delta t)$. Se puede notar a partir de (2.3) que la discretización temporal y espacial no son independientes, están acopladas a través de $\boldsymbol{\xi}$.

Un paso esencial para obtener la LBE es no solo discretizar las velocidades $\boldsymbol{\xi}$, sino además restringirlas a un conjunto finito $\mathcal{N}_c \subset \mathcal{V}$ de q valores ($|\mathcal{N}_c| = q$). Dado el acoplamiento espacial y temporal en (2.3), y definido \mathcal{N}_c , se forma una configuración espacial de grilla cartesiana uniforme (*lattice*), característico del LBM. La elección del conjunto de velocidades debe garantizar que una evaluación numérica — utilizando una cuadratura apropiada — de momentos de la función distribución de equilibrio f_M , sea exacta hasta cierto orden de precisión. Además, para asegurar consistencia con las ecuaciones de NS, debe satisfacer requisitos de simetría como los presentados en las ecuaciones (B.16). Los momentos de f_M tienen la siguiente forma general:

$$\int \psi(\boldsymbol{\xi}) f_M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \sum_{i=0}^{q-1} w_i \psi(\boldsymbol{\xi}_i) f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) \quad (2.4)$$

donde w_i y $\boldsymbol{\xi}_i$ son pesos de cuadratura y velocidades discretas respectivamente, y $\psi(\boldsymbol{\xi})$ es un polinomio en $\boldsymbol{\xi}$. En el LBM-SRT se consideran dos aproximaciones equivalentes para la función distribución de equilibrio $f_M \simeq f^{eq}$, utilizando expansiones en la velocidad (o número de Mach¹(Ma)) [16], o expansiones en series de Hermite [75]. Ambas aproximaciones brindan consistencia con las ecuaciones de NS, la expansión en la velocidad es más simple, y es el procedimiento que se sigue en este trabajo. De la distribución de

¹El número de Mach (Ma) es una relación entre la velocidad del fluido $u = \|\mathbf{u}\|$ y la velocidad local del sonido c_s :

$$\text{Ma} = \frac{u}{c_s} \quad (2.5)$$

Maxwell-Boltzmann (A.17) se tiene:

$$f_M \simeq f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}\right) \left(1 + \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u}}{RT} + \frac{1}{2} \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})^2}{(RT)^2} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2RT}\right) \quad (2.6)$$

donde R es la constante del gas ideal, y las cantidades macroscópicas ρ , \mathbf{u} , y T son la densidad de masa, velocidad y temperatura respectivamente. En (2.6) se desprecian términos $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$.

La cuadratura numérica que se utiliza en (2.4) está relacionada con la función $\psi(\boldsymbol{\xi})$ que se desea integrar con cierta precisión. En el caso isotérmico de interés (no se considera (A.28)), para recuperar las cantidades macroscópicas y obtener consistencia con las ecuaciones de NS, se requiere integrar de manera exacta en (2.4) polinomios $\psi(\boldsymbol{\xi})$ de la forma:

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} 1, & \xi_i, & \xi_i \xi_j \\ \xi_i, & \xi_i \xi_j, & \xi_i \xi_j \xi_k \end{cases} \quad (2.7)$$

La expresión (2.7) se ordena de forma particular para enfatizar que la primera fila corresponden a polinomios que deben integrarse desde las expresiones (A.20), (B.17), y (B.21); mientras que la segunda fila a polinomios en las expresiones (A.21), (B.19), y (B.23) (Notar que en el apéndice B se presentan expresiones ya discretizadas). Luego, utilizando la función distribución de equilibrio (2.6) en (2.4), y considerando los requisitos (2.7) se requiere integrar de manera exacta el producto de polinomios de hasta $\mathcal{O}(\boldsymbol{\xi}^5)$ ponderados por una función $\exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}\right)$.

Por simplicidad se introduce el siguiente cambio de variables:

$$\hat{\boldsymbol{\xi}} = \frac{\boldsymbol{\xi}}{\sqrt{2RT}} \quad (2.8)$$

y se considera, sin perder generalidad, un problema bidimensional (2D). Es posible expresar a $\psi(\hat{\boldsymbol{\xi}})$ como:

$$\psi(\hat{\boldsymbol{\xi}}) = \hat{\xi}_x^{\bar{i}} \hat{\xi}_y^{\bar{j}} \quad , \quad \bar{i}, \bar{j} = 0, 1, 2, 3 \quad (2.9)$$

Luego de (2.4) y las consideraciones anteriores, las expresiones a resolver son de la forma:

$$\mathcal{I}_x^{\bar{i}} \mathcal{I}_y^{\bar{j}} = \int \hat{\xi}_x^{\bar{i}} \exp(-\hat{\xi}_x^2) d\hat{\xi}_x \int \hat{\xi}_y^{\bar{j}} \exp(-\hat{\xi}_y^2) d\hat{\xi}_y \quad (2.10)$$

y se resuelven numéricamente utilizando cuadraturas de Gauss-Hermite. Para una función general $f(x)$, de [76] se tiene:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k) + \frac{n! \sqrt{\pi}}{2^n (2n)!} f^{(2n)}(\kappa) \quad ; \quad -\infty < \kappa < \infty \quad (2.11)$$

x_k son los ceros del polinomio de Hermite $H_n(x)$, y $w_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{(H_{n+1}(x_k))^2}$ los pesos de la cuadratura. A partir de (2.11) es posible integrar un polinomio $f(x)$ de hasta orden $2n - 1$ de manera exacta. Para el caso de interés es suficiente con tomar tres puntos en la cuadratura, siendo las raíces del polinomio de Hermite $H_3(x)$:

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x = 0 \quad \rightarrow \quad x_k = -\sqrt{\frac{3}{2}}, 0, \sqrt{\frac{3}{2}} \quad , \quad k = 1, 2, 3 \quad (2.12)$$

con:

$$w_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}, \quad w_2 = \frac{2\sqrt{\pi}}{3}, \quad w_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{6} \quad (2.13)$$

Utilizando esta cuadratura, una forma discreta de la expresión (2.10) es:

$$\mathcal{I}_x^i \mathcal{I}_y^j = \sum_{\ell=1}^3 \sum_{k=1}^3 w_k w_\ell \hat{\xi}_{x_k}^i \hat{\xi}_{y_\ell}^j \quad (2.14)$$

con $\hat{\xi}_{x_k}$ y $\hat{\xi}_{y_\ell}$ la raíz k y ℓ del polinomio de Hermite $H_3(x)$ (2.12). Con las consideraciones anteriores sobre $\psi(\boldsymbol{\xi})$ y f^{eq} , es posible escribir la siguiente forma discreta de (2.4):

$$\mathcal{I} = \sum_{k=1}^3 \sum_{\ell=1}^3 \frac{w_k w_\ell}{\pi} \xi_{x_k}^i \xi_{y_\ell}^j \rho \left[1 + \frac{(\boldsymbol{\xi}_{k\ell} \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_{k\ell} \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right] \quad (2.15)$$

con $\boldsymbol{\xi}_{k\ell} = (\xi_{x_k}, \xi_{y_\ell})$. En la literatura se reordena la expresión (2.15), que involucra la suma de 3×3 términos, para formar el siguiente conjunto de $q = 9$ velocidades discretas:

$$\mathbf{c}_\gamma = \begin{cases} (0, 0), & \gamma = 0 \\ (\cos(\theta_\gamma), \sin(\theta_\gamma)) c, & \theta_\gamma = (\gamma - 1)\frac{\pi}{4}, \quad \gamma = 1, \dots, q - 1 \end{cases} \quad (2.16)$$

con $c = \sqrt{3RT}$ - denominado frecuentemente como *velocidad de grilla* - como resultados de (2.12) y el cambio de variables (2.8). Combinando de igual manera la expresión $\frac{w_k w_\ell}{\pi}$ para los pesos de la cuadratura se tiene:

$$\omega_\gamma = \begin{cases} \frac{4}{9} & \gamma = 0 \\ \frac{1}{9} & \gamma = 1, 3, 5, 7 \\ \frac{1}{36} & \gamma = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (2.17)$$

En la sección C.1 se muestra un esquema del conjunto de velocidades en su forma clásica junto con un resumen de los parámetros que lo caracterizan.

En el LBM el esquema de velocidades se denota frecuentemente como $DdQq$ [77]. Se elige $c = \frac{\delta x}{\delta t}$ para mantener la característica de uniformidad de la grilla. δx es la distancia mínima entre dos nodos primeros vecinos. Notar que la grilla espacial es invariante ante traslaciones \mathbf{c}_γ . Como se indica en el Capítulo 1, la coordenada de los nodos de la grilla cartesiana son denotadas por \mathbf{x}_A ; con $A = (j, k, l)$ ($A = (j, k)$ en el caso bidimensional) un entero multi-índice.

De (2.15) se obtiene una expresión denominada *función distribución de equilibrio discretizada*:

$$f_\gamma^{eq} = \omega_\gamma \rho \left[1 + \frac{3(\mathbf{c}_\gamma \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(\mathbf{c}_\gamma \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c^2} \right] \quad (2.18)$$

con $f_\gamma^{eq} = f^{eq}(\mathbf{c}_\gamma; \rho, \mathbf{u}, T)$. Notar que f_γ^{eq} no depende explícitamente de la posición y el tiempo, la dependencia es implícita a través de las variables macroscópicas. En la literatura, frecuentemente la definición de f_γ^{eq} no incluye ω_γ . Expresiones equivalentes para la función distribución de equilibrio se pueden también encontrar, o elegir, exigiendo que se recuperen las ecuaciones de NS [77, 78].

Luego, con la discretización de la velocidad y las consideraciones anteriores, se obtiene de (2.3) la ecuación de lattice Boltzmann (LBE):

$$f(\mathbf{x}_A + \mathbf{c}_\gamma \delta t, \mathbf{c}_\gamma, t + \delta t) - f(\mathbf{x}_A, \mathbf{c}_\gamma, t) = -\frac{1}{\tau} (f(\mathbf{x}_A, \mathbf{c}_\gamma, t) - f^{eq}(\mathbf{c}_\gamma; \rho, \mathbf{u}, T)) \quad (2.19)$$

Las variables $f(\mathbf{x}_A, \mathbf{c}_\gamma, t)$ en las ecuaciones de evolución (2.19), si bien se las denota sin cambios respecto a las presentadas en (2.3), no son estrictamente las mismas. $f(\mathbf{x}_A, \mathbf{c}_\gamma, t)$ en la última ecuación difiere en una constante de las presentadas en (2.3).

Por conveniencia en la evaluación numérica de la ecuación (2.19), es frecuente segmentarla en dos partes: por un lado las que involucran variables locales y por otro las no locales; denominados *colisión* y *propagación* (o *streaming*) respectivamente:

$$\hat{f}_\gamma(\mathbf{x}_A, t) = f_\gamma(\mathbf{x}_A, t) - \frac{1}{\tau} (f_\gamma(\mathbf{x}_A, t) - f_\gamma^{eq}(\rho, \mathbf{u})) \quad (2.20)$$

$$f_\gamma(\mathbf{x}_A + \mathbf{c}_\gamma \delta t, t + \delta t) = \hat{f}_\gamma(\mathbf{x}_A, t) \quad (2.21)$$

donde se denota por simplicidad $f_\gamma(\mathbf{x}_A, t) = f(\mathbf{x}_A, \mathbf{c}_\gamma, t)$ y se omite la dependencia de la temperatura T en f_γ^{eq} por tratarse de un parámetro constante al abordar problemas isotérmicos. Como f_γ^{eq} depende implícitamente — a través de las cantidades macroscópicas — de la posición \mathbf{x}_A y el tiempo t , es común utilizar una notación equivalente $f_\gamma^{eq}(\mathbf{x}_A, t) = f_\gamma^{eq}(\rho, \mathbf{u})$.

Las variables macroscópicas de interés se obtienen de las siguientes expresiones discretas:

$$\rho(\mathbf{x}_A, t) = \sum_{\gamma \in \mathcal{N}_q} f_\gamma(\mathbf{x}_A, t) \quad , \quad (\rho \mathbf{u})(\mathbf{x}_A, t) = \sum_{\gamma \in \mathcal{N}_q} \mathbf{c}_\gamma f_\gamma(\mathbf{x}_A, t) \quad (2.22)$$

con $\mathcal{N}_q = \{0, 1, 2, \dots, q-1\}$ un conjunto de índices que identifica las q velocidades discretas del esquema LBM. Las expresiones (2.22) no incluyen explícitamente los factores ω_γ de la cuadratura de integración, están contenidos implícitamente en $f_\gamma(\mathbf{x}_A, t)$, dada la definición de f_γ^{eq} en (2.18) y las ecuaciones de evolución (2.19).

De la expansión multi-escala del apéndice B, para encontrar consistencia con las ecuaciones de NS, la viscosidad cinemática debe satisfacer la siguiente relación (B.39):

$$\nu = c_s^2 \delta t \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (2.23)$$

Esta expresión fija un cota inferior sobre el parámetro de relajación, $\tau \geq 0.5$ ya que $\nu < 0$ es una condición macroscópica inestable. Existe una cota inferior² sobre τ por problemas de estabilidad numérica del método [79].

Otro resultado del análisis de consistencia con las ecuaciones de NS, es una relación para la presión (B.40):

$$P = \rho c_s^2 = \rho RT \quad (2.24)$$

con $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$. En la literatura es frecuente trabajar con variables adimensionales, en estos casos $c = 1$ y $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$. La expresión (2.24) es la ecuación de estado para un gas ideal, como T es constante se la denomina ecuación de estado isotérmica. $c_s = \sqrt{\frac{dP}{d\rho}} = \sqrt{RT}$ es la velocidad del sonido isotérmica, que difiere de la definición clásica a entropía constante [80]; c_s isotérmica es un caso especial del isentrópico con $\gamma = 1$.

En el LBM-BGK la viscosidad volumétrica no es un parámetro libre del problema, el segundo coeficiente de viscosidad $\lambda = 0$ (ver (A.35) y (A.38), en comparación con el resultado (B.38)). De los resultados mostrados en el apéndice B, donde se analiza consistencia del LBM-BGK con las ecuaciones de NS, se realizan diferentes aproximaciones

²En la mayoría de los casos analizados con el LBM-SRT se utiliza $\tau_\nu > 0.53 - 0.58$ por problemas de estabilidad numérica. Este límite inferior depende de cada problema que se analiza, el método de condición de borde influye en el valor mínimo.

despreciando términos $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$ o superior. Estas aproximaciones son consecuentes con la expresión (2.6) para f^{eq} . Luego el LBM-BGK resuelve de manera asintótica la ecuación macroscópica de NS a bajos Ma.

El procedimiento descrito para encontrar el conjunto de velocidades y pesos discretos que permiten evaluar con una precisión deseada la expresión (2.4) puede aplicarse para encontrar otros esquemas de velocidades. Surgen de manera directa los esquemas D1Q3, D2Q9 y D3Q27. Otros esquemas adicionales como el D3Q15 y D3Q19 se pueden encontrar utilizando consideraciones de simetría [18]. Es posible también obtener conjuntos de velocidades discretas utilizando argumentos diferentes al de simetría [75, 81]. En la sección C.1 se muestran los esquemas de velocidad bidimensionales y tridimensionales utilizados en éste trabajo.

Espaciamiento de grilla δx y paso temporal δt . La expresión (2.23) se puede reescribir en términos del número de Mach (2.5) y el número de Reynolds (Re) como:

$$\text{Ma} = \text{Re} \frac{\delta \hat{x}}{\sqrt{3}} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (2.25)$$

donde el Re se define como:

$$\text{Re} = \frac{UL}{\nu} \quad (2.26)$$

una relación entre las fuerzas de inercia y las de origen viscoso. U y L son una velocidad y longitud característica del problema, y $\delta \hat{x} \sim \frac{1}{N}$ es el espaciado no dimensional de grilla, con N el número de nodos de grilla en L .

El Ma debe estar acotado a valores bajos tal que se satisfaga una de las hipótesis fundamentales de la derivación. Luego de la relación (2.25), abordar problemas a Re altos es posible por dos vías: disminuir el valor de $\tau \rightarrow \frac{1}{2}$, o incrementar el número de nodos de grilla. La primera opción tiene un límite inferior por estabilidad numérica, dependiente del modelo LBM y el esquema de velocidad; la segunda opción incrementa notablemente el costo computacional.

La simulación de flujos de fluido compresibles con el LBM-SRT carece de sentido práctico. Considerando aire como el gas a modelar, con $c_s \simeq 300 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $\nu \simeq \times 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ y $(\tau - \frac{1}{2}) \sim 1 \times 10^{-2}$, se obtiene $\delta t \simeq 1 \times 10^{-8}$ y $\delta x \sim 1 \mu\text{m}$. En problemas cuasi—incompresibles como se presenta en secciones siguientes, c es un parámetro del problema, no tiene relación con la velocidad del sonido y caracteriza la velocidad a la que se transporta información entre los nodos lattice. Se elige tal que el número de Ma de la grilla $\frac{U}{c_s} \lesssim 0.25$.

2.1.1.1. Algunas restricciones del modelo LBM-BGK

Si bien el LBM-BGK es uno de los modelos más simples y utilizados, presenta una serie de problemas y restricciones asociados a la utilización de un único parámetro de relajación τ .

Se pueden distinguir dos problemas asociados a la descripción incompleta o limitada de las ecuaciones de NS. Por un lado el coeficiente de viscosidad volumétrica (o bulk viscosity), como se muestra en la sección B.2, no es un parámetro del problema ya que adopta un valor fijo. Por otro lado, cuando se abordan problemas no isotérmicos donde es de interés recuperar las ecuaciones de energía, se obtienen restricciones en el número de Prandtl ($Pr = 1$) asociadas al modelo de colisiones BGK. En especial se obtiene un

valor constante que no concuerda con la BE y con los datos experimentales para gases mono-atómicos, $Pr \simeq \frac{2}{3}$ [12, 13].

Otro inconveniente asociado al modelo LBM-BGK está vinculado a una representación inexacta de los bordes. Esto es observado cuando se utilizan condiciones de borde del tipo bounce-back [82, 83]. En especial, la localización del borde depende de la viscosidad. El error en la localización del borde es cuadrático en τ (o ν), siendo un problema considerable en flujo de Stokes o a números de Reynolds muy bajos. Debido a la falta de precisión con que se determina la posición del borde en el modelo LBM-BGK con condiciones de borde tipo bounce-back, no es posible alcanzar convergencia de resultados cuando la grilla es refinada [83]. Este inconveniente es observado también en el modelo ELBM.

2.1.1.2. Implementación

Existen diferentes estrategias para evolucionar en el algoritmo LBM. La forma clásica presentada en la literatura consiste en recorrer todos los nodos de la grilla, y para cada dirección $i \in \mathcal{N}_q$ de velocidad discreta evaluar localmente (2.20). Luego mediante (2.21) transferir en un proceso no local a los nodos primeros vecinos según la dirección de velocidad. En $\{LBM\}$ para el LBM-BGK se realiza un procedimiento inverso, para cada nodo de la grilla y para toda dirección $i \in \mathcal{N}_q$ de velocidad discreta se evalúan todas las variables locales a tiempo $t + \delta t$. La transferencia de datos es desde los nodos primeros vecinos hacia el nodo local.

Como se comenta en la sección 1.1, en los problemas típicos que se analizan en este trabajo, el dominio computacional está formado por un arreglo de grillas regulares. Es posible evaluar las ecuaciones (2.20) y (2.21) sobre los nodos \mathcal{N}_F , o sobre todos los nodos de la grilla $\mathcal{N}_F \cup \mathcal{N}_s$. En general la segunda opción es más simple y eficiente computacionalmente, ya que se evoluciona sobre todos los nodos de cada grilla computacional sin distinción alguna respecto al conjunto que pueda pertenecer. Luego se aplican correcciones sobre algunos nodos particulares, frecuentemente nodos que pertenecen a \mathcal{N}_b , para imponer condiciones de borde u otra condición de interés. Este procedimiento es particularmente simple ya que el algoritmo es explícito y utiliza variables locales, facilitando su implementación y paralelización. La eficiencia computacional se mantiene siempre que $|\mathcal{N}_f| \gg |\mathcal{N}_b \cup \mathcal{N}_s|$, si esto no se cumple es menos costoso evolucionar únicamente sobre los nodos que pertenecen a \mathcal{N}_F .

2.2. Ecuación generalizada de lattice Boltzmann LBM-MRT.

Con intención de eliminar los problemas asociados a las restricciones en grados de libertad del LBM-BGK surgieron propuestas que generalizan los modelos de lattice Boltzmann. La ecuación generalizada de lattice Boltzmann, propuesta inicialmente por d’Humières [25], es introducida como una ecuación de evolución de la dinámica de un sistema con un número finito de momentos de f en espacio y tiempo discretos. Propuestas equivalentes derivan la ecuación generalizada partiendo de una expresión en diferencias de la LBE linealizada [84, 85]. Estas propuestas de modelos pseudo-cinéticos tienen como objetivo introducir una descripción generalizada que involucre suficientes parámetros libres, permitiendo ajustar el modelo y evitar los problemas elementales del LBM-BGK. Los parámetros libres del modelo son: múltiples tiempos de relajación y coeficientes de ajuste para determinar la función de equilibrio, que en algún límite de interés, brinde consistencia

con las ecuaciones de NS. La introducción de múltiples tiempos de relajación da origen a la denominación de éstos métodos, MRT (por multiple relaxation times).

Para simplificar la notación se reescribe (2.19) en forma vectorial:

$$\mathbf{f}^* - \mathbf{f} = \mathcal{C} (\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}) \quad (2.27)$$

con \mathcal{C} una matriz de colisiones del LBM, y las funciones distribución de densidad de probabilidad se escriben en forma vectorial como:

$$\begin{aligned} \mathbf{f} &\equiv [f_0(\mathbf{x}_A, t), \dots, f_{q-1}(\mathbf{x}_A, t)]^T, & \mathbf{f}^{eq} &\equiv [f_0^{eq}(\mathbf{x}_A, t), \dots, f_{q-1}^{eq}(\mathbf{x}_A, t)]^T \\ \mathbf{f}^* &\equiv [f_0(\mathbf{x}_A + \mathbf{c}_0 \delta t, t + \delta t), \dots, f_{q-1}(\mathbf{x}_A + \mathbf{c}_{q-1} \delta t, t + \delta t)]^T \end{aligned} \quad (2.28)$$

La expresión (2.27) se generaliza considerando \mathcal{C} como un operador completo. Luego en la evolución temporal cada componente de \mathbf{f} tiene contribuciones de las demás a través de las colisiones. \mathcal{C} debe satisfacer las propiedades del operador $\mathcal{Q}(f, f)$ [13] presentadas en la introducción del capítulo 1. Si $\mathcal{C} = \frac{1}{\tau} \mathbf{I}$ con \mathbf{I} la identidad, se recupera el LBM-BGK.

Si \mathcal{C} puede diagonalizarse utilizando \mathbf{M} , un arreglo de sus autovectores; (2.27) se puede expresar como:

$$\mathbf{f}^* = \mathbf{M}^{-1} [\mathbf{m} + \mathbf{S} (\mathbf{m} - \mathbf{m}^{eq})] \quad (2.29)$$

con $\mathbf{S} = \mathbf{M} \mathcal{C} \mathbf{M}^{-1} = \text{diag}(s_0, \dots, s_{q-1})$ una matriz diagonal de autovalores de \mathcal{C} , s_i , $i \in \mathcal{N}_q$ son los tiempos o parámetros de relajación. Por simplicidad $\mathbf{m} = \mathbf{m}(\mathbf{x}_A, t)$ y $\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}_A, t)$, con:

$$\mathbf{m}(\mathbf{x}_A, t) \equiv \mathbf{M} \mathbf{f}(\mathbf{x}_A, t), \quad \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}_A, t) \equiv \mathbf{M} \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}_A, t) \quad (2.30)$$

El modelo de colisiones en el LBM-MRT conserva la característica de relajación al equilibrio del LBM-BGK, aunque la relajación es ahora en otras variables, \mathbf{m} . La matriz de transformación \mathbf{M} , mapea un vector en el espacio \mathbb{V} donde viven las \mathbf{f} a otro vector en el espacio de los momentos, \mathbb{M} . En el LBM-MRT el proceso de propagación (streaming) se realiza en el espacio \mathbb{V} , mientras que el de colisiones se realiza en el espacio \mathbb{M} de los momentos.

La construcción de \mathbf{M} se efectúa tal que sus filas ϕ_i formen una base ortogonal utilizando combinaciones de $c_{i,j}$; $i = 0, \dots, q-1$, $j = 1, \dots, d$. Esta combinación se segmenta en dos grupos: los *momentos hidrodinámicos* derivados de las cantidades conservadas, y los *momentos cinéticos* de las cantidades no conservadas. Los momentos están relacionados con el operador de colisiones, tienen un significado físico, representan cantidades hidrodinámicas y sus flujos. Algunos parámetros de relajación se relacionan con los coeficientes de transporte de las ecuaciones macroscópicas, mientras que otros contribuyen con la estabilidad numérica del método. La relación entre los parámetros de relajación y los coeficientes de transporte se encuentra requiriendo que el modelo sea consistente con las ecuaciones macroscópicas de NS, a través de la expansión multi-escala de la LBE (como se muestra en el apéndice B). Relaciones para los demás parámetros se obtiene siguiendo criterios de estabilidad numérica, isotropía, e invariancia Galileana como presenta Lallemand et al. [31]. La independencia lineal de los vectores garantiza que \mathbf{M} es invertible.

No es una elección directa decidir cual es la mejor combinación para construir \mathbf{M} . Son necesarias varias componentes, en especial los momentos asociados a las cantidades macroscópicas conservadas. Para especificar el resto de las componentes de \mathbf{M} existen diferentes propuestas en la literatura: polinomios de Hermite [27–29, 32] o procedimiento de Gram-Schmidt [30, 31]. En este trabajo se utiliza exclusivamente el método presentado

en [30, 31] con algunas variantes en cuanto a la elección de los parámetros de ajuste elegidos.

Bouzidi et al. [30] obtiene \mathbf{M} siguiendo un procedimiento de Gram-Schmidt utilizando combinaciones de $c_{i,j}$ o de polinomios de Hermite. La ortogonalización se realiza siguiendo un ordenamiento prefijado de los vectores propuestos. Primero se consideran los momentos conservados, y luego los no conservados en un orden preestablecido.

Por motivos de claridad, en la sección 2.2.1 a continuación, se brindan detalles sobre el modelo LBM-MRT utilizando un esquema de velocidad D2Q9. Detalles y resultados de modelos tridimensionales son presentados en el Apéndice C.

2.2.1. LBM-MRT esquema de velocidad D2Q9

Se busca \mathbf{M} utilizando el método de ortogonalización de Gram-Schmidt [30]. Inicialmente se consideran las cantidades conservadas en el modelo isotérmico: masa y cantidad de movimiento.

$$\begin{aligned}
 \sum_{i \in \mathcal{N}_q} f_i &= \phi_{1,i} f_i = \rho \quad ; \quad \phi_1 = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \\
 \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i,x} f_i &= \phi_{4,i} f_i \quad ; \quad \hat{\phi}_4 = (0, c, c, 0, -c, -c, -c, 0, c) \\
 \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i,y} f_i &= \phi_{6,i} f_i \quad ; \quad \hat{\phi}_6 = (0, 0, c, c, c, 0, -c, -c, -c)
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

Los momentos asociados forman un conjunto de vectores ortogonales, una base del subespacio hidrodinámico de la matriz de colisiones para el problema isotérmico 2D. La conservación de la energía no se considera de manera explícita como un momento conservado en los problemas isotérmicos. Esta elección es la más frecuente en la literatura [31], aunque existen casos donde la energía se considera explícitamente como un momento conservado [86].

Luego en el proceso de ortogonalización se introducen, en un orden prefijado, otros momentos relacionados a cantidades no conservadas en el fluido. La elección de los momentos no conservados no es única, y el orden en que se consideran es arbitrario. En este trabajo se utiliza la propuesta de Bouzidi et al. [30], el orden elegido es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 \hat{\phi}_{2_i} &= c_{i,x}^2 + c_{i,y}^2 \quad , \quad \hat{\phi}_2 = (0, c^2, 2c^2, c^2, 2c^2, c^2, 2c^2, c^2, 2c^2) \\
 \hat{\phi}_{5_i} &= c_{i,x} (c_{i,x}^2 + c_{i,y}^2) \quad , \quad \hat{\phi}_5 = (0, c^3, 2c^3, 0, -2c^3, -c^3, -2c^3, 0, 2c^3) \\
 \hat{\phi}_{7_i} &= c_{i,y} (c_{i,x}^2 + c_{i,y}^2) \quad , \quad \hat{\phi}_7 = (0, 0, 2c^3, c^3, 2c^3, 0, -2c^3, -c^3, -2c^3) \\
 \hat{\phi}_{8_i} &= c_{i,x}^2 - c_{i,y}^2 \quad , \quad \hat{\phi}_8 = (0, c^2, 0, -c^2, 0, c^2, 0, -c^2, 0) \\
 \hat{\phi}_{9_i} &= c_{i,x} c_{i,y} \quad , \quad \hat{\phi}_9 = (0, 0, c^2, 0, -c^2, 0, c^2, 0, -c^2) \\
 \hat{\phi}_{3_i} &= (c_{i,x}^2 + c_{i,y}^2)^2 \quad , \quad \hat{\phi}_3 = (0, c^4, 4c^4, c^4, 4c^4, c^4, 4c^4, c^4, 4c^4)
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

Los vectores presentados en (2.32) tienen un significado físico relacionado a los momentos de f_i : $\hat{\phi}_2$ con la energía; $\hat{\phi}_5$ y $\hat{\phi}_7$ corresponden a flujos de energía en la dirección x e y respectivamente; $\hat{\phi}_8$ y $\hat{\phi}_9$ corresponden a componentes en la diagonal del tensor de tensiones y fuera de esta respectivamente; $\hat{\phi}_3$ esta relacionado al cuadrado de la energía $\hat{\phi}_2$. Para identificar estas cantidades se recomienda ver la sección A.3, donde se muestra una conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de la dinámica del fluido .

Si siguiendo el procedimiento de Gram-Schmidt en el orden prefijado se obtiene:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \\ \phi_7 \\ \phi_8 \\ \phi_9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & 2 & -1 & 2 & -1 & 2 & -1 & 2 \\ 4 & -2 & 1 & -2 & 1 & -2 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 1 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

El orden de las columnas en \mathbf{M} no se corresponde con las expresiones presentadas en la literatura. Esto se debe al esquema de velocidades adoptado en el modelo $D2Q9$ (ver apéndice C.1), en especial al ordenamiento elegido para identificar las velocidades discretas. La disposición de las filas en \mathbf{M} sigue el criterio de Lallemand et al. [31].

Las colisiones en el espacio de los momentos producen cambios directos únicamente en las cantidades no conservadas. Aunque los momentos conservados no son afectados de manera directa por las colisiones, si lo son de manera indirecta a través de cambios en sus gradientes (momentos de alto orden). El modelo de colisiones presentado en (2.29) establece que los momentos no conservados relajan de manera lineal a momentos de equilibrio que deben determinarse. Este comportamiento cumple con uno de los requerimientos que debe satisfacer el modelo de colisiones. Los momentos de equilibrio deben garantizar consistencia con las ecuaciones de NS en algún límite de interés. En este trabajo se utiliza como momentos de equilibrio una transformación de la función distribución de equilibrio al espacio de momentos:

$$\begin{aligned} \phi_2^{eq} &= -\rho [2c^2 - 3(u_x^2 + u_y^2)] \\ \phi_3^{eq} &= c^2 \rho [c^2 - 3(u_x^2 + u_y^2)] \\ \phi_5^{eq} &= -c^2 \rho u_x \\ \phi_7^{eq} &= -c^2 \rho u_y \\ \phi_8^{eq} &= \rho (u_x^2 - u_y^2) \\ \phi_9^{eq} &= \rho u_x u_y \end{aligned} \quad (2.34)$$

Esta elección permite recuperar el LBM-BGK cuando $s_i = 1/\tau$, $i = 1, \dots, q$. La elección de $\hat{\phi}_2$, $\hat{\phi}_8$, y $\hat{\phi}_9$ junto con los momentos de equilibrio definidos, no es casual, contribuyen de manera directa en la consistencia del LBM-MRT con las ecuaciones de NS. Una alternativa para encontrar \mathbf{m}^{eq} es el procedimiento presentado en [31], donde proponen una forma base para \mathbf{m}^{eq} con una serie de parámetros de ajuste a determinar. Estos se obtienen exigiendo que se satisfagan criterios de dispersión, isotropía e invariancia Galileana. La determinación del LBM-MRT siguiendo este procedimiento es el que mayor cantidad de parámetros de ajuste posee.

Con un procedimiento equivalente al presentado en esta sección, es posible obtener \mathbf{M} para los modelos D3Q15 y D3Q19. En el Apéndice C, secciones C.2 y C.3 se presentan detalles y resultados adicionales para estos esquemas de velocidad en el LBM-MRT.

Elección de parámetros de relajación Los parámetros de relajación (s_0, \dots, s_{q-1}) es posible obtenerlos parcialmente desde la expansión multi-escala de la LBE (apéndice B), o siguiendo la propuesta de Lallemand et al. [31]. En esta última, los parámetros de

relajación se obtienen analizando la dependencia de un vector de onda \mathbf{k} con los coeficientes de transporte. Si se utiliza la expansión multi-escala de la LBE, es factible encontrar relaciones para s_8 , s_9 y s_2 , relacionados con viscosidad cinemática y segundo coeficiente de viscosidad.

Un rango aceptable para estos parámetros es: $0 < s_i < 2, i = 2, 8$. $s_9 = s_8$ para forzar isotropía [31] e identificar los términos asociados a la viscosidad cinemática en las ecuaciones de NS. Este resultado es posible recuperarlo también desde la expansión multi-escala de la LBE, ver ecuación (B.74) y (B.75). Los tres parámetros restantes s_3 , s_5 , y s_7 no están relacionados con los coeficientes de transporte a bajo orden en \mathbf{k} , pero afectan la estabilidad numérica del método. Un rango aceptable para éstos parámetros es: $1 < s_i < 2, i = 3, 5, 7$. Algunos valores típicos son: $1.1 \leq s_3 \leq 1.6$, y $s_5 = s_7 = 1.9$.

El método presentado por Lallemand et al. [31] utiliza bordes periódicos en todas las direcciones para estimar rangos y valores típicos en los parámetros del problema. Si bien presentan una estimación y cotas de utilidad, en casos arbitrarios no necesariamente representan valores óptimos.

2.2.1.1. Implementación

La implementación del LBM-MRT es computacionalmente más costosa que las del LBM-SRT. La principal diferencia se debe al tratamiento particular del proceso de colisiones y propagación. El primero se realiza en el espacio de los momentos y el segundo en el de las funciones de distribución \mathbf{f} . Toda función de distribución en alguna dirección i particular a tiempo $t + \delta t$, depende de una combinación de las demás (ver (2.27) y (2.29)) y de las variables macroscópicas a tiempo t . Es computacionalmente menos costoso hacer evaluaciones locales de las colisiones y luego propagar hacia los primeros vecinos en cada dirección i . Conocidas las variables macroscópicas se pueden evaluar los momentos de equilibrio (2.30) y (2.34). Determinado \mathbf{S} con los parámetros de relajación elegidos y obtenida una expresión para \mathbf{M}^{-1} , se pueden encontrar de (2.29) las funciones de distribución para propagar a los nodos primeros vecinos.

Los modelos LBM-MRT tienen un costo computacional superior a los LBM-SRT, en d’Humières et al. [37] estiman que pueden ser implementados con un 15-20% de costo adicional. En las implementaciones realizadas en este trabajo no se realizan comparaciones precisas de costo computacional entre los modelos utilizados.

2.3. Esquemas LBM cuasi—incompresible

Los modelos LBM presentados son consistentes con las ecuaciones de NS compresibles. Cuando es de interés analizar problemas de flujo incompresible los modelos presentados no son adecuados. El LBM es naturalmente compresible, la incompresibilidad se introduce como una hipótesis sobre el comportamiento de la densidad del fluido, dando como resultado modelos cuasi—incompresibles.

En las siguientes secciones se presentan modelos cuasi—incompresibles utilizados en el LBM-BGK y LBM-MRT.

2.3.1. LBM-BGK

He et al. [38] proponen correcciones al LBM-BGK para modelar problemas de flujo cuasi—incompresible. Si se asumen pequeñas perturbaciones en la densidad:

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho \quad (2.35)$$

con ρ_0 una densidad constante y $\delta\rho$ una fluctuación en la densidad $\mathcal{O}(\text{Ma}^2)$ cuando $\text{Ma} \rightarrow 0$ [87]. Sustituyendo (2.35) en (2.18) y despreciando términos proporcionales a $\delta\rho \left(\frac{\mathbf{u}}{c_s}\right)$, y $\delta\rho \left(\frac{\mathbf{u}}{c_s}\right)^2$ de orden $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$ o superior, se encuentra una función de equilibrio discreta para flujo cuasi—incompresible:

$$f_\gamma^{eq} = \omega_\gamma \left[\rho + \rho_0 \left(\frac{3(\mathbf{c}_\gamma \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(\mathbf{c}_\gamma \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c^2} \right) \right] \quad (2.36)$$

Con estas consideraciones, de (2.22) las variables macroscópicas del problema se pueden escribir:

$$\rho(\mathbf{x}_A, t) = \sum_{\gamma \in \mathcal{N}_q} f_\gamma \quad , \quad (\rho_0 \mathbf{u})(\mathbf{x}_A, t) = \sum_{\gamma \in \mathcal{N}_q} \mathbf{c}_\gamma f_\gamma \quad (2.37)$$

Del análisis multi-escala de la LBE para este modelo es posible recuperar las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles. Siguiendo este procedimiento [38], se obtiene la siguiente expresión para la conservación de la masa:

$$\frac{1}{T} \frac{\partial P'}{\partial t'} + \frac{c_s}{L} \nabla' \cdot \mathbf{u}' = 0 \quad (2.38)$$

con:

$$P' = \frac{P}{c_s^2} \quad ; \quad t' = \frac{t}{T} \quad ; \quad \nabla' = L \nabla \quad ; \quad \mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u}}{c_s} \quad (2.39)$$

donde $P = \frac{p}{\rho_0}$, L y T son longitudes y tiempos característicos del problema respectivamente. En flujo estacionario $\frac{\partial P}{\partial t} = 0$, se satisface de manera exacta la condición de incompresibilidad. En el caso de flujo no estacionario, para mantener la condición de flujo cuasi—incompresible se requiere:

$$T \gg \frac{L}{c_s} \quad (2.40)$$

esto implica que el primer sumando de (2.38) es despreciable frente a los otros términos. Esto es, el tiempo T durante el cual ocurre un cambio macroscópico, en el rango de distancia L , debe ser mayor que el tiempo $\frac{L}{c_s}$ que toma una perturbación de presión en viajar una distancia L . De las condiciones anteriores, la variación temporal y espacial de la presión debe estar acotada para que las hipótesis de cuasi-incompresibilidad sean válidas.

2.3.2. LBM-MRT

En el LBM-MRT los momentos de equilibrio no conservados del modelo D2Q9 se obtienen parcialmente de la función de equilibrio propuesta en (2.36) con algunas correcciones para garantizar que se recuperan las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles. Siguiendo

este procedimiento se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \phi_2^{eq} &= 2\rho c^2 + 3\rho_0 (u_1^2 + u_2^2) \\
 \phi_3^{eq} &= \rho c^4 - 3\rho_0 c^2 (u_1^2 + u_2^2) \\
 \phi_5^{eq} &= -c^2 \rho_0 u_1 \\
 \phi_7^{eq} &= -c^2 \rho_0 u_2 \\
 \phi_8^{eq} &= \rho_0 (u_1^2 - u_2^2) \\
 \phi_9^{eq} &= \rho_0 u_1 u_2
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

En este caso los momentos de equilibrio para las cantidades conservadas son:

$$\begin{aligned}
 \phi_1^{eq} &= \rho_0 \\
 \phi_4^{eq} &= \rho_0 u_1 \\
 \phi_6^{eq} &= \rho_0 u_2
 \end{aligned} \tag{2.42}$$

Se puede mostrar mediante expansión multi-escala que estas expresiones de equilibrio recuperan la ecuación de NS incompresible. El procedimiento es idéntico al presentado en el apéndice B para el caso compresible. Es posible comprobar que los momentos de equilibrio para los momentos no conservados difieren respecto a los obtenidos utilizando (2.36). La diferencia está en el signo del primer término de ϕ_2^{eq} . Esta modificación de signo permite obtener consistencia con las ecuaciones de NS incompresibles.

Comparando las expresiones de los momentos de equilibrio con las presentada en Du et al. [39], se observan algunas pequeñas diferencias en las definiciones, en especial en ϕ_3^{eq} . Esto no altera las ecuaciones macroscópicas que se recuperan del modelo propuesto. Los momentos de equilibrio presentados en Lallemand et al. [31] se obtienen bajo la hipótesis de asumir las fluctuaciones en la densidad desacopladas de las ecuaciones de momento, esto es similar al modelo cuasi—incompresible presentado por He et al. [38], sección 2.3.1. Luego el modelo LBM-MRT de Lallemand et al. [31] es uno cuasi—incompresible.

2.4. Precisión espacial y temporal

Cuando se habla de precisión espacial y temporal en el LBM se hace referencia al orden de convergencia de algún error en la determinación de variables macroscópicas ante variaciones en la discretización espacial y temporal respectivamente. La precisión espacial con que se determinan las variables macroscópicas ρ y \mathbf{u} no es un resultado trivial en el LBM. No existe una ecuación diferencial parcial (PDE) que satisfaga ρ y \mathbf{u} de manera exacta.

En el LBM se utilizan métodos analíticos y numéricos para verificar la precisión espacial y temporal del método. Analíticamente es posible mostrar que ρ y \mathbf{u} satisfacen aproximadamente alguna PDE. Esta idea es presentada por Junk et al. [40, 41] donde extienden al LBM un análisis asintótico (utilizado en análisis numérico para evaluar esquemas en diferencias) para recuperar términos del error en la aproximación a ρ y \mathbf{u} . Un análisis equivalente es presentado por Sone [10, 88] para la ecuación de Boltzmann. En [42, 43] también pueden encontrarse resultados analíticos relevantes sobre precisión del LBM. Junk et al. [40, 41] presentan como resultado relevante: precisión temporal de primer orden, y precisión espacial de segundo orden para las variables macroscópicas. Las demás propuestas citadas coinciden con estas estimaciones.

Numéricamente se muestra la precisión espacial evaluando la relación de convergencia de algún error, adecuadamente definido (en general alguna función de la velocidad), frente a la discretización espacial. La determinación numérica del orden de precisión es extensamente utilizada en el LBM, en especial para verificar el correcto funcionamiento de los algoritmos. También se utiliza para comprobar el orden de precisión de los métodos para resolver el problema en los bordes, es deseable que sean del mismo orden de precisión que el LBM, tal que no arruine su precisión intrínseca. En la sección 5.4 se prueba de manera numérica el orden de precisión de los métodos utilizados y algoritmo implementado, $\{LBM\}$. Se analiza el problema de Poiseuille 3D con solución analítica conocida. Se utiliza el esquema de velocidad D3Q15, D3Q19 y D3Q27 con los modelos LBM-BGK, y el esquema D3Q15 con el modelo LBM-MRT, en todos los casos los modelos son cuasi—incompresible. De los resultados presentados se puede observar, como es esperable de los resultados analíticos, una variación cuadrática del error de aproximación a la velocidad.

Luego el LBM brinda un método numérico explícito con precisión temporal y espacial de primer y segundo orden respectivamente, que resuelve de manera asintótica a bajos números de Ma las ecuaciones de NS compresibles.

2.5. Consistencia del LBM con las ecuaciones de NS

Cuando se trabaja con modelos cinéticos como el LBM es deseable disponer de un método sistemático que permita verificar consistencia con las ecuaciones de NS. En este trabajo se tiene interés en modelos que representan un comportamiento macroscópico equivalente a las ecuaciones de NS. Es decir, el comportamiento (macroscópico) en algún límite particular del LBM es comparable con las ecuaciones de NS. Se dice comparable ya que no es exacto, como se muestra en el Apéndice B.

Para evaluar la consistencia de los modelos cinéticos con las ecuaciones de NS existen al menos dos métodos extensamente utilizados en la literatura. El más empleado es el método de análisis multi-escala basado³ en el de expansión de Chapman-Enskog (ChE) [11–13]. El análisis asintótico de ChE es un método de perturbación (multi-escala) donde se analizan las diferentes escalas del problema representadas mediante algún parámetro característico. Se utiliza un parámetro proporcional al número de Knudsen Kn ; una relación entre el camino libre medio entre sucesivas colisiones y una escala espacial característica del problema. $Kn \rightarrow 0$ corresponde a gases densos, $Kn \rightarrow \infty$ corresponde a gases donde no existen interacciones entre las partículas.

El otro método, denominado análisis hidrodinámico generalizado [31], está basado en la ecuación generalizada de lattice Boltzmann [25] construida en el espacio de los momentos (LBM-MRT). Con éste método no se recuperan las ecuaciones macroscópicas desde el modelo LBE. Por el contrario se analiza el comportamiento hidrodinámico de los modos del operador linealizado de la LBE. Los resultados y restricciones en los parámetros y tiempos de relajación obtenidos por la expansión multi-escala de ChE también son recuperados por este método. Adicionalmente, buscando isotropía, invariancia Galileana y estabilidad en los modelos LBM se obtienen cotas y valores recomendados sobre los demás parámetros, en especial los relacionados a los momentos no conservados.

Una alternativa poco utilizada para evaluar consistencia del LBM con las ecuaciones de

³Se dice que el método está basado en el de Chapman-Enskog ya que este es utilizado para analizar soluciones de la ecuación de Boltzmann. El análisis multi-escala utilizado en modelos cinéticos puede considerarse una versión discreta del método de Chapman-Enskog.

NS es presentada por Inamuro et al. [42] donde utilizan un método basado en la expansión S [10].

En el Apéndice B se muestra un análisis multi-escala de la LBE utilizando los modelos de colisiones BGK y MRT. Se muestra consistencia del LBM-BGK y LBM-MRT con las ecuaciones de NS compresibles; se presentan las hipótesis principales, y un procedimiento detallado para recuperar los resultados de interés.

2.6. Comentarios y conclusiones

La dinámica de las variables en el LBM está determinada por una ecuación de evolución simple y explícita, la LBE presentada en (2.19). Se obtiene como una discretización en el tiempo y en el espacio de fases de la BE con algún operador de colisiones particular. Dado el número reducido de velocidades y la vinculación que existe entre las variables, la LBE se evalúa en una grilla regular uniforme (*lattice*). El conjunto de velocidades — un conjunto pequeño en el espacio de fases, dos velocidades y en unas pocas direcciones para los casos mostrados en este capítulo — tiene la simetría suficiente para obtener de manera precisa los momentos hidrodinámicos. Otro ingrediente del LBM es la función distribución de equilibrio, debe garantizar los invariantes de colisiones (ecuación (A.32)) y consistencia con las ecuaciones de NS. La evolución de \mathbf{f} se determina mediante una evaluación local y otra no local de las variables, esto se explicita en las ecuaciones (2.20) y (2.21) que representan el proceso de colisión (local y no lineal) y de distribución o streaming (no local) respectivamente.

De la sección 2.4, el LBM tiene precisión espacial de segundo orden y temporal de primer orden. La simplicidad y precisión del LBM, una ecuación explícita que contiene evaluaciones locales y no locales solo con primeros vecinos en cada dirección de velocidad, representan una de sus mayores virtudes para competir con los métodos clásicos (FDM, FVM, FEM, SM) utilizados para resolver el problema de fluidos en su descripción macroscópica. Además las implementaciones de la LBE utilizando técnicas de HPC (High Performance Computing) brinda buenas performance computacionales.

En el estado actual del LBM, no existen motivos para no utilizar de manera casi exclusiva el LBM-MRT en las implementaciones. La mayor flexibilidad del MRT, una recuperación completa de las ecuaciones de NS sin restricciones sobre la viscosidad volumétrica, mejores características de isotropía e invariancia Galileana, y un espectro más amplio de valores permitidos de tiempos de relajación — que incrementan la estabilidad numérica — lo posicionan en ventaja frente a los modelos LBM-SRT. La posibilidad de elegir un espectro más amplio de tiempos de relajación, en particular para el asociado a la viscosidad cinemática, permiten analizar problemas a un número de Reynolds (Re) más alto con un costo computacional (tamaño de grilla) menor al requerido por el LBM-SRT. Como se menciona en la sección 2.1.1, al analizar problemas a Re altos con restricciones en Ma , se obtienen limitaciones computacionales asociadas con el tamaño de grilla δx . Si Re se incrementa, es necesario reducir δx para mantener estabilidad numérica incrementando el costo computacional. Estos problemas se solucionan parcialmente utilizando métodos de refinamiento de grilla, un arreglo conveniente de grillas con diferente δx como se presentan en el Capítulo 5. Otra alternativa es disminuir el tiempo de relajación τ , existiendo un límite inferior asociado a la estabilidad numérica del método. Valores más pequeños de τ permiten incrementar Re para un mismo δx , con el LBM-MRT es posible utilizar valores más pequeños de τ que los factibles con el LBM-SRT por problemas de estabilidad numérica.

Dados los problemas de convergencia que se pueden encontrar al utilizar el LBM-BGK en combinación con condiciones de borde basadas en bounce-back, es preferible utilizar en todos los casos el LBM-MRT. Sin embargo, el costo computacional del LBM-MRT es por construcción siempre superior al LBM-SRT.

Más allá de las bondades mencionadas del LBM, tiene algunos inconvenientes asociados que se describen a continuación. Al trabajar con grillas cartesianas uniformes son necesarias condiciones de borde particulares para imponerlas en fronteras que no coinciden con la grilla. Si bien existe una variedad de métodos para tratar fronteras de geometría arbitraria y son bien entendidos (algunos de los utilizados se muestran en el Capítulo 3), la implementación es laboriosa, en especial cuando se analizan cuerpos en movimiento. El LBM es naturalmente un problema de evolución, por este motivo no es la elección más eficiente si se quieren resolver problemas donde se buscan soluciones estacionarias. Debido al truncamiento a bajo Ma en la ecuación de equilibrio, y a la consistencia con las ecuaciones de NS en el mismo límite, los modelos analizados del LBM resultan más apropiado para analizar problemas cuasi-incompresibles. La presión en el LBM se obtiene desde una ecuación de estado; mientras que en los métodos clásicos utilizados para resolver el problema de fluido incompresible en su representación macroscópica, la presión satisface una ecuación de Poisson. Esta ecuación tiene cierta dificultad numérica y se requieren métodos iterativos para resolverla.

Respecto a los esquemas de velocidad, en el caso 3D se implementa el D3Q15, D3Q19, y D3Q27, siendo el primero el más eficiente computacionalmente con un mínimo de 15 variables por nodo. Todos estos esquemas permiten recuperar las ecuaciones de NS; sin embargo, la forma funcional del error de truncamiento es diferente. Los errores numéricos son menos significativos y tienen mejor características de estabilidad mientras mayor sea el número de velocidades.

Capítulo 3

Condiciones de borde

Existen en la literatura diferentes propuestas para imponer condiciones de borde en el LBM. Desde métodos simples para imponer condiciones de borde sobre geometrías regulares, hasta métodos más generales que permiten tratar geometrías arbitrarias en movimiento.

El problema de fluidos analizado mediante LBM queda determinado especificando las variables mesoscópicas en la frontera. Las condiciones de borde en los problemas de fluido de interés deben satisfacer en general alguna restricción sobre las variables macroscópicas, adoptar algún valor particular prefijado o satisfacer cierto comportamiento (o ecuación adicional) en la frontera. La imposición de condiciones de borde macroscópicas en el LBM es un procedimiento sutil, deben imponerse restricciones sobre las variables mesoscópicas para recuperar valores correctos en la frontera. Típicamente, el número de variables en el problema ($f_i, i \in \mathcal{N}_q$ no especificadas en el borde) excede las condiciones macroscópicas; por lo tanto deben imponerse restricciones adicionales. Disponer de un método sistemático que permita imponer condiciones de borde en problemas de fluidos con geometría arbitraria es un objetivo que se persiguió desde las primeras aplicaciones en el LBM.

En esta tesis se implementan y utilizan dos tipos de condiciones de borde: Dirichlet y Sommerfeld. En las condiciones de borde tipo Dirichlet se especifica un valor de las variables macroscópicas de interés - velocidad o presión - en la frontera. Las de tipo Sommerfeld son implementadas para modelar una frontera abierta; estas son utilizadas para representar un dominio físico cuasi-infinito mediante un dominio computacionales finito. Son condiciones de borde donde no se impone un valor específico de las variables macroscópicas, se busca satisfacer alguna ecuación o condición macroscópica adicional en la frontera sin introducir perturbaciones ficticias en el dominio fluido.

Es posible separar los métodos para imponer condiciones de borde de Dirichlet en al menos tres tipos: basados en bounce-back (BB) [45–55], de bordes inmersos [89, 90], y de reconstrucción [56–58]. Siendo los primeros los más utilizados, por simplicidad en la implementación y por ser la primer propuesta histórica para imponer condición de borde Dirichlet en el LBM.

Existen diferentes propuestas en la literatura para imponer condiciones de borde en fronteras abiertas. En problemas de flujo cuasi—incompresible es posible dividir las propuestas en dos categorías: las formuladas en variables mesoscópicas [36, 91], y las formuladas en variables macroscópicas [59–62]. En el caso de flujo compresible se utilizan condiciones de borde absorbentes, o de no reflexión para representar fronteras abiertas¹.

¹En $\{LBM\}$ se implementaron condiciones de borde absorbentes, no se presentan en este trabajo ya que no se utilizan para resolver los problemas de interés.

Las condiciones de borde absorbentes imponen características de continuidad del dominio físico, absorbiendo las perturbaciones de origen físico o numérico sin generar reflexiones en la frontera. En el LBM se utilizan dos métodos para modelar fronteras absorbentes: condiciones de borde formuladas en características [72, 73], y las denominadas *absorbing layers* [92, 93]. Ambos métodos son extensiones de condiciones de borde utilizadas en métodos numéricos clásicos para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes o Euler compresibles [94–96].

En éste capítulo se muestran algunos de los métodos de condiciones de borde implementados en $\{LBM\}$ y utilizados para resolver los problemas de interés. En primer lugar se presentan métodos para imponer condiciones de borde de Dirichlet en fronteras de geometría regular. Luego se presentan los métodos utilizados en fronteras de geometría arbitraria no regulares. Por último se muestra un método utilizado para imponer condiciones de borde en fronteras abiertas.

3.1. Definición del problema en la frontera

En esta sección se introducen definiciones y nomenclatura de algunos conjuntos de nodos del dominio computacional en la región de las fronteras del problema. Se considera un cuerpo arbitrario que ocupa un espacio Ω con bordes cerrados $\partial\Omega$ inmerso en un flujo de fluido. Inicialmente y sin perder generalidad el cuerpo se considera en reposo. Luego se relaja esta condición y se presentan detalles para imponer condiciones de borde cuando el cuerpo tiene movimiento arbitrario.

En la figura 3.1 se muestra un esquema bidimensional del problema con detalles de una porción de la frontera, este esquema es equivalente al presentado en la figura 1.1a. Con círculos vacíos (\circ) se representan nodos dentro de la región Ω , estos se denominan *nodos sólidos* y pertenecen al conjunto $\mathcal{N}_s = \{\mathbf{x} \in \Omega\}$. Con círculos (\bullet) y cuadrados (\blacksquare) se representan nodos que pertenecen a la región del fluido Γ , estos nodos pertenecen al conjunto $\mathcal{N}_F = \{\mathbf{x} \notin \Omega\}$. Los nodos \blacksquare se denominan *nodos de borde* y pertenecen al conjunto $\mathcal{N}_b = \{\mathbf{x} : \exists (\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t) \in \Omega\}$. Los nodos (\bullet) pertenecen al conjunto $\mathcal{N}_f = \{\mathbf{x} : \nexists (\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t) \in \Omega\}$. Por definición $\mathcal{N}_F = \mathcal{N}_b \cup \mathcal{N}_f$. Los puntos sobre $\partial\Omega$ identificados con \diamond y denotados como *puntos del borde*, corresponden a la intersección entre la frontera y una línea ficticia que une dos nodos primeros vecinos en la dirección de alguna velocidad discreta como se muestra en la figura 3.1. Cada nodo en \mathcal{N}_b tiene asociado un conjunto de direcciones de velocidad, $\mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x}) = \{i : \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t \in \Omega\}$ con \bar{i} indicando la dirección opuesta a una velocidad con índice i .

Si el cuerpo tiene movimiento arbitrario respecto de la grilla, los conjuntos de nodos dependen del tiempo. Pueden existir geometrías donde el cuerpo es abierto y la frontera $\partial\Omega$ definida por una lámina delgada tal que $\mathcal{N}_s = \{\emptyset\}$. Salvo casos excepcionales, $\partial\Omega$ yace en alguna posición intermedia entre nodos de la grilla.

Todas las variables mesoscópicas (\mathbf{f}) en los nodos de \mathcal{N}_f están determinadas a tiempo $t + \delta t$ a través de la ecuación de evolución (2.21) (o (2.29) en el MRT). Los nodos en \mathcal{N}_b , por definición tienen algún nodo primer vecino en Ω . Estos requieren un tratamiento especial, no es posible utilizar de manera directa la ecuación de evolución (2.21) (o (2.29) en el MRT) para las direcciones $i \in \mathcal{N}_{Ib}$, es necesaria información en nodos que no pertenecen a \mathcal{N}_F . Considerando como ejemplo el nodo F con coordenadas $\mathbf{x}_F \in \mathcal{N}_b$, determinar $f_i(\mathbf{x}_F, t + \delta t) : i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x}_F)$ utilizando la ecuación de propagación (2.21) requiere de

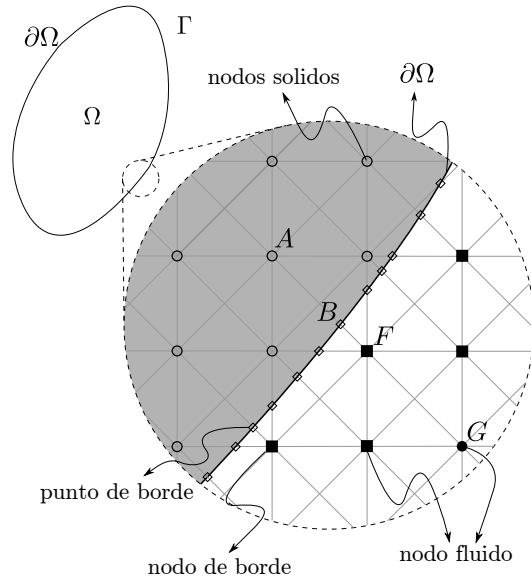


FIGURA 3.1: Detalle de una región del borde. Se muestra un cuerpo cerrado Ω con bordes $\partial\Omega$ inmerso en un fluido. Se presenta un detalle del borde y algunos nodos de interés de la grilla.

información de un nodo A con $\mathbf{x}_A \in \mathcal{N}_s$. Esta información es inexistente o ficticia² en la mayoría de los casos. Luego se debe disponer de algún método que brinde esta información de manera adecuada en los nodos de borde. Esto implica, garantizar que se satisfagan en $\partial\Omega$ las condiciones macroscópica impuestas con una precisión aceptable que no degrade la precisión intrínseca del LBM (ver sección 2.4). Los métodos que se utilizan para determinar este problema en los nodos de borde en el LBM se denominan de manera general como *métodos de condiciones de borde*.

La implementación de una condición de borde en el LBM puede ser pensada, en escala mesoscópica, como la introducción de un flujo de fluido artificial en Ω . Este flujo artificial introduce información necesaria para evolucionar correctamente en Γ y satisfacer las condiciones macroscópica en $\partial\Omega$. Cuando $\partial\Omega$ es una frontera física del problema, la descripción mesoscópica del fluido en el LBM permite a las "partículas" del fluido atravesar la superficie $\partial\Omega$ en ambas direcciones.

3.2. Condiciones de borde Dirichlet en fronteras de geometría regular

3.2.1. Condiciones de borde bounce-back estándar.

El método para imponer condiciones de borde denominado *bounce-back* es la primer propuesta en el LBM para imponer condiciones de borde Dirichlet de no deslizamiento macroscópico en la frontera (velocidad cero en $\partial\Omega$). Es introducido de manera heurística en el LGCA (Lattice Gas Cellular Automata), y analizado por primera vez en el LBM en [97, 98]. He et al. [44] presentan el método de bounce-back estableciendo sobre un nodo

²Puede existir un valor ficticio en A ya que por motivos de simplicidad en el algoritmo numérico puede evolucionarse (colisión + propagación) en todos los nodos del dominio computacional, inclusive sobre los nodos en Ω .

$\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$ la siguiente relación:

$$f_i(\mathbf{x}, t + \delta t) = \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) \quad , \quad i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x}) \quad (3.1)$$

Este método posiciona el borde efectivamente a la mitad de la distancia entre el nodo de borde \mathbf{x} considerado y un nodo sólido $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t \in \Omega$ con $i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x})$. Luego la representación del borde no es exacta, por este motivo suele denominarse en la literatura como *half-way bounce-back* o *mid-link bounce-back*. Existe una versión alternativa del método de bounce-back, denominada *full-way bounce-back*, donde la frontera se posiciona sobre un nodo de borde \mathbf{x} ; utilizando la siguiente relación:

$$f_i(\mathbf{x}, t) = \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) \quad \text{y} \quad \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) \quad , \quad i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x}) \quad (3.2)$$

Si quiere imponerse una velocidad macroscópica arbitraria \mathbf{u}_w sobre la frontera $\partial\Omega$, se utiliza una versión modificada de los métodos anteriores. Ladd [49] adiciona a la expresión (3.1) un término de corrección para satisfacer una velocidad \mathbf{u}_w en $\partial\Omega$:

$$f_i(\mathbf{x}, t + \delta t) = \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) + 6 \frac{\omega_i}{c^2} \rho (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_w) \quad , \quad i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x}) \quad (3.3)$$

En rigor la velocidad es impuesta en una posición intermedia entre dos nodos, según la expresión (3.1).

Se puede observar que los métodos de bounce-back presentados no asumen expresiones particulares del término de colisión en el LBM. Luego son independientes del operador de colisiones, pudiendo ser utilizado en el LBM-BGK o el LBM-MRT de manera indistinta sin tratamiento particular alguno.

La formulación e implementación del método es simple, sin embargo uno de los inconvenientes que presentan es una velocidad de deslizamiento no nula y dependiente de τ en el LBM-BGK [44]. Es posible aplicar el método de bounce-back en fronteras de geometría arbitraria no regular. Esto implica aproximar la frontera $\partial\Omega$ por una segmentada, con la consiguiente pérdida de precisión, en especial si el espaciamiento de grilla no es suficientemente pequeño.

Implementación: Si se impone velocidad cero sobre la frontera utilizando las expresiones (3.2) es posible aplicarla para todas las direcciones de velocidad discretas. Esta es de las mayores ventajas del método ya que su implementación es la más simple, el algoritmo es independiente de la orientación del borde. Identificado los nodos de borde que forman el conjunto \mathcal{N}_b , la aplicación de (3.2) es directa. La implementación del método de bounce-back de las expresiones (3.1) y (3.3) es más compleja que la anterior ya que se requiere identificar la orientación de la frontera para todos los nodos en \mathcal{N}_b .

Como se puede observar de la formulación, la imposición del método de bounce-back es local, no requiere de información adicional a la contenida en el nodo de borde.

Precisión: He et al. [44] muestran que el *half-way bounce-back* tiene precisión de segundo orden para resolver analíticamente problemas conocidos con bordes rectos en el LBM-BGK. En geometrías más complejas la precisión se degrada a primer orden [99]. En [44, 46, 97, 100] muestran que el *full-way bounce-back* es de primer orden de precisión en la velocidad.

3.2.2. Condición de borde de simetría, fronteras con deslizamiento

Este método proporciona condiciones de simetría respecto a una frontera regular, o de manera equivalente velocidad normal a la frontera igual a cero [26]. El fluido es libre de moverse en la dirección tangencial a $\partial\Omega$, sin intercambio de momento con la frontera en esa dirección. Si bien es un método heurístico, se puede considerar equivalente a la condición de borde de reflexión utilizada en la BE [10, 13]. Es posible generalizar de manera simple esta condición de borde para todos los modelos de velocidad LBM analizados. La condición de simetría se impone sobre nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$ aplicando una reflexión de las variables mesoscópicas $f_i : i \in \mathcal{N}_{Ib}$ respecto de la frontera.

Se muestra la imposición de esta condición de borde tomando como ejemplo un problema 2D, se quiere modelar un ducto horizontal de fluido con paredes sin fricción, luego sobre las fronteras horizontales se impone condición de simetría. Se analiza el caso de la pared horizontal inferior utilizando el esquema de velocidad D2Q9 (ver sección C.1). La condición de simetría se establece imponiendo sobre el nodo $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$:

$$f_2(\mathbf{x}, t) = f_8(\mathbf{x}, t) \quad , \quad f_3(\mathbf{x}, t) = f_7(\mathbf{x}, t) \quad , \quad f_4(\mathbf{x}, t) = f_6(\mathbf{x}, t) \quad (3.4)$$

Implementación: Luego del proceso de colisiones y distribución se imponen las condiciones de simetría sobre los nodos de borde con esta propiedad. Es necesario conocer la dirección normal a la frontera para determinar la reflexión. La implementación es local, solo requiere información contenida en el nodo de borde de interés. El procedimiento se puede generalizar para cualquier modelo de velocidades en el LBM.

3.2.3. Condiciones de borde de presión y velocidad - generalización en fronteras de geometría regular

En problemas con fronteras de geometría regular (2D y 3D) existe en la literatura una variedad de métodos para especificar condiciones de borde Dirichlet de velocidad o presión. Las primeras propuestas y contribuciones fueron presentadas por Zou et al. [46], Maier et al. [47], y Noble et al. [48]; existiendo también un número importante de aplicaciones específicas [101–103]. En este trabajo se utiliza una formulación para encontrar de forma sistemática ecuaciones adicionales necesarias para determinar el problema en la frontera cuando se imponen condiciones de borde de presión o velocidad. En particular se utiliza una combinación de los métodos presentados en [47, 101, 102].

De manera general se considera un problema de fluido 3D simple, donde la geometría del dominio computacional está definida por un paralelepípedo regular. Cada superficie plana de la frontera se debe tratar como un caso particular. Lo mismo sobre los 12 bordes convexos y las 8 esquinas convexas formadas de la intersección de dos y tres fronteras regulares (superficies planas) respectivamente. Utilizando una técnica de descomposición de dominio, es posible construir problemas más complejos como superposición de múltiples dominios computacionales o grillas regulares. En geometrías más generales existen bordes y esquinas no convexas, estas se pueden tratar en el LBM como un arreglo conveniente de dominios convexos con condiciones de borde adecuadas.

En un problema isotérmico de fluido existen dos cantidades macroscópicas que deben determinarse o especificarse en la frontera: densidad y velocidad. Como las cantidades macroscópicas no son variables dinámicas del problema en el LBM, en las fronteras es posible especificar simultáneamente velocidad y densidad del fluido. Si bien esto es factible en el LBM es una condición incorrecta que sobre restringe el problema macroscópico (o de

NS) [95, 104]. De manera general, en un problema 3D se utilizan dos configuraciones de condiciones de borde de Dirichlet de presión o velocidad: se especifica la densidad y dos componentes de la velocidad, y se determina la componente de velocidad restante; o se especifica la velocidad y se determina la densidad. Cuando se imponen estas condiciones en la frontera estas suelen denominarse en la literatura como superficies o paredes de presión y velocidad respectivamente.

Por claridad, en las secciones siguientes se presenta de manera independiente los métodos utilizados para imponer condiciones de borde Dirichlet en superficies planas, y en bordes y esquinas convexas.

3.2.3.1. Superficies planas

Según se explica en la sección 3.1, en cada frontera plana del dominio existe, para cada nodo $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$, un subconjunto de \mathbf{f} en las direcciones $i \in \mathcal{N}_{Ib}$ y de tamaño $|\mathcal{N}_{Ib}|$ que están indeterminadas. Específicamente las asociadas a las velocidades discretas con dirección hacia el interior de Γ . Para cada una de estas variables indeterminadas se propone una ecuación adicional, utilizando una combinación de cantidades locales conocidas más algún término de corrección $\mathbf{q} = [q_x, q_y, q_z]$ a determinar:

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^*(\mathbf{x}, t) + \frac{\omega_i}{c} \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{q} \quad , \quad i \in \mathcal{N}_{Ib} \quad (3.5)$$

\mathbf{q} puede considerarse una cantidad de movimiento adicional para satisfacer las condiciones macroscópicas impuestas en la frontera. $f_i^*(\mathbf{x}, t)$ es un valor local a definir, en la literatura se utilizan en general tres alternativas:

$$f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) \quad ; \quad f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t - \delta t) \quad ; \quad f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) \quad (3.6)$$

En este trabajo se adopta $f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t)$, con esta elección se recuperan las condiciones de borde propuestas por Zou et al. [46] (ver detalles en la sección C.4.4). Si $f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t)$, la ecuación (3.5) puede considerarse un método de condición de borde bounce-back corregido (ver sección 3.2.1). Maier et al. [47] utiliza una expresión similar a la presentada en la ecuación (3.5).

Frontera de velocidad: En una frontera o superficie de velocidad se especifican todas las componente de velocidad y se determina la densidad. Utilizando las ecuaciones macroscópicas 2.22 para la cantidad de movimiento, y el conjunto de ecuaciones (3.5), es posible determinar las variables en la frontera. La densidad se obtiene de la ecuación 2.22. En la sección C.4.1 se muestra en detalle las ecuaciones que se resuelven, y las expresiones obtenidas para una superficie plana utilizando el esquema D3Q15 casi—incompresible.

Frontera de presión: En una frontera o superficie de presión, al menos dos componentes de la velocidad deben especificarse en problemas 3D (una componente en problemas 2D). La densidad se relaciona con la presión a través de la ecuación de estado (2.24). Utilizando las ecuaciones macroscópicas 2.22 para la densidad y cantidad de movimiento según corresponda, y el conjunto de ecuaciones (3.5), es posible determinar las variables en la frontera. La velocidad desconocida en la frontera se obtiene de la ecuación 2.22 no considerada en el conjunto de ecuaciones anterior. En la sección C.4.1 se muestra en detalle las ecuaciones que se resuelven, y las expresiones obtenidos para una superficie plana utilizando el esquema D3Q15 casi—incompresible.

El método utilizando en este trabajo tiene algunas diferencias respecto de las propuestas de Maier et al. [47] y Noble et al. [48]. Cuando en estas propuestas se imponen condiciones de borde de velocidad, la densidad en la frontera se determina aplicando bounce-back en cada nodo del borde. Esta evaluación establece un valor inicial de las variables mesoscópicas que luego es corregido con una formulación similar a la (3.5). Esto garantiza el cumplimiento de las condiciones macroscópicas impuestas en la frontera. Las correcciones están propuestas únicamente sobre las variables con direcciones de velocidad hacia el interior del dominio fluido, y que tienen una componente de velocidad tangencial al borde. Zou et al. [46] trata las condiciones de borde en problemas 3D como Maier et al. [47], introducen un tratamiento general para fronteras con condiciones de presión y velocidad. Existe una diferencia entre ambas propuestas: Maier et al. [47] utiliza bounce-back clásico, mientras que Zou et al. [46] un bounce-back particular para las distribuciones de no equilibrio ($f^{neq} = f - f^{eq}$).

3.2.3.2. Bordos y esquinas convexas - unión de superficies planas

En nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$ contenidos en los bordes y esquinas convexas existe, además de las direcciones hacia el interior del fluido, un subconjunto de \mathbf{f} en direcciones de velocidad que deben especificarse de manera particular. Son variables que no contribuyen en la evaluación de cantidad de movimiento pero deben determinarse con algún valor adecuado ya que intervienen en la evaluación de ρ . Estas direcciones son denominadas en la literatura como direcciones *buried*, no se corresponden a direcciones de velocidad hacia el interior del dominio fluido, en todos los casos de interés se presentan de a pares y opuestas dada la simetría de los esquemas de velocidad. Existen diferentes propuestas para determinarlas; en [101] proponen $f_i^*(\mathbf{x}, t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t)$, mientras que Maier et al. [47]:

$$f_i(\mathbf{x}, t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\hat{f}_i(\mathbf{x}, t - \delta t) + \hat{\bar{f}}_i(\mathbf{x}, t - \delta t) \right) \quad (3.7)$$

Si i es una direcciones *buried*, $f_i = \bar{f}_i$ garantiza un aporte nulo a las ecuaciones de cantidad de movimiento. Cai et al. [102] propone:

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \theta \quad ; \quad \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \theta \quad (3.8)$$

con

$$\theta = \frac{1}{2} (f_i(\mathbf{x}, t - \delta t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \bar{f}_i(\mathbf{x}, t - \delta t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (3.9)$$

obtenido de considerar: $f_i(\mathbf{x}, t) + \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t - \delta t) + \bar{f}_i(\mathbf{x}, t - \delta t)$

Utilizando (3.5) en las direcciones hacia el interior del dominio fluido, la expresión (3.8) (u otras de las alternativas presentadas) para las direcciones *buried*, y las ecuaciones macroscópicas (como en la sección 3.2.3.1) es posible determinar las variables en el borde para imponer condiciones de velocidad y/o presión según se requiera. En la sección C.4.2 y C.4.3 se muestra en detalle las ecuaciones que se resuelven, y las expresiones obtenidas para un borde y esquina convexa utilizando el esquema D3Q15 cuasi—incompresible.

En los bordes y esquinas convexas existe un problema particular con la densidad ρ , no está determinada de manera correcta para cualquier selección de f_i en las direcciones *buried* propuestas en la literatura revisada. Para solucionar este inconveniente, en los bordes y esquinas convexas con condiciones de velocidad, la densidad es impuesta igual a la del nodo mas cercano no perteneciente al borde, una solución similar es propuesta por Zou et al. [46] para tratar bordes convexas.

3.2.3.3. Implementación y precisión

Implementación: La implementación de las condiciones de borde en fronteras de geometría regular es conceptualmente simple. En problemas 2D puede encontrarse un número reducido de ecuaciones que representen todas las restricciones necesarias en las fronteras. Por el contrario, en problemas 3D no se encuentran, o no existen estas expresiones generales para todos los esquemas de velocidad. Debe particularizarse cada frontera (tipo y orientación) para todos los esquemas de velocidad de interés. Dada la cantidad de ecuaciones algebraicas que se resuelven, se debe tener especial cuidado en esta implementación.

Para generalizar la determinación de condiciones de borde en esquemas de velocidad arbitrarios, y para cualquier orientación de los bordes regulares de interés, se utiliza en $\{LBM\}$ un algoritmo simple en python (SymPy) que resuelve el problema algebraico y lo escribe como funciones de C++. Esto permite reducir errores involuntarios en las expresiones algebraicas y facilita la implementación para cualquier esquema de velocidad. En la sección C.4 se muestra y detalla un problema particular donde se determina el conjunto de ecuaciones y variables en las fronteras de interés utilizando el esquema D3Q15.

Precisión: En la sección 5.4.1.1 se muestran resultados de una verificación numérica de la precisión de las condiciones de borde implementadas. Se puede observar de los resultados que la precisión del método de condiciones de borde implementado es de segundo orden en la velocidad como se requiere, tal que no degrade la precisión intrínseca del LBM (ver sección 2.4).

3.3. Condiciones de borde en fronteras de geometría arbitraria no regular

En el LBM existen en la actualidad dos estrategias para representar fronteras de geometría arbitraria no regular³. Por un lado la que utiliza grillas estructuradas no uniformes que se ajustan a una geometría arbitraria [105–108]; por el otro la que utiliza grillas cartesianas regulares, donde la frontera de una geometría arbitraria generalmente no coincide con la grilla. En este último caso la posición de la frontera se ajusta mediante condiciones de borde particulares. En general se utilizan métodos de interpolación como los basados en bounce-back [50–55]; de reconstrucción [56–58]; o de bordes inmersos [89, 90].

Las grillas cartesianas uniformes junto con condiciones de borde adecuadas para representar fronteras de geometría arbitraria son las más utilizadas en el LBM. En este trabajo se utiliza exclusivamente esta configuración. Luego el problema de representar fronteras de geometría arbitraria se reduce a encontrar el método de condición de borde que determina la geometría con precisión suficiente tal que no degrade la precisión numérica intrínseca del LBM (ver sección 2.4).

No es la intención de este trabajo hacer una revisión exhaustiva de los métodos utilizados en el LBM para imponer condiciones de borde en fronteras de geometría arbitraria. Se presentan algunos de los métodos utilizados en $\{LBM\}$, considerados más relevantes para resolver los problemas de interés. En la sección 3.3.2 se presenta el método de condición de borde FH-MSL [51, 52], en la sección 3.3.3 el método de BFL [53, 54]. En la sección 3.3.4 se muestra el método Interpolación de Yu [55], y por último en la sección 3.3.5 se presenta el método Extraplación de Guo-Zheng-Shi [56].

³La representación de fronteras de geometría arbitraria hace referencia a la imposición de condiciones de borde Dirichlet de velocidad en las fronteras.

Antes de presentar los métodos de condiciones de borde de Dirichlet de velocidad utilizados, es conveniente por simplicidad y orden en la presentación, definir algunos parámetros geométricos y conjuntos de nodos de utilidad.

3.3.1. Parámetros geométricos y conjuntos de nodos de interés

Dada una frontera de forma arbitraria, $\partial\Omega$, es necesario determinar: el conjunto \mathcal{N}_b y el conjunto de direcciones asociadas $\mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x})$ (definidos en la sección 3.1). Para cada $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$ y toda dirección $\vec{i} : i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x})$ se tiene por definición una distancia característica Δ entre \mathbf{x} y la frontera $\partial\Omega$. Se define $\mathbf{x}_{w,\vec{i}}(\mathbf{x})$, un punto en $\partial\Omega$ resultado de la intersección entre la frontera y una recta que pasa por \mathbf{x} en la dirección de la velocidad discreta i , luego:

$$\Delta = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{w,\vec{i}}(\mathbf{x})\|}{\mathbf{c}_i \delta t}. \quad (3.10)$$

donde $0 \leq \Delta \leq 1$.

Cuando la frontera no tiene movimiento respecto de la grilla, los conjuntos de nodos se determinan inicialmente y son válidos para todo tiempo. Si la frontera se desplaza respecto de la grilla, la determinación de estos conjuntos se debe hacer para cada paso temporal. Encontrar estos conjuntos en problemas de geometría arbitraria con desplazamiento de la frontera puede ser la tarea computacionalmente más costosa en la evolución numérica del problema de fluido.

Es necesario disponer de algún algoritmo que permita encontrar el conjunto de nodos y parámetros geométricos de interés para geometrías arbitrarias. En el apéndice E se presenta un método utilizado en $\{LBM\}$ para encontrar estos conjuntos y parámetros.

Existen nodos de borde $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b : \nexists \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t \in \mathcal{N}_F$ con $i \in \mathcal{N}_{Ib}$. Estos nodos se los identifica en el conjunto $\mathcal{N}_{b_{wn}}$. En general, $\mathcal{N}_{b_{wn}} \neq \{\emptyset\}$ cuando se analiza una geometría con bordes convexos y agudos. Si $\mathcal{N}_{b_{wn}} \neq \{\emptyset\}$ puede ser indicio de una mala discretización. La disminución del tamaño de grilla puede reducir el tamaño de $\mathcal{N}_{b_{wn}}$.

3.3.2. Condiciones de borde de FH-MSL

El método de condiciones de borde de FH-MSL es una mejora de la propuesta de Filippova et al. [52] para imponer velocidad en fronteras de geometría arbitraria. La propuesta de Filippova et al. [52] fue una de las primeras con una precisión de segundo orden en el LBM-BGK. Presenta problemas de estabilidad numérica que fueron mejorados por Mei et al. [50, 51]. El nombre adoptado (FH-MSL) para denotar este método es un estándar en la literatura, hace referencia a las iniciales de quienes propusieron el método Filippova y Hänel (FH) [52], y quienes introdujeron modificaciones para incrementar su estabilidad Mei, Shyy y Luo (MSL) [50, 51].

La propuesta de Filippova et al. [52] determina $f_i(\mathbf{x}, t + \delta t)$ ($\hat{f}_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \delta t, t)$) con $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$ e $i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x})$ tal que la velocidad en la frontera $\mathbf{u}_w = \mathbf{u}(\mathbf{x}_{w,\vec{i}}(\mathbf{x}), t)$, linealmente interpolada en el punto de borde $\mathbf{x}_{w,\vec{i}}(\mathbf{x})$, es la correcta.

$$\hat{f}_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \delta t, t) = (1 - \chi) \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) + \chi g_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \delta t, t) + 2\omega_{\vec{i}} \rho \frac{3}{c^2} \mathbf{c}_{\vec{i}} \cdot \mathbf{u}_w \quad (3.11)$$

donde $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$, con:

$$g_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \delta t, t) = \omega_{\vec{i}} \rho(\mathbf{x}, t) \left(1 + \frac{3}{c^2} \mathbf{c}_{\vec{i}} \cdot \mathbf{u}_{bf} + \frac{9}{2c^4} (\mathbf{c}_{\vec{i}} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right) \quad (3.12)$$

una función distribución de equilibrio ficticia en el nodo $\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \delta t$. $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ la velocidad macroscópica del fluido en \mathbf{x} . Diferentes elecciones de \mathbf{u}_{bf} , una velocidad entre \mathbf{u}_w y \mathbf{u} , modifican el parámetro χ que controla la interpolación (o extrapolación).

Con motivos de mejorar la estabilidad numérica del método Mei et al. [50, 51] proponen:

$$\mathbf{u}_{bf} = \mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t), \quad \chi = \frac{2\Delta - 1}{\tau - 2}, \quad \text{si } \Delta < \frac{1}{2}, \quad (3.13)$$

y

$$\mathbf{u}_{bf} = \mathbf{u} + \frac{3}{2\Delta}(\mathbf{u}_w - \mathbf{u}), \quad \chi = \frac{2\Delta - 1}{\tau + \frac{1}{2}}, \quad \text{si } \Delta \geq \frac{1}{2}, \quad (3.14)$$

El método FH-MSL tiene ciertas limitaciones en problemas transitorios debido a las hipótesis sobre escalas temporales. Se asume que la escala de tiempo característica del fluido \bar{t} es mucho mayor que la escala de tiempo de advección o propagación de las perturbaciones $\frac{L}{c}$, con L una longitud característica y c la velocidad de grilla. La formulación de Filippova et al. [52] y las correcciones posteriores utilizan explícitamente el LBM-BGK, luego el método FH-MSL no es válido para otros operadores de colisiones.

En [74] se muestran resultados de una serie de ensayos numéricos típicos obtenidos con LBM. Los resultados presentados son obtenidos utilizando el método de condiciones de borde de esta sección en fronteras de geometría arbitraria en combinación con el de la sección 3.2 para las fronteras regulares.

Implementación: Definidos los conjuntos y parámetros de la sección 3.3.1 el método puede ser utilizado para determinar las variables en los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$. Pueden existir algunas particularidades en la implementación, el método FH-MSL no puede ser aplicado sobre los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_{b_{wn}}$. Sobre estos nodos es posible implementar métodos locales como el de bounce-back (sección 3.2.1) o los presentados por Yang et al. [59]. En $\{LBM\}$ los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_{b_{wn}}$ son tratados utilizando el método de bounce-back. Si $\mathcal{N}_{b_{wn}} \neq \{\emptyset\}$ se puede estar aplicando métodos de condiciones de borde con diferente precisión para los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$. La utilización de dos métodos de condiciones de borde con precisión diferente degrada la precisión global a la menor de ambas.

Precisión: Mei et al. [50, 51] determinan mediante ensayos numéricos la precisión de los métodos propuestos. En [50] muestran que la solución 2D obtenida tiene generalmente precisión (espacial) de segundo orden en la velocidad, y para algunos casos puntuales precisión de segundo orden en el tiempo. En [51] muestran que la solución de problemas 3D (flujo en un canal de sección rectangular y circular), obtenida utilizando el método de condiciones de borde propuesto, tiene precisión espacial de segundo orden. En [59] muestran, utilizando métodos analíticos, que el método FH-MSL tiene precisión espacial de primer orden en la velocidad, contradiciendo los casos anteriores. En este trabajo no se realizan pruebas de precisión del método FH-MSL.

3.3.3. Condiciones de borde BFL

Esta condición de borde Dirichlet de velocidad sobre fronteras de geometría arbitraria es propuesta por Bouzidi et al. [53]. La denominación BFL hace referencia a las iniciales de quienes propusieron el método: Bouzidi, Firdaouss, y Lallemand. Es una combinación del método de bounce-back estándar con interpolación espacial de primer y segundo orden.

En este trabajo se utiliza una versión de la condición de borde BFL presentada por Lallemand et al. [54]. Utilizando interpolación espacial de segundo orden, se impone sobre los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$ en las direcciones $i \in \mathcal{N}_{Tb}(\mathbf{x})$ la siguiente función distribución:

$$f_i(\mathbf{x}, t + \delta t) = \Delta \Delta_1 \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) + (1 - 4\Delta^2) \hat{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) + \Delta (\Delta_2) \hat{f}_i(\mathbf{x} + 2\mathbf{c}_i \delta t, t) + 6 \frac{\omega_i}{c^2} \rho(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_w) \quad , \quad \Delta < \frac{1}{2} \quad (3.15)$$

$$f_i(\mathbf{x}, t + \delta t) = \frac{1}{\Delta \Delta_1} \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta_2}{\Delta} \hat{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) - \frac{\Delta_2}{\Delta_1} \hat{f}_i(\mathbf{x} + 2\mathbf{c}_i \delta t, t) + \frac{6\omega_i}{\Delta \Delta_1 c^2} \rho(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_w) \quad , \quad \Delta \geq \frac{1}{2} \quad (3.16)$$

con $\Delta_1 = 2\Delta + 1$ y $\Delta_2 = 2\Delta - 1$, Δ definido en (3.10). Se puede observar de (3.16), que el método se reduce al de bounce-back (3.3) cuando $\Delta = \frac{1}{2}$.

Las expresiones (3.15) y (3.16) se obtienen aplicando bounce-back en la frontera, posicionada en algún lugar arbitrario definido por Δ . La interpolación se utiliza para obtener el valor de la función distribución en una dirección de interés y en una posición de la grilla definida de manera conveniente (ver detalles en [54]). La definición de esta posición particular depende de Δ . La interpolación espacial que altera el método de bounce-back afecta la conservación de la masa, esto es un problema particular y común a todos los métodos basados en bounce-back [109, 110].

El término que contiene la velocidad del borde en las expresiones (3.15) y (3.16) se obtiene asumiendo una variación lineal de la velocidad en una región cercana al borde [53]. En [54] utilizan un argumento similar, y muestran que se recupera la solución analítica exacta del problema de flujo de Couette (variación lineal de la velocidad).

El método no depende del modelo de colisiones utilizado, luego es aplicable al LBM-BGK y al LBM-MRT.

Implementación: Conocido Δ y \mathbf{u}_w , según se detalla en la sección 3.3.1, imponer las funciones distribución en los bordes definidas por (3.15) y (3.16) es directo. Pueden existir algunas particularidades en la implementación, el método BFL no puede ser aplicado sobre los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_{b_{wn}}$. Sobre estos nodos se implementan métodos locales como el de bounce-back (sección 3.2.1) o los presentados por Yang et al. [59].

Precisión: Bouzidi et al. [53] muestra con resultados numéricos que el método BFL tiene precisión de segundo orden en la velocidad. Yang et al. [59] verifica de manera analítica que el método BFL tiene esta precisión en la velocidad y precisión de primer orden en la presión.

3.3.4. Condiciones de borde Interpolación de Yu

Yu et al. [55] utilizan una interpolación simple para imponer condiciones de borde de velocidad utilizando una expresión única; no es necesario diferenciar los casos $\Delta \geq 0.5$, y $\Delta < 0.5$ como ocurre con los métodos presentados en las secciones 3.3.2 y 3.3.3 y en la mayoría de las propuestas de la literatura basadas en bounce-back.

El método utiliza dos interpolaciones en la imposición de las condiciones de borde. Con una de ellas se estima una función distribución sobre la frontera en \mathbf{x}_w ; $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$ y en

las direcciones $i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x})$ se conoce $f_{\bar{i}}(\mathbf{x}, t)$, $f_{\bar{i}}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_{\bar{i}}\delta t, t)$, y $f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\delta t, t)$ del proceso de distribución, vía interpolación se obtiene

$$f_{\bar{i}}(\mathbf{x}_w, t) = f_{\bar{i}}(\mathbf{x}, t) + \Delta (f_{\bar{i}}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_{\bar{i}}\delta t, t) - f_{\bar{i}}(\mathbf{x}, t)) + \frac{\Delta(\Delta - 1)}{2} (f_{\bar{i}}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_{\bar{i}}\delta t, t) - 2f_{\bar{i}}(\mathbf{x}, t) + f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\delta t, t)) \quad (3.17)$$

Utilizando bounce-back en la dirección $\mathbf{c}_{\bar{i}}$ en el punto de borde \mathbf{x}_w (expresión (3.2)) con velocidad \mathbf{u}_w , es posible encontrar una expresión para $f_i(\mathbf{x}_w, t)$:

$$f_i(\mathbf{x}_w, t) = f_{\bar{i}}(\mathbf{x}_w, t) + 6\frac{\omega_{\bar{i}}}{c^2}\rho(\mathbf{x}_B, t)(\mathbf{c}_{\bar{i}} \cdot \mathbf{u}_w) \quad (3.18)$$

Luego se pueden determinar $f_i(\mathbf{x}, t)$ utilizando la siguiente interpolación cuadrática:

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}_w, t) + \frac{\Delta}{1 + \Delta} (f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\delta t, t) - f_i(\mathbf{x}_w, t)) + \Delta \left[\frac{f_i(\mathbf{x} + 2\mathbf{c}_i\delta t, t)}{\Delta + 2} - \frac{f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\delta t, t)}{\Delta + 1} + \frac{f_i(\mathbf{x}_w, t)}{(\Delta + 1)(\Delta + 2)} \right] \quad (3.19)$$

con (3.18) y (3.19) es posible determinar las variables necesarias para imponer condiciones de borde de velocidad.

Una de las mayores ventajas de este método es que brinda una expresión única, válida para todo Δ . Es necesario determinar la densidad $\rho(\mathbf{x}_w, t)$ en el punto de borde \mathbf{x}_w . Se utilizan dos opciones $\rho(\mathbf{x}_w, t) = \rho(\mathbf{x}, t)$ y una media del valor de densidad en los nodos primeros vecinos, no se observan diferencias en los resultados entre ambas propuestas. Se debe tener especial cuidado y verificar que la masa se conserve en los problemas que se analiza, ambas elecciones para determinar la densidad generan problemas de conservación de masa que se adicionan a los introducidos por la interpolación intrínseca del método. La validez de este método no depende del modelo de colisiones utilizado, luego es aplicable al LBM-BGK y al LBM-MRT.

Implementación: La implementación es menos elaborada respecto de las presentadas en las secciones 3.3.2 y 3.3.3, no es necesario utilizar diferentes expresiones según el valor de Δ . Pueden existir algunas particularidades en la implementación, el método interpolación de Yu no puede ser aplicado sobre los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_{b_{wn}}$. Sobre estos nodos es implementan métodos locales como el de bounce-back (sección 3.2.1) o los presentados en [59].

Precisión: Yu et al. [55] muestran mediante verificaciones numéricas que el método propuesto tiene precisión de segundo orden. Resuelven algunos problemas típicos obteniendo resultados similares a los encontrados con el método de la sección 3.3.2. Mencionan buenas propiedades de estabilidad sin una demostración explícita o análisis numérico que valide esta afirmación.

3.3.5. Condiciones de borde Extrapolación de Guo-Zheng-Shi

Este método es presentado por Guo et al. [56] para imponer condiciones de borde en problemas cuasi—incompresibles en el LBM-BGK. Se basa en la descomposición de la función distribución según la expresión (B.5) propuesta por Chapman-Enskog (ver apéndice B): $f_i = f_i^{eq} + f_i^{neq}$.

Guo et al. [56] proponen para el LBM-BGK y $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$ en las direcciones $i \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x})$:

$$f_i(\mathbf{x}, t + dt) = \bar{f}_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) + \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) f_i^{neq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) \quad (3.20)$$

donde $\bar{f}_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t)$ es una función distribución de equilibrio ficticia; para problemas cuasi—incompresibles se utiliza una expresión similar a (2.36):

$$\bar{f}_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) = \omega_i \left[\rho_w + \rho_0 \left(\frac{3(\mathbf{c}_i \cdot \tilde{\mathbf{u}})}{c^2} + \frac{9(\mathbf{c}_i \cdot \tilde{\mathbf{u}})^2}{2c^4} - \frac{3\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{u}}}{2c^2} \right) \right] \quad (3.21)$$

donde $\rho_w \equiv \rho(\mathbf{x}, t)$, y $\tilde{\mathbf{u}}$ es una aproximación de la velocidad en $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t$ que se estima mediante extrapolación lineal:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{u}}_1 \quad , \quad \Delta \geq \frac{3}{4} \quad (3.22)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \Delta \tilde{\mathbf{u}}_1 + (1 - \Delta) \tilde{\mathbf{u}}_2 \quad , \quad \Delta < \frac{3}{4} \quad (3.23)$$

con

$$\tilde{\mathbf{u}}_1 = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}_w, t) + (\Delta - 1) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\Delta} \quad (3.24)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 = \frac{2\mathbf{u}(\mathbf{x}_w, t) + (\Delta - 1) \mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t)}{1 + \Delta} \quad (3.25)$$

Por motivos de estabilidad numérica Guo et al. [56] proponen los límites en Δ de las expresiones (3.22) y (3.23). La función de no equilibrio en (3.20) se aproxima utilizando las funciones de no equilibrio en los nodos \mathbf{x} y $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t$ con el mismo criterio de extrapolación que el implementado para la velocidad:

$$\bar{f}_i^{neq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) = f_i^{neq}(\mathbf{x}, t) \quad , \quad \Delta \geq \frac{3}{4} \quad (3.26)$$

$$\bar{f}_i^{neq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) = \Delta f_i^{neq}(\mathbf{x}, t) + (1 - \Delta) f_i^{neq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) \quad , \quad \Delta < \frac{3}{4} \quad (3.27)$$

Luego de la ecuación (3.20) quedan definidas las variables en los nodos de borde. Dadas las hipótesis iniciales bajo las que se desarrolla el método presentado, este es aplicable en la forma expuesta solo a modelos cuasi—incompresibles con operador de colisiones BGK.

Implementación: La implementación es similar a la de las secciones anteriores donde se utilizan diferentes expresiones en los bordes según valores de Δ . Igual que los métodos de las secciones anteriores, el de extrapolación de Guo-Zheng-Shi no puede ser aplicado sobre los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_{b_{wn}}$. Las expresiones (3.25) y (3.27) no pueden ser evaluadas en estos casos.

Precisión: El método tiene precisión de segundo orden en la velocidad, en [56] verifican de manera numérica esta convergencia del error en la velocidad. El método tiene características de estabilidad comparables con las del presentado en la sección 3.3.2.

3.4. Tratamiento de cuerpos en movimiento

En problemas generales la frontera $\partial\Omega$ puede desplazarse con respecto a la grilla LBM, $\Omega = \Omega(t)$; luego los conjuntos de nodos utilizados para imponer condiciones de borde en las fronteras del problema, definidos en las secciones 3.1 y 3.3.1, dependen del tiempo. En estos casos es necesario determinar, para cada paso temporal, los conjuntos de nodos de interés y los demás parámetros utilizados para imponer las condiciones de borde en los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_b$. Este procedimiento es computacionalmente costoso, en especial cuando se consideran fronteras arbitrarias en movimiento. Si el movimiento de la frontera está prescrito, puede a priori conocerse para todo tiempo como será la variación de los conjuntos de nodos. Si el movimiento es arbitrario, resultado por ejemplo de resolver alguna ecuación de movimiento o deformación de la frontera, es necesario ejecutar para todo paso de tiempo el procedimiento de búsqueda y selección de nodos para determinar a que conjunto pertenecen. En el apéndice E se muestran detalles de un algoritmo elemental utilizado para determinar los conjuntos de nodos y demás parámetros de interés.

Como resultado del desplazamiento de la frontera, nodos que pertenecen al conjunto fluido a tiempo t pueden formar parte del conjunto de nodos sólidos a tiempo $t + \delta t$ y viceversa. Es decir, un nodo de borde $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_F(t) \notin \mathcal{N}_F(t + \delta t)$. Lo mismo ocurre para nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_s(t) \notin \mathcal{N}_s(t + \delta t)$.

Los nodos $\mathbf{x} \in \mathcal{N}_s(t) \in \mathcal{N}_F(t + \delta t)$ requieren un tratamiento especial ya que a tiempo $t + \delta t$ son nodos del fluido, y a tiempo t son nodos del sólido. Es necesario asignar un valor inicial a las variables del nuevo nodo para poder evolucionar en el problema de fluido. Existen diferentes propuestas en la literatura para asignar valores iniciales a estos nodos. Un método práctico y simple es evolucionar sobre todos los nodos ($\mathbf{x} \in (\mathcal{N}_F \cup \mathcal{N}_s)$) de la grilla como si fuesen todos nodos fluido, luego cuando un nodo cambia de dominio tiene siempre un valor inicial ficticio asignado. Esta metodología se utiliza con frecuencia, elimina la indeterminación del problema en el nodo pero impone valores ficticios que introducen perturbaciones en el dominio fluido, en especial se pueden observar importantes perturbaciones en la presión. Otro método simple, consiste en asignar las variables al nuevo nodo utilizando la función distribución de equilibrio. En este caso las variables macroscópicas se obtienen como valores medios en los nodos primeros vecinos del dominio fluido ($\mathbf{x} \in \mathcal{N}_F$). Métodos más precisos y elaborados para inicializar las variables pueden ser encontrados en [54, 62–64]. En $\{LBM\}$ se implementan todos los métodos mencionados en esta sección. Para los problemas con movimiento de fronteras que se resuelven se utilizan los propuestos en [54, 62, 63]. Estos producen resultados similares y se utilizan sin distinción. Las perturbaciones observadas con estos métodos en la inicialización son menores a las del método de evolución simple o asignación de la función distribución de equilibrio.

3.5. Fronteras abiertas con condición de salida - condición de borde convectiva

Existen problemas en mecánica de fluido caracterizados por dominios físicos extensos o cuasi-infinitos⁴. Es un desafío representarlos utilizando un dominio computacional acotado, tan pequeño como sea posible (con motivo de reducir el costo computacional), y que capture la física del problema de manera precisa. Las condiciones de borde para modelar fronteras abiertas permiten representar, sin afectar la física del problema (fluido en el interior) o degradar la precisión intrínseca del LBM, un dominio físico extenso o cuasi-infinito

⁴Comparado con una escala espacial característica del problema

mediante un dominio computacional finito. Se pueden encontrar diferentes propuestas en la literatura para tratar fronteras abiertas en el contexto del LBM. Las formulaciones se diferencian si el modelo del fluido es de flujo cuasi—incompresibles o compresible.

En problemas de flujo cuasi—incompresible es posible dividir las propuestas en dos categorías: las formuladas en variables mesoscópicas [36, 91], y las formuladas en variables macroscópicas [59–62]. Las últimas son extensiones de las condiciones de borde extensamente utilizadas en los métodos clásicos⁵ de CFD para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes.

En el caso de flujo compresible se utilizan condiciones de borde absorbentes, o de no reflexión para representar fronteras abiertas. Estas permiten tratar de manera particular los bordes, brindando características de continuidad del dominio físico, absorbiendo las perturbaciones de origen físico o numérico sin generar reflexiones en la frontera. Perturbaciones de origen numérico ocurren por inicializaciones no físicas del problema, generando ondas de presión ficticias que se desplazan a la velocidad del sonido local. En el LBM se utilizan dos métodos para modelar fronteras absorbentes: condiciones de borde formuladas en características [72, 73], y las denominadas *absorbing layers* [92, 93]. Ambos métodos son extensiones de condiciones de borde utilizadas en métodos numéricos clásicos para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes o Euler compresibles [94–96]. Es posible utilizar estos métodos en problemas cuasi—incompresibles, en especial cuando las perturbaciones son importantes y quieren eliminarse del dominio fluido en un tiempo relativamente corto.

En este trabajo se tiene especial interés en problemas cuasi—incompresibles no estacionarios. En el LBM son analizados [59–62] métodos tales como: condición de borde de Newmann simple (NBC), tipo Newmann "do-nothing condition" (DNC), borde con tensión normal cero (ZNS), y *condiciones de borde convectivas* (CBC). Yang et al. [61] muestra que el método CBC brinda los mejores resultados para modelar los problemas de interés, con una precisión $\mathcal{O}(\delta x^2)$ en problemas estacionarios. Si la distancia desde una región donde existen gradientes en las variables que definen la dinámica del fluido (presión, velocidad) hasta una frontera abierta con condición de salida es mayor a alguna longitud característica (variable para cada problema), la utilización de uno u otro método para tratar la frontera con condiciones de salida no influye significativamente en los resultados.

En este trabajo se utiliza el método CBC, las fronteras donde se imponen CBC ($\partial\Gamma_{CBC}$) deben satisfacer:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \bar{v}\mathbf{n} \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_{CBC}, t \in [0, T] \quad (3.28)$$

con ϕ una función de la velocidad o la presión, y \bar{v} una velocidad de referencia a definir. $\partial\Gamma_{CBC} \in \partial\Gamma$ es una porción de $\partial\Gamma$ donde se imponen CBC. \mathbf{n} es un vector normal a $\partial\Gamma_{CBC}$ en la dirección saliente a Γ .

3.5.1. CBC en fronteras regulares coincidentes con la grilla

Se considera $\partial\Gamma_{CBC}$ de geometría regular coincidentes con la grilla y perpendicular a alguno de los ejes cartesianos. Se imponen condiciones convectivas para la velocidad \mathbf{u} , en este caso se tienen tantas ecuaciones como la (3.28) como componentes de la velocidad. Para $\partial\Gamma_{CBC}$ con vector normal $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$, de la expresión (3.28) escrita en forma discreta

⁵Métodos de diferencias finitas (FDM), método de volúmenes finitos (FVM), y método de elementos finitos (FEM)

se tiene:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \delta t) \approx \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \frac{\bar{v}\delta t}{2\delta x} (\mathbf{u}(\mathbf{x} - 2\delta x, t) - 4\mathbf{u}(\mathbf{x} - \delta x, t) + 3\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)), \quad (3.29)$$

donde la derivada espacial se aproxima por un esquema en diferencias descentrado (backward) de segundo orden, y la derivada temporal por uno de primer orden (forward).

Se debe prescribir \bar{v} en la ecuación (3.29), para lo cual se pueden encontrar varios criterios en la literatura: en [61] establecen \bar{v} igual a la velocidad media en $\partial\Gamma_{CBC}$; en [111] proponen \bar{v} igual a la velocidad de la corriente libre $\|\mathbf{u}_\infty\|$ con alguna condición adicional para asegurar conservación de la masa en Γ . \mathbf{u}_∞ es una velocidad uniforme, sin perturbaciones, suficientemente lejos de las regiones con presencia de gradientes en las variables macroscópicas. Problemas de conservación de la masa son observados y cuantificados en [61] para algunos casos de prueba típicos en el contexto del LBM.

Conocida $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \delta t)$ de la ecuación (3.29) en $\mathbf{x} \in \partial\Gamma_{CBC}$ se puede utilizar el método presentado en la sección 3.2.3 para determinar las variables mesoscópicas en $\partial\Gamma_{CBC}$ que satisfacen la CBC en la velocidad. También se utilizó el método de extrapolación de Guo-Zheng-Shi de la sección 3.3.5, se obtienen resultados aceptables y comparables con los obtenidos utilizando el método de la sección 3.2.3.

En la sección 3.6 se resuelve un problema de verificación para comprobar el método de condiciones de borde y algoritmo implementado en $\{LBM\}$. Se obtienen resultados aceptables utilizando esta condición de borde para diferentes configuraciones del dominio computacional. Se utiliza $\bar{v} = cte$ adoptando dos valores particulares: la velocidad media \bar{u}_{in} y la máxima $u_{m\acute{a}x}$ en la sección de entrada. Con $\bar{v} = \bar{u}_{in}$ se encuentran inestabilidades numéricas en el borde de salida. Con $\bar{v} = u_{m\acute{a}x}$ se obtienen los mejores resultados, sin problemas de inestabilidad numérica y conservación de la masa en límites aceptables. Se obtienen variaciones de la masa $< 1\%$ en los diferentes problemas analizados.

La desventaja principal de este método, de esperar dada la formulación, es que existen reflexiones notables⁶ de las ondas de presión en $\partial\Gamma_{CBC}$. Cuando estas reflexiones son importantes, este inconveniente puede solucionarse utilizando condiciones de borde de no reflexión para modelar los bordes abiertos. Se implementan estas condiciones de borde en $\{LBM\}$, se prueba y verifica su funcionamiento en problemas 2D encontrando una atenuación de las reflexiones como las presentadas en la literatura [72, 73].

3.6. Problema de verificación

En esta sección utilizamos algunos de los métodos de condición de borde presentados en este capítulo para analizar un problema de mecánica de fluido con resultados conocidos. Por simplicidad y extensión de éste trabajo, se presenta un único problema de verificación 3D a bajos números de Reynolds. En [74] se realizaron evaluaciones de varios problemas 2D. En los capítulos siguientes se muestran resultados de problemas particulares algo más complejos, permitiendo verificar el algoritmo utilizado ($\{LBM\}$), y de manera indirecta los métodos para imponer condiciones de borde.

Se analiza la influencia de los métodos de condiciones de borde sobre las fuerzas que el fluido ejerce sobre un arreglo plano de esferas, periódico en la dirección transversal al flujo. La configuración del problema se presenta de manera esquemática en la figura 3.2.

⁶Las reflexiones de las perturbaciones de presión son de menor intensidad a las encontradas cuando se impone presión en el borde de salida.

Se utilizan diferentes configuraciones del dominio computacional a número de Reynolds $Re = 10$. Utilizando el método de momentum exchange (ME) [1] que se presenta en el

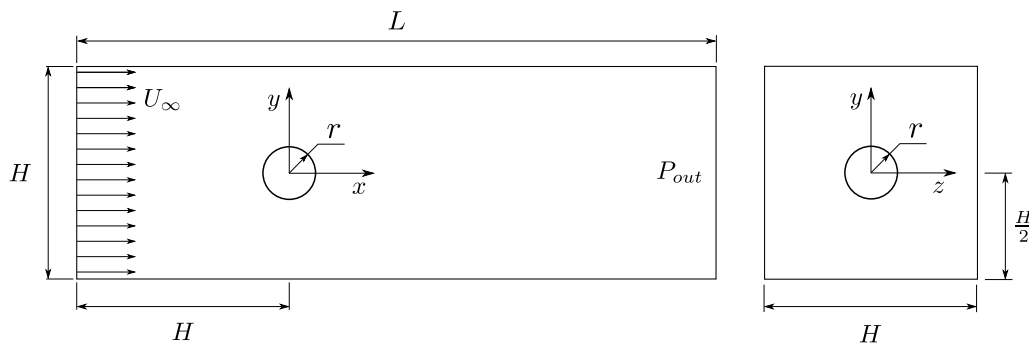


FIGURA 3.2: Esquema de la configuración de un arreglo plano de esferas, periódico en la dirección transversal al flujo.

Capítulo 4, se evalúa la fuerza de arrastre sobre la esfera (fuerza en la dirección del eje x en la figura 3.2). En las demás direcciones las fuerzas son cero en el problema estacionario que se analiza. Por comparación directa de resultados LBM respecto de los presentados en la literatura [112] se evalúan los métodos de condiciones de borde implementados. También se verifican resultados utilizando el método de CBC de la sección 3.5 para diferentes configuraciones del dominio computacional, en especial se evalúa la influencia de las variaciones en la longitud del dominio.

Para comparar resultados en configuraciones que respeten condiciones de similitud, se evalúa el coeficiente de resistencia definido como:

$$C_D = \frac{F_x}{\frac{1}{2}\rho U^2 \pi r^2} \quad (3.30)$$

con F_x la fuerza ejercida por el fluido sobre la esfera en la dirección x , y r el radio de la esfera. La esfera está posicionada en el centro de un canal de sección transversal cuadrada $H \times H$, a una distancia H de la sección de entrada, con $\frac{H}{r} = 10$.

Las diferentes configuraciones están definidas por: una combinación de las condiciones de borde utilizadas en las fronteras, el modelo LBM y esquema de velocidades, y la longitud del dominio fluido que se utiliza. Para modelar el arreglo plano de esferas, sobre las paredes laterales horizontales y verticales se imponen condiciones de simetría de la sección 3.2.2. Sobre la sección de entrada se impone velocidad U uniforme y constante; se utiliza el método de la sección 3.2, que por simplicidad se lo denomina DVP (Dirichlet velocidad-presión). En la sección de salida se utilizan dos métodos para imponer condiciones de borde, el método DVP para imponer un valor de presión y el método de CBC. Se analiza una única discretización del problema siguiendo las recomendaciones presentadas en [112], con $r = 5.5\delta x$. Esto resulta en una discretización de $n_x \times n_y \times n_z = 165 \times 55 \times 55$ cuando $L = 3H$.

Para el número de Reynolds del problema, es posible aproximar la expresión (3.30) como:

$$C_D = \frac{24\phi}{Re} \quad , \quad \phi = \frac{F_x}{6\pi\mu U r} \quad (3.31)$$

con ϕ un parámetro de ajuste que contempla cuanto se aparta el problema de uno de Stokes. Yu et al. [112] realizan una serie de pruebas y determinan un valor medio $\phi_{average} \sim 1.963$ con un error del 1.1 %, luego $C_D \approx 4.71$, (± 0.05).

En la tabla 3.1 se muestran los resultados obtenidos para las diferentes configuraciones.

En la columna BC de la tabla se indican las diferentes condiciones de borde utilizadas.

test	Método	Modelo	C_D	τ	BC	L
-	Yu et al. [112]	D3Q19	4.71	0.7	-	-
1	{LBM}	D3Q15-BGK	4.724	0.565	BFL	3H
2	"	D3Q15-MRT	4.719	"	"	"
3	"	D3Q19-BGK	4.714	"	"	"
4	"	D3Q19-MRT	4.711	"	"	"
5	"	D3Q27-BGK	4.722	"	"	"
6	"	"	4.779	"	MSL	"
7	"	"	4.687	"	YI+DVP	"
8	"	D3Q19-BGK	5.027	"	BB	"
9	"	"	5.028	"	A	"
10	"	"	4.820	0.6	BB	"
11	"	D3Q15-BGK	4.715	"	BFL+CBC	"
12	"	"	4.715	"	"	2.5H
13	"	"	4.714	"	"	2.0H
14	"	"	4.712	"	"	1.8H
15	"	"	4.703	"	"	1.6H
16	"	"	4.656	"	"	1.4H

TABLA 3.1: Coeficientes de resistencia C_D de una esfera a $Re = 10$ para un arreglo plano de esferas, periódico en la dirección transversal al flujo. Resultados obtenidos utilizando diferentes configuraciones del dominio fluido, modelos LBM y métodos de condiciones de borde. BC: condiciones de borde, L : longitud del dominio computacional. Referencias de BC: BFL: Bouzidi (sección 3.3.3), DVP: Dirichlet velocidad y presión (sección 3.2), YI: Yu interpolación (sección 3.3.4), BB: bounce-back (sección 3.2.1), A: Aidun [62, 113]

Las siglas denotan el método de condición de borde utilizado para representar la frontera de geometría arbitraria y la superficie de la esfera. Si existen segundas siglas, denotan que en la sección de salida se utiliza el método CBC. Si no se explicitan segundas siglas el método de condición de borde a la salida es el DVP con presión impuesta. En la figura 3.3 se muestra la distribución de velocidad para el test 2 de la tabla 3.1.

De la tabla 3.1 se puede observar que los resultados con mayor diferencia respecto de las referencias, son los obtenidos con método de condiciones de borde bounce-back (BB) de la sección 3.2.1, y el presentado por [62, 113] denotado con A (por Aidun). Que existan diferencias apreciables no debe sorprender para la discretización utilizada, en ambos casos la geometría no se representa de manera suave. Los resultados obtenidos con la combinación de condiciones de borde BFL+CBC brinda resultados aceptables, en comparación con los obtenidos en [112], para las seis longitudes del dominio computacional. La analizada con $L = 1.6H$ puede considerarse un límite inferior en la longitud aceptable del dominio computacional.

Los parámetros y coeficientes de relajación elegido en los casos LBM-MRT (D3Q15 y D3Q19) son los presentados en [37]. En el modelo D3Q19 algunos coeficientes de relajación propuestos en esta referencia brindan inestabilidades para el problema analizado. En especial el coeficiente de relajación relacionado con el momento $m[16]$ donde se elige $s[16] = 1.7$ ($s[16] = 1.98$ proponen en [37]) para evitar inestabilidades numéricas.

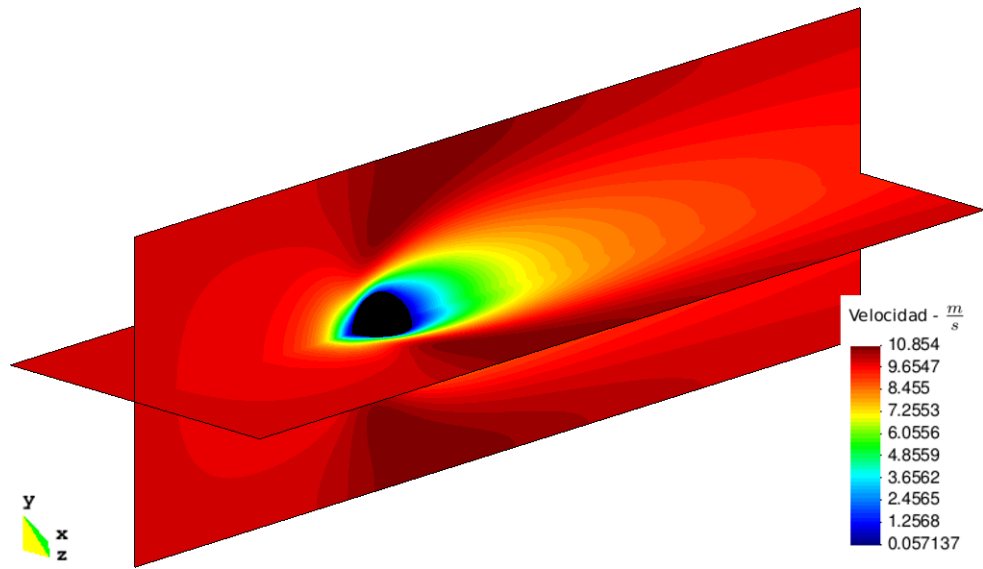


FIGURA 3.3: Distribución de velocidad en dos secciones ortogonales que atraviesan el dominio computacional. El resultado que se muestra corresponde al test 2 de la tabla 3.1.

Capítulo 4

Evaluación de fuerzas

En mecánica de fluidos es de gran importancia disponer de un método robusto y preciso para determinar las fuerzas¹ que un fluido ejerce sobre un cuerpo o frontera de interés. Varios métodos fueron propuestos en el contexto del LBM, la mayoría se encuentra incluido dentro de las categorías: *integración de tensiones* (SI) o *momentum exchange* (ME).

La integración de tensiones está basada en la aproximación hidrodinámica clásica [114–116]. En el LBM el tensor de tensiones es una variable local, si la frontera del cuerpo no es coincidente con la grilla, es necesario extrapolar el tensor de tensiones desde los nodos más cercanos a la superficie. Luego en el SI se obtiene la fuerza total en el cuerpo mediante integración del tensor de tensiones en toda la superficie. El procedimiento en el ME es más simple. Introducido por Ladd [49, 117], está basado en una idea heurística; se obtiene la fuerza evaluando el intercambio de cantidad de movimiento entre la superficie del cuerpo y el fluido. El fluido está representado por “partículas” cuya cantidad de movimiento es simple de escribir en términos de las variables LBM que describen el fluido en la escala mesoscópica. Luego la fuerza total es la suma de todas las contribuciones debido al intercambio de cantidad de movimiento, sobre todos los nodos del borde \mathcal{N}_b en todas las direcciones $i : \bar{i} \in \mathcal{N}_{Ib}$. En el contexto del LBM, el método SI tiene un costo computacional superior al ME.

Luego de la propuesta inicial de Ladd [49, 117] existieron contribuciones que mejoraron el ME. Aidun et al. [62, 113] presentan un método computacionalmente más eficiente e introduce mejoras para evaluar fuerzas sobre cuerpos con movimiento. Mei et al. [65] proponen un método para evaluar fuerzas utilizando condiciones de borde en fronteras de geometría arbitraria. Encontrando problemas en la evaluación de cuerpos en movimiento, Wen et al. [67] y Krithivasan et al. [64] basados en el trabajo de Mei et al. [65], presentan algunas correcciones que mejoran las estimaciones en estos casos.

Todos los métodos de ME citados fueron específicamente diseñados para el LBM. Propuestos de manera heurística, con correcciones ad-hoc para resolver problemas particulares, fueron implementados y probados para resolver una variedad de problemas en mecánica de fluidos computacional. Salvo el trabajo de Caiazzo et al. [118], donde realizan un análisis más riguroso del ME utilizando expansión asintótica, los métodos presentados no tienen una derivación formal en la literatura.

En este capítulo proponemos una derivación formal del ME. Desde una perspectiva de la mecánica de fluidos, se encuentran las expresiones del ME y algunos términos de corrección previamente introducidos ad-hoc. En particular se encuentra que el ME clásico

¹Por simplicidad se denota como *fuerzas* en general, para hacer referencia a la evaluación de fuerza y torque, sin distinción.

[65] es válido únicamente para evaluar fuerzas del fluido sobre cuerpos estáticos. Se muestra que las correcciones propuestas en Wen et al. [66] y Aidun et al. [62] son aproximaciones adecuadas cuando se evalúan fuerzas en un marco de referencia fijo a la grilla LBM. Siendo también válidas las correcciones alternativas de Wen et al. [67] y Krithivasan et al. [64], aproximaciones formuladas en un marco de referencia en movimiento con la frontera del cuerpo.

El contenido de este capítulo está basado en el trabajo presentado en [1].

4.1. Método de momentum exchange

En la propuesta inicial de ME introducida por Ladd [49, 117] modela la superficie del cuerpo como una lámina delgada y rígida que hace de interfaz entre dos fluidos. El interior del cuerpo es considerado también un fluido y se aplican condiciones de borde a ambos lados (interior y exterior) de la frontera. Utiliza condiciones de borde midway bounce-back (sección 3.2.1), y evalúa las fuerzas considerando el fluido a ambos lados de la frontera. Aidun et al. [62, 113] introduce algunas mejoras a la propuesta de Ladd, presenta un método robusto para analizar partículas en suspensión con relaciones de densidad sólido-fluido arbitrarias. Excluye la evaluación del fluido en el interior del cuerpo e introduce una modificación al método de condición de borde midway bounce-back, en la evaluación de las fuerzas considera únicamente el fluido exterior. Adiciona de manera heurística una contribución impulsiva debido a los nodos que entran o salen del cuerpo cuando la frontera tiene movimiento relativo a la grilla.

Basado en la idea de ME, Mei et al. [65] propone un método para evaluar fuerzas utilizando condiciones de borde en fronteras de geometría arbitraria. Como en [62], esta formulación excluye la necesidad de modelar el fluido interno. El método propuesto tiene problemas de precisión en la evaluación de fuerzas cuando la frontera tiene movimiento relativo a la grilla [66, 116]. Existen algunas propuestas para mejorar este comportamiento, Wen et al. [66] presentan una mejora introduciendo términos de fuerza impulsivos. Estos términos tienen origen en los nodos que son cubiertos y descubiertos cuando la frontera del cuerpo tiene movimiento respecto de la grilla. Estas correcciones generan cierta controversia, siendo la discusión principal las perturbaciones o "ruido" significativo que introducen en la evaluación de las fuerzas. Existen aproximaciones para evaluar fuerzas sobre cuerpos con fronteras en movimiento que no introducen contribuciones impulsivas. Basados en el trabajo de Mei et al. [65], Wen et al. [67] y Krithivasan et al. [64] proponen métodos similares (sin una prueba rigurosa) para evaluar el intercambio de cantidad de movimiento en la frontera; estas evaluaciones están formuladas en un marco de referencia que se desliza con la frontera del cuerpo.

Utilizando el LBM presentado en el Capítulo 2, con condiciones de borde del Capítulo 3, se resuelve el flujo de fluido alrededor de un cuerpo sumergido en una región del espacio denotada por Γ . Se considera a Γ como una región fija del espacio respecto a un marco de referencia inercial. En la Figura 3.1 se muestra un esquema de las regiones de interés.

El cuerpo sumergido ocupa una sub-región $\Omega(t) \subset \Gamma$ que se considera siempre contenida en Γ . Como se indica en la notación, $\Omega(t)$ puede moverse y cambiar de forma. El movimiento del cuerpo se asume prescrito, Ω es una función dada del tiempo t . $\Omega(t)$ puede estar determinado por integración de las ecuaciones de movimiento del cuerpo.

Como se muestra en el capítulo 3, las condiciones de borde pueden ser pensadas como un flujo artificial dentro de Ω . Este flujo artificial interno puede ser descompuesto en q flujos, uno para cada dirección de velocidad discreta \mathbf{c}_i . Se utiliza la Figura 3.1 para

explicar el efecto de estos flujos. Considerando el nodo de borde F y la dirección \mathbf{c}_i desde A a F , en cada paso de tiempo el rol de las condiciones de borde es remplazar el valor de $\hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t)$, obtenido del proceso de colisiones, por uno nuevo adecuadamente construido tal que se satisfaga en el borde la condición macroscópica requerida. El método de condición de borde introduce en cada paso de tiempo una cierta cantidad de movimiento en la dirección \mathbf{c}_i . Se deriva el ME evaluando la cantidad de movimiento que el método de condición de borde introduce por unidad de tiempo. En este sentido se evalúa la fuerza que cada flujo artificial ejerce al flujo de fluido externo. Contabilizando estas contribuciones para cada dirección i se obtiene la fuerza total que el cuerpo sumergido aplica sobre el flujo que lo rodea. Por principio de acción y reacción, la fuerza que el fluido externo ejerce sobre el cuerpo sumergido es opuesta a la descrita anteriormente.

Más adelante utilizamos el sistema de partículas ficticias asociado a la velocidad \mathbf{c}_i que a tiempo t está exactamente dentro de $\Omega(t)$. A tiempo $t + \delta t$ este sistema se desplaza una cantidad $\mathbf{c}_i \delta t$. Se denota con $\mathcal{P}_{i,t}(t')$ al conjunto de nodos asociado al sistema de partículas a tiempo t' , con $\mathbf{P}_{i,t}(t')$ su cantidad de movimiento a tiempo t' . Se denota con \mathcal{N}_s^t al conjunto de nodos en $\Omega(t)$.

En las secciones siguientes se introducen algunos resultados de utilidad y luego se deriva la fuerza y el torque que el fluido ejerce al cuerpo a través de su superficie. Se abordan casos de cuerpos estáticos y en movimiento.

4.1.1. Teorema de transporte de Reynolds

Para futuras referencias en el capítulo se presenta brevemente el teorema de transporte de Reynolds. Consideremos primero el caso de un fluido, donde $\Omega_S(t)$ denota una región que encierra una porción fija de materia. En este caso la velocidad de la superficie $\partial\Omega_S(t)$ en cualquier punto es precisamente la velocidad del fluido en ese punto. Se denota con $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t)$ una densidad (de volumen) que describe alguna propiedad del fluido (densidad de masa, densidad de cantidad de movimiento, densidad de momento angular, etc.) La propiedad extensiva correspondiente es

$$\mathbf{N}_S(t) = \int_{\Omega_S(t)} \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}. \quad (4.1)$$

El teorema de transporte dice que

$$\frac{d\mathbf{N}_S}{dt} = \int_{\Omega_S(t)} \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial t} d\mathbf{x} + \oint_{\partial\Omega_S(t)} \boldsymbol{\eta} \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS. \quad (4.2)$$

con \mathbf{u} denotando la velocidad del fluido, y $\hat{\mathbf{n}}$ es una normal al borde $\partial\Omega_S$ en dirección saliente a Ω_S .

De manera independiente se considera un volumen de control² $\Omega_C(t)$ con movimiento arbitrario, y con $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ se denota la velocidad de un punto en la superficie $\partial\Omega_C(t)$. En este caso se tiene:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_C(t)} \boldsymbol{\eta} d\mathbf{x} = \int_{\Omega_C(t)} \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial t} d\mathbf{x} + \oint_{\partial\Omega_C(t)} \boldsymbol{\eta} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS. \quad (4.3)$$

Para algún tiempo particular de interés se elige a $\Omega_C(t)$ coincidente con $\Omega_S(t)$, no necesariamente coincidente para otro tiempo. Esto es $\Omega_C(t) = \Omega_S(t)$, esta igualdad puede no

²Región del fluido definida por conveniencia, no necesariamente se mueve con el fluido.

mantenerse para $t' \neq t$. Luego es posible eliminar el primer término del lado derecho en (4.2) utilizando (4.3), obteniendo

$$\frac{d\mathbf{N}_S}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_C(t)} \boldsymbol{\eta} d\mathbf{x} + \oint_{\partial\Omega_C(t)} \boldsymbol{\eta}(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS. \quad (4.4)$$

Notar que $\mathbf{u} - \mathbf{v}$ es la velocidad del fluido en el punto del borde con respecto al mismo punto de borde.

Estamos interesados en dos casos particulares. Uno cuando $\mathbf{N} = \mathbf{P}$ es la cantidad de movimiento total contenido en $\Omega_S(t)$, tal que $\boldsymbol{\eta} = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. El otro es cuando $\mathbf{N} = \mathbf{H}$ es el momento angular total con respecto a un punto de referencia \mathbf{x}_0 , tal que $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, con $\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$. La evaluación de la ecuación (4.2) o (4.4) para los casos de cantidad de movimiento y momento angular brindan la fuerza o el torque aplicado sobre el fluido contenido en $\Omega_S(t) = \Omega_C(t)$.

El primer término del lado derecho en (4.4) representa la variación total de $\boldsymbol{\eta}$ contenido en el volumen de control $\Omega_C(t)$. El segundo término del lado derecho es una integral de superficie que evalúa la cantidad $\boldsymbol{\eta}$ que fluye del volumen $\Omega_C(t)$.

4.1.2. Fuerza

La cantidad de movimiento por unidad de tiempo en el i -ésimo sistema de partículas es:

$$\frac{d\mathbf{P}_{i,t}}{dt} = \frac{\mathbf{P}_{i,t}(t + \delta t) - \mathbf{P}_{i,t}(t)}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) \quad (4.5)$$

donde

$$\mathbf{P}_{i,t}(t') = \delta x^d \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t')} \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t'). \quad (4.6)$$

Despreciando términos $\mathcal{O}(\delta t)$ se tiene:

$$\frac{d\mathbf{P}_{i,t}}{dt} \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \left(\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t+\delta t)} \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) - \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t) \right). \quad (4.7)$$

La expresión (4.6) es la componente i de la versión discretizada en el sentido del LBM de la cantidad demovimiento del fluido artificial en un dominio $\Omega(t)$.S

4.1.3. Fuerza sobre cuerpos estáticos

Se asume en primer lugar el caso de cuerpos estáticos, Ω y \mathcal{N}_s^t son constantes en el tiempo. Como consecuencia del desplazamiento del sistema de partículas de t a $t + \delta t$, el conjunto de nodos que lo representa se modifica, adicionando nuevos nodos y perdiendo otros en el desplazamiento. Estos conjuntos se los denota como \mathcal{G}_i y \mathcal{L}_i para los nodos *ganados* y *perdidos* en el desplazamiento. Este desplazamiento se ejemplifica en la Figura 4.1 para el modelo D2Q9 en las direcciones $i = 1$ y $i = 5$. El modelo D2Q9 se muestra en la sección C.1

El primer término de (4.7) puede ser reescrito utilizando los conjuntos \mathcal{G}_i y \mathcal{L}_i . Para simplificar notación se define $g_i = \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t)$, luego el primer término en (4.7) se

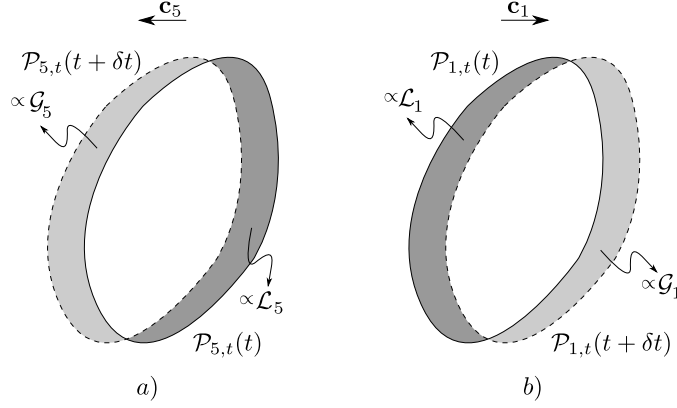


FIGURA 4.1: Diagrama esquemático de las áreas ocupadas por $\mathcal{P}_{i,t}(t)$ y $\mathcal{P}_{i,t}(t + \delta t)$ para $i = 1, 5$. La figura muestra en escala de grises un área proporcional al tamaño del conjunto de nodos \mathcal{G}_i ganados y \mathcal{L}_i perdido cuando $\mathcal{P}_{i,t}(t)$ se desplaza una longitud δx en las direcciones \mathbf{c}_5 (esquema a) y \mathbf{c}_1 (esquema b) del modelo D2Q9.

puede expresar:

$$\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t + \delta t)} g_i = \sum_{A \in \mathcal{G}_i} g_i - \sum_{A \in \mathcal{L}_i} g_i + \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} g_i \quad (4.8)$$

Remplazando en (4.7) y sumando para los q sistemas se obtiene la aproximación LBM a la fuerza en el sistema de partículas en Ω

$$\mathbf{F}_c(t) \simeq \delta x^d \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} \mathbf{c}_i \frac{f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) - f_i(\mathbf{x}_A, t)}{\delta t} + \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(\sum_{A \in \mathcal{G}_i} g_i - \sum_{A \in \mathcal{L}_i} g_i \right) \quad (4.9)$$

Es de interés comparar la expresión anterior con el teorema de transporte de Reynolds (4.4) aplicado a los flujos artificiales dentro de $\Omega(t)$. La fuerza introducida por las condiciones de borde es una fuerza de restricción sobre el cuerpo tal que lo mantiene en una posición fija. El primer término del lado derecho de (4.9) es una aproximación LBM al término de volumen en (4.4). El segundo término en (4.9) está compuesto de la suma sobre conjuntos de nodos próximos al borde $\partial\Omega$. Esta es la aproximación LBM al término en la superficie de (4.4). Como la interacción entre el cuerpo y el fluido que lo rodea ocurre únicamente a través de la superficie del cuerpo, estamos interesado únicamente en el segundo término de (4.9). Por principio de acción y reacción, la fuerza que el fluido ejerce sobre el cuerpo es:

$$\mathbf{F}_f(t) \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(- \sum_{A \in \mathcal{G}_i} g_i + \sum_{A \in \mathcal{L}_i} g_i \right) \quad (4.10)$$

Notar que $A \in \mathcal{L}_i$ si y solo si existe un nodo $B \in \mathcal{G}_i$ tal que $\mathbf{x}_A = \mathbf{x}_B + \mathbf{c}_i \delta t$. Luego:

$$\mathbf{F}_f(t) \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(- \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) + \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) \right) \quad (4.11)$$

La anterior se puede reescribir considerando que una suma sobre todos los conjuntos \mathcal{G}_i se puede escribir como una suma sobre todo \mathcal{G}_i :

$$\mathbf{F}_f(t) \simeq -\frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \mathbf{c}_i \left(f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) + f_i(\mathbf{x}_A + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) \right). \quad (4.12)$$

Notando que

$$f_i(\mathbf{x}_A + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) = \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t) \quad ; \quad f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) = \hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t). \quad (4.13)$$

La ecuación de la izquierda es el proceso de distribución (streaming) desde un nodo de borde en la dirección hacia Ω a través del borde. La ecuación de la derecha es el proceso de distribución desde un nodo interno a Ω en la dirección saliente a través de la frontera; este valor de \hat{f}_i lo provee el método de condición de borde. El valor de \hat{f}_i se obtiene del proceso de colisión. La fuerza que el fluido ejerce sobre el cuerpo sumergido puede ser escrita como:

$$\mathbf{F}_f(t) \simeq -\frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \mathbf{c}_i \left(\hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) + \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t) \right). \quad (4.14)$$

Se debe tener especial cuidado al comparar la expresión (4.14) con las equivalentes presentadas en la literatura, las definiciones del conjunto \mathcal{G}_i suelen ser diferentes. La expresión (4.14) es presentada extensivamente en la literatura [62, 65, 66, 116] como método de *momentum exchange* para evaluar fuerzas en cuerpos estáticos.

4.1.4. Fuerza sobre cuerpos en movimiento

Se derivan dos métodos para evaluar la fuerza del fluido sobre cuerpos en movimiento. Utilizando estos métodos se muestra que las propuestas presentadas en [62, 66] y [64, 67] son ambas una aproximación adecuada para evaluar la fuerza del fluido sobre cuerpos en movimiento. La validez y precisión de estas propuestas son analizadas en la literatura únicamente vía verificación de resultados numéricos.

Cuando el cuerpo sumergido tiene movimiento, la región $\Omega(t)$ y el conjunto de nodos \mathcal{N}_s^t no son constantes. Para movimientos arbitrarios, puede ocurrir que en algún tiempo t el conjunto $\mathcal{N}_s^{t+\delta t}$ sea el mismo que \mathcal{N}_s^t . De todos modos es de utilidad definir los siguientes conjuntos de nodos \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t como:

$$\begin{aligned} A \in \mathcal{N}_{s+}^t, & \quad \text{si } A \in \mathcal{N}_s^{t+\delta t} \quad \text{y } A \notin \mathcal{N}_s^t, \\ A \in \mathcal{N}_{s-}^t, & \quad \text{si } A \in \mathcal{N}_s^t \quad \text{y } A \notin \mathcal{N}_s^{t+\delta t}. \end{aligned}$$

La Figura 4.2 muestra un esquema de una situación típica cuando el cuerpo tiene movimiento arbitrario. En escala de grises se identifican regiones proporcionales a los conjuntos de interés.

La expresión (4.8) sigue siendo válida en este caso. Sin embargo, a tiempo $t + \delta t$ es necesario hacer referencia a la nueva posición del cuerpo³, se reescribe la sumatoria sobre

³Es necesario hacer esta referencia para identificar los términos de borde y los volumétricos

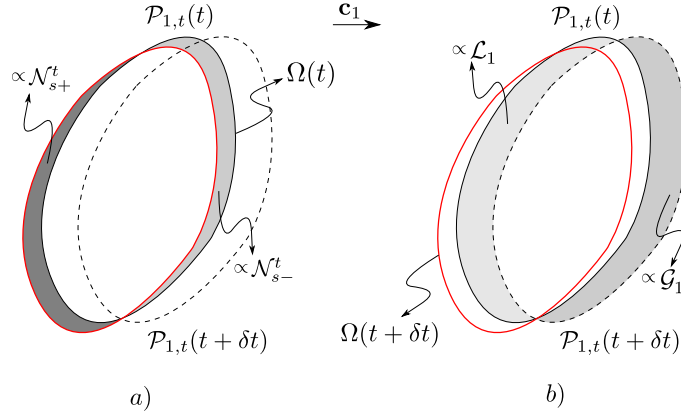


FIGURA 4.2: Diagrama esquemático del área ocupada por los nodos $\mathcal{P}_{1,t}(t)$ y $\mathcal{P}_{1,t}(t + \delta t)$. Las áreas sombreadas en escala de grises son proporcionales al tamaño de los conjuntos de nodos \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t (esquema a), y \mathcal{G}_1 y \mathcal{L}_1 (esquema b) como se definen en el texto.

$\mathcal{P}_{i,t}(t)$ como:

$$\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} g_i = \sum_{A \in \mathcal{N}_s^{t+\delta t}} g_i + \sum_{A \in \mathcal{N}_{s-}^t} g_i - \sum_{A \in \mathcal{N}_{s+}^t} g_i \quad (4.15)$$

4.1.4.1. Fuerza sobre cuerpos en movimiento: método 1

Para encontrar la expresión que buscamos se reemplaza (4.15) en (4.8) y este resultado parcial en (4.7). Luego, sumando sobre $i \in \mathcal{N}_q$ se obtiene una aproximación a la fuerza del fluido actuando sobre el cuerpo Ω

$$\mathbf{F}_f(t) \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(- \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \mathbf{c}_i (\hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) + \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t)) \right. \\ \left. - \sum_{A \in \mathcal{N}_{s-}^t} \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) + \sum_{A \in \mathcal{N}_{s+}^t} \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) \right). \quad (4.16)$$

Donde igual que antes, se considera la contribución de los términos superficiales en la evaluación de la fuerza. La ecuación (4.16) tiene un término principal igual al obtenido en el caso del cuerpo estático, representando el cambio de cantidad de movimiento de las partículas a través de la frontera. Adicionalmente se recuperan los dos últimos términos, estos introducen una cantidad de movimiento asociada a los nodos que entran o salen de $\Omega(t)$ como consecuencia de su desplazamiento. La expresión (4.16) es similar a la introducida en Aidun et al. [62] y Wen et al. [66], extensivamente utilizada en la literatura para evaluar en el LBM la fuerza que un flujo de fluido ejerce sobre cuerpos en movimiento. De la derivación de (4.16) se muestra que los términos adicionales de la formulación propuesta son necesarios para obtener la contribución superficial completa en la evaluación de la fuerza sobre cuerpos en movimiento. En [62] y [66] estos términos adicionales son introducidos ad-hoc.

Existen diferencias menores entre la expresión (4.16) y las introducidas en [62] y [66]. En estas últimas propuestas, para evaluar la fuerza a tiempo t , consideran los nodos que ingresan o salen de $\Omega(t)$ entre $t - \delta t$ y t (hacia atrás en el tiempo). En la evaluación de la expresión (4.16) se requiere conocer \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t , los conjuntos de nodos que entran y salen de Ω entre t y $t + \delta t$ (hacia adelante en el tiempo). La determinación de estos conjuntos es directa si el movimiento del cuerpo está predeterminado para todo tiempo, en este caso

la expresión (4.16) es explícita. Si el movimiento del cuerpo se obtiene simultáneamente con el fluido, la expresión (4.16) es implícita. En el último caso es conveniente utilizar una aproximación para determinar \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t tal que la ecuación para la fuerza sea explícita.

Los resultados que se presentan en este trabajo se obtienen utilizando dos aproximaciones diferentes para encontrar \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t . La primera aproximación es el procedimiento propuesto en [62]. La segunda aproximación es más elaborada. Se obtiene \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t por aproximación de la región $\Omega(t + \delta t)$, considerando que el movimiento es con la velocidad conocida en el paso temporal previo. Con esta información la fuerza puede ser evaluada a tiempo t y luego se corrige el desplazamiento de Ω desde t a $t + \delta t$. La segunda aproximación es computacionalmente mas costosa, dos desplazamientos de Ω deben ser evaluados en cada paso de tiempo. Ambas aproximaciones brindan buenos resultados, sin diferencias apreciables en los casos analizados. Sin embargo, la segunda propuestas se considera una mejor aproximación, existiendo la posibilidad de ser una representación exacta en algunas situaciones particulares.

Las variables asociadas a los nodos del conjunto \mathcal{N}_{s-}^t no tienen valor asignado a tiempo t ya que estos nodos ingresan a la región del fluido entre t y $t + \delta t$. Como se menciona en la sección 3.4 varios métodos para inicializar estas variables son propuestos en la literatura. En los problemas de verificación numérica analizados se utiliza el método propuesto por Lallemand et al. [54].

La evaluación de la fuerza mediante la expresión (4.16) presenta perturbaciones (o ruido) en una frecuencia a la que los nodos entran y salen de Ω . Estas perturbaciones tienen dos contribuciones. La de menor influencia es debida a una inicialización incorrecta de las variables en los nodos del borde que salen de Ω e ingresan en el fluido. La principal fuente de ruido es la naturaleza impulsiva de los términos en (4.16) relacionados con \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t .

Como observación final, la expresión (4.16) no presenta invariancia Galileana. Clausen et al. [119] proponen una corrección para obtener invariancia Galileana en la evaluación de la fuerza cuando se utiliza el método de Aidun et al. [62], que como se mencionó anteriormente es similar a la ecuación (4.16).

4.1.4.2. Fuerza sobre cuerpos en movimiento: método 2

Wen et al. [67] y Krithivasan et al. [64] presentan un método alternativo ad-hoc para evitar el ruido indeseado en la evaluación de fuerzas. Este método se puede obtener considerando que la derivada temporal de la cantidad de movimiento de las partículas es independiente del marco de referencia inercial utilizado.

La cantidad de movimiento de un elemento de fluido centrado en \mathbf{x} , visto desde un marco de referencia inercial que se mueve con velocidad \mathbf{v} con respecto a la grilla, es escrito en el LBM como una superposición de q contribuciones de la forma $(\mathbf{c}_i - \mathbf{v})f_i(\mathbf{x}, t)$. Para evaluar (4.5) se elige en cada nodo $A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)$ un marco de referencia inercial conveniente, cuya velocidad con respecto a la grilla se denota con $\mathbf{v}(\mathbf{x}_A, t)$. Es conveniente enfatizar aquí que el flujo de fluido (\mathbf{f}) está siempre evaluado en un marco de referencia inercial fijo a la grilla. Para cada partícula es necesario mantener el mismo marco de referencia en el lapso de tiempo $(t, t + \delta t)$ de la aproximación. Luego, la cantidad de movimiento (que las condiciones de borde adicionan) por unidad de tiempo del i -ésimo sistema de partículas

puede escribirse como:

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}_{i,t}}{dt} \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \left(\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t+\delta t)} (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) - \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A, t)) f_i(\mathbf{x}_A, t) \right). \quad (4.17)$$

En analogía con (4.8) se puede descomponer el primer sumando de (4.17) como:

$$\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t+\delta t)} \hat{g}_i = \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} \hat{g}_i + \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \hat{g}_i - \sum_{A \in \mathcal{L}_i} \hat{g}_i \quad (4.18)$$

donde $\hat{g}_i = (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t)$. La última suma sobre \mathcal{L}_i puede ser expresada como suma sobre \mathcal{G}_i , y la primer suma en (4.18) puede ser segmentada como en (4.15). Las velocidades de los referenciales para los nodos en \mathcal{L}_i provienen de nodos externos $\mathcal{P}_{i,t}(t)$. Elegimos $\mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}_A, t)$ para $A \in \mathcal{L}_i$. Utilizando esto en (4.17), sumando sobre i y manteniendo únicamente los términos de superficie se obtiene la fuerza del fluido sobre el cuerpo:

$$\mathbf{F}_f \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left[\sum_{A \in \mathcal{N}_{s+}^t} \hat{g}_i - \sum_{A \in \mathcal{N}_{s-}^t} \hat{g}_i - \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \left((\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) - (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) f_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) \right) \right] \quad (4.19)$$

Se realiza una elección específica de los referenciales utilizados para los nodos en $\mathcal{P}_{i,t}(t)$ cercanos al borde. Se adopta $\mathbf{v}(\mathbf{x}_A, t)$ como una velocidad media de los puntos del borde (ver la Figura 3.1) asociados a \mathbf{x}_A . Con esta elección, los primeros dos términos del lado derecho de (4.19) son despreciables; ambos $\sum_{i \in \mathcal{N}_q} \mathbf{c}_i f_i$ y $\sum_{i \in \mathcal{N}_q} \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t)$ son una aproximación a $\rho \mathbf{u}$ ($\sim \rho \mathbf{v}$) en el borde. Otros nodos no cercanos al borde contribuyen en los términos asociados al volumen y no se consideran, luego la elección del referencial no es importante en estos nodos. El resultado obtenido es una discretización en el sentido del LBM de los términos de superficie en el lado derecho de (4.4).

$$\mathbf{F}_f = -\frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \left((\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) \hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) - (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t) \right) \quad (4.20)$$

El método utilizado en [64, 67], en lugar de elegir un único referencial para cada nodo $\mathbf{x}_A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)$ cercano al borde, utiliza diferentes referenciales para cada dirección i que apunta hacia el borde. Esto es una aproximación a (4.20) dada por

$$\mathbf{F}_f = -\frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \left((\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_{A,i}(t)) \hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) - (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_{A,i}(t)) \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t) \right) \quad (4.21)$$

donde $\mathbf{v}_{A,i}(t)$ es la velocidad de los puntos de borde \mathbf{x}_A en la dirección i . Wen et al. [67] evalúan numéricamente esta aproximación y muestran que la ecuación (4.21) tiene invariancia Galileana.

Ambas expresiones (4.16) y (4.20) son válidas y correctas, constituyen diferentes aproximaciones de la fuerza ejercida por un flujo de fluido sobre un cuerpo inmerso. La expresión (4.20) tiene algunas ventajas. Es computacionalmente más eficiente ya que no es necesario determinar \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t . Como resultado el método es siempre explícito y presenta una notoria reducción del ruido en la evaluación de fuerzas como muestran Wen et al. [67] para la aproximación (4.21).

Si bien el método presentado fue analizado y pensado en cuerpos cerrados, es posible generalizar la evaluación de fuerzas en fronteras de cuerpos abiertos. Un caso límite es aquel donde el cuerpo es una lámina delgada con sus extremos no conectados. La imposición de las condiciones de borde trata ambas caras de la lámina como la frontera de un sólido. Con la misma idea se puede evaluar la cantidad de movimiento aportado por el método de condición de borde por unidad de tiempo. Como son solo de interés los términos superficiales en la formulación propuesta, la evaluación de las fuerzas puede realizarse. En este sentido la expresión (4.20) es la más apropiada cuando el cuerpo tiene movimiento.

4.1.5. Torque

La derivación del torque ejercido por el flujo de un fluido sobre un cuerpo es análoga a la de la fuerza. El momento angular por unidad de tiempo introducido por el i -ésimo flujo artificial es:

$$\frac{d\mathbf{H}_{i,t}}{dt} = \frac{\mathbf{H}_{i,t}(t + \delta t) - \mathbf{H}_{i,t}(t)}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) \quad (4.22)$$

donde

$$\mathbf{H}_{i,t}(t') = \delta x^d \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t')} \mathbf{r}(\mathbf{x}_A) \times \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t'), \quad (4.23)$$

con $\mathbf{r}(\mathbf{x}_A) = \mathbf{x}_A - \mathbf{x}_0$, y $\mathbf{H}_{i,t}(t')$ el momento angular del sistema de partículas a tiempo t' con respecto a un punto fijo \mathbf{x}_0 . Despreciando términos $\mathcal{O}(\delta t)$ en la ecuación (4.22) se tiene:

$$\frac{d\mathbf{H}_{i,t}}{dt} \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \left(\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t+\delta t)} \mathbf{r}(\mathbf{x}_A) \times \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) - \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} \mathbf{r}(\mathbf{x}_A) \times \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t) \right). \quad (4.24)$$

La expresión (4.23) es la componente i de la versión discretizada en el sentido del LBM del momento angular del fluido artificial en $\Omega(t)$.

Como se realiza en la sección 4.1.2, primero se aborda el caso de cuerpo estático y luego se extiende la propuesta a un caso de cuerpo en movimiento.

4.1.6. Torque sobre cuerpos estáticos

Utilizando los conjuntos \mathcal{G}_i y \mathcal{L}_i (ver la Figura 4.1) para reescribir el primer términos de (4.24), y denotando por simplicidad $h_i = \mathbf{r}(\mathbf{x}_A) \times \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t)$ se tiene:

$$\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t+\delta t)} h_i = \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} h_i + \sum_{A \in \mathcal{G}_i} h_i - \sum_{A \in \mathcal{L}_i} h_i \quad (4.25)$$

Insertando en (4.24) y sumando sobre los q sistemas se obtiene una aproximación al torque en Ω ,

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_c(t) \simeq \delta x^d \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} \mathbf{r}(\mathbf{x}_A) \times \mathbf{c}_i \frac{f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) - f_i(\mathbf{x}_A, t)}{\delta t} \\ + \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(\sum_{A \in \mathcal{G}_i} h_i - \sum_{A \in \mathcal{L}_i} h_i \right) \end{aligned} \quad (4.26)$$

Como en el caso de la fuerza, podemos comparar esta expresión con el teorema de transporte de Reynolds (4.4). Manteniendo la aproximación a los términos de superficie, se obtiene una expresión para el torque que el flujo de fluido aplica sobre el cuerpo,

$$\mathbf{T}_f(t) \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(- \sum_{A \in \mathcal{G}_i} h_i + \sum_{A \in \mathcal{L}_i} h_i \right) \quad (4.27)$$

de la relación entre $\mathbf{x}_A \in \mathcal{L}_i$ y $\mathbf{x}_B \in \mathcal{G}^i$ ($\mathbf{x}_A = \mathbf{x}_B + \mathbf{c}_i \delta t$), y utilizando (4.13)

$$\mathbf{T}_f \simeq - \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i=0}^{q-1} \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \left(\mathbf{r}(\mathbf{x}_A) \times \mathbf{c}_i (\hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) + \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t)) \right) \quad (4.28)$$

Esta expresión se utiliza y aparece extensivamente en la literatura [62, 65, 66, 116] como el método de *momentum exchange* para evaluar el torque en cuerpos estáticos.

4.1.7. Torque sobre cuerpos en movimiento

En esta sección se sigue un procedimiento y razonamiento análogo al de la sección 4.1.4. Se muestran dos derivaciones que brindan métodos alternativos para evaluar el torque.

Se reescribe el primer término del lado derecho de (4.25) para obtener la contribución superficial adecuada cuando el cuerpo se mueve,

$$\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} h_i = \sum_{A \in \mathcal{N}_s^{t+\delta t}} h_i + \sum_{A \in \mathcal{N}_{s-}^t} h_i - \sum_{A \in \mathcal{N}_{s+}^t} h_i \quad (4.29)$$

4.1.7.1. Torque sobre cuerpos en movimiento: método 1

Reemplazando (4.29) en (4.25), y desde la ecuación (4.24) sumando sobre los q sistemas se obtiene una aproximación al torque sobre el cuerpo a tiempo t . Luego el torque que el flujo de fluido ejerce sobre el cuerpo en movimiento es:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_f(t) \simeq - \frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(\sum_{A \in \mathcal{N}_{s-}^t} h_i - \sum_{A \in \mathcal{N}_{s+}^t} h_i + \right. \\ \left. \sum_{A \in \mathcal{G}_i} \mathbf{r}(\mathbf{x}_A) \times \mathbf{c}_i (\hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) + \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t)) \right). \end{aligned} \quad (4.30)$$

donde se utiliza la relación de los conjuntos \mathcal{G}_i y \mathcal{L}_i , y las igualdades (4.13).

La expresión (4.30) tiene dos contribuciones al torque en $\Omega(t)$. La primera es la contribución de los nodos que entran y salen de $\Omega(t)$ como consecuencia de su desplazamiento a

$\Omega(t + \delta t)$. Esta contribución está compuesta por términos impulsivos como ocurre con el método de la sección 4.1.4. El segundo es la contribución debida al intercambio de cantidad de movimiento a través de la frontera del cuerpo como consecuencia del desplazamiento del sistema de partículas desde t a $t + \delta t$.

La expresión (4.30) es similar a la presentada en la literatura para evaluar torque cuando se analizan cuerpos en movimiento. Esta expresión introduce naturalmente los términos de corrección adicionados ad-hoc en [62] y [66].

Como en el caso de la fuerza, existe una diferencia entre la propuesta de este trabajo y la presentada en [62] y [66]. Los métodos difieren en el tiempo al cual los conjuntos de nodos \mathcal{N}_{s+}^t y \mathcal{N}_{s-}^t son evaluados. Para evitar una expresión implícita cuando el movimiento del cuerpo no está especificado, se utilizan métodos de aproximación ya presentados en la sección 4.1.4 para determinar estos conjuntos.

Como es de esperar, según ya se introdujo en la evaluación de la fuerza, en éste método se observan perturbaciones en el torque a una frecuencia equivalente al ingreso y salida de nodos al dominio del cuerpo como consecuencia de su desplazamiento.

4.1.7.2. Torque sobre cuerpos en movimiento: método 2

Como en el caso de la fuerza, se obtiene una derivación alternativa para el torque considerando la derivada temporal del momento angular para cada partícula en diferentes marcos de referencia. Los referenciales para evaluar el torque en los nodos de borde son elegidos con un origen común $\mathbf{x}_0(t)$ y diferentes velocidades como se realiza en la derivación de (4.20). Se define $\mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) = \mathbf{x}_A - \mathbf{x}_0(t)$, donde $\mathbf{x}_0(t)$ es el origen a tiempo t del referencial inercial móvil. El momento angular por unidad de tiempo en el i -ésimo sistema de partículas es:

$$\frac{d\hat{\mathbf{H}}_{i,t}}{dt} \simeq \frac{\delta x^d}{\delta t} \left(\sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t+\delta t)} (\mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t + \delta t) \times (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t) - \sum_{A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)} \mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) \times (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A, t)) f_i(\mathbf{x}_A, t) \right). \quad (4.31)$$

con

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t + \delta t) &= \mathbf{x}_A - \mathbf{x}_0(t) - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) \delta t = \\ &= \mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) - \mathbf{c}_i \delta t + (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) \delta t, \end{aligned} \quad (4.32)$$

donde el último término en la 4.32 no contribuye en (4.31) debido al producto vectorial.

Desde la ecuación (4.31), utilizando (4.25) y (4.29), con h_i remplazado por $\hat{h}_i = (\mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) - \mathbf{c}_i \delta t) \times (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) f_i(\mathbf{x}_A, t + \delta t)$, sumando sobre los q sistemas y considerando términos de la superficie se obtiene una aproximación al torque que el flujo de fluido ejerce sobre el cuerpo a tiempo t .

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_f(t) &\simeq -\frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(\sum_{A \in \mathcal{N}_{s-}^t} \hat{h}_i - \sum_{A \in \mathcal{N}_{s+}^t} \hat{h}_i + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{A \in \mathcal{G}_i} [(\mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) - \mathbf{c}_i \delta t) \times (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) \hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) \right. \\ &\quad \left. - \mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) \times (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t)) \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t) \right]. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Como ocurre con las fuerzas, los primeros dos términos son despreciables y la ecuación se convierte en explícita. Como en el método 2 para la evaluación de la fuerza (sección 4.1.4.2), en cada nodo $\mathbf{x}_A \in \mathcal{P}_{i,t}(t)$ cercano al borde es posible tomar como aproximación diferentes referenciales para cada dirección i hacia el borde ($i : \bar{i} \in \mathcal{N}_{Ib}(\mathbf{x}_A)$). La aproximación resultante es:

$$\mathbf{T}_f(t) \simeq -\frac{\delta x^d}{\delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} \left(\sum_{A \in \mathcal{G}_i} [(\mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) - \mathbf{c}_i \delta t) \times (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_{A,i}(t)) \hat{f}_i(\mathbf{x}_A - \mathbf{c}_i \delta t, t) - \mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) \times (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_{A,i}(t)) \hat{f}_i(\mathbf{x}_A, t)] \right). \quad (4.34)$$

donde $\mathbf{v}_{A,i}(t)$ es la velocidad de los puntos de borde de \mathbf{x}_A en la dirección i . Notar que la expresión presentada en [64, 67] puede ser obtenida desde (4.34) si el factor $(\mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t) - \mathbf{c}_i \delta t)$ en el primer producto cruz es aproximado por $\mathbf{r}(\mathbf{x}_A, t)$.

4.2. Problemas de verificación

En esta sección se comparan los resultados obtenidos de las expresiones derivadas en la sección 4.1 para evaluar la fuerza y el torque sobre un cuerpo sumergido en un fluido. Se analizan dos problemas con resultados conocidos, obtenidos con otros métodos clásicos de la mecánica de fluido computacional (FEM y FDM).

Se tiene especial interés en analizar la dinámica de dos cuerpos simples en sedimentación en un fluido Newtoniano contenido en un canal vertical. La geometría de los cuerpos que se analizan son un disco circular y un disco elíptico. La precisión en la determinación de la fuerza y el torque sobre los cuerpos en sedimentación afecta directamente su movimiento. Si las fuerzas son evaluadas de manera adecuada, el desplazamiento y rotación de los cuerpos a lo largo del dominio debe ser comparable con los datos presentados en la literatura [66, 115, 116, 120].

Para resolver la dinámica del fluido se utiliza un esquema de velocidad D2Q9, y el LBM-BGK cuasi—incompresible con $\tau = 0.6$. La densidad del fluido y viscosidad cinemática utilizadas son $\rho_f = 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ y $\nu = 1 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ respectivamente. El fluido está inicialmente en reposo y se impone velocidad cero en los bordes horizontales y verticales para todo tiempo. En los bordes regulares se utiliza el método de condición de borde presentado en la sección 3.2.3, que para el caso bidimensional es equivalente al método de Zou et al. [46] (ver sección C.4.4). Sobre la frontera de geometría no regular se imponen condición de borde Dirichlet de velocidad, se utiliza el método FH-MSL de la sección 3.3.2. Sobre los cuerpos actúa la fuerza de la gravedad $g = 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$, paralela al eje y con dirección positiva según el sistema de coordenadas que se utiliza (ver Figura 4.3).

El movimiento de cada cuerpo se determina por integración de las ecuaciones de movimiento de Newton. La fuerza aplicada en cada cuerpo esta dada por: la fuerza del fluido, el peso y la fuerza de flotación. El torque aplicado solo tiene origen en el generado por el flujo de fluido. Para integrar en el tiempo se utiliza el esquema numérico Euler Forward, de primer orden de precisión como el LBM (ver sección 2.4). También se verificaron los resultados con un método de integración de dos pasos (Adams-Bashforth), no se encontraron diferencias apreciables en los resultados.

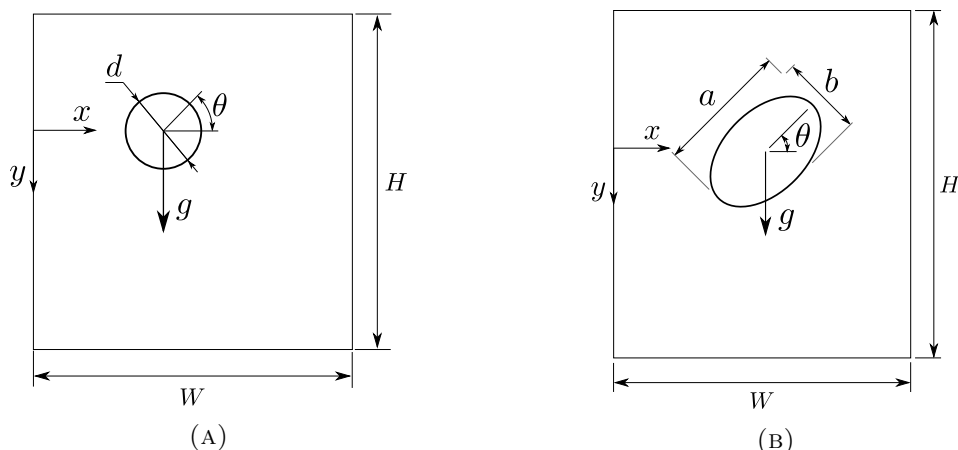


FIGURA 4.3: Diagramas esquemáticos de los problemas de sedimentación de un disco y una elipse en un canal vertical bidimensionales. Figura A: Esquema del disco circular en sedimentación. Figura B: Esquema del disco elíptico en sedimentación.

4.2.1. Sedimentación de un disco circular

En este problema de verificación se analiza la dinámica de un disco bidimensional en sedimentación a lo largo de un canal vertical. En la Figura 4.3a se muestra un esquema del problema que se analiza. Se evalúa la dinámica del disco para dos relaciones de densidad $r_\rho = \rho_b/\rho_f$, con ρ_b y ρ_f la densidad del cuerpo y del fluido respectivamente.

Las dimensiones del canal vertical son $W = 4d$ y $H = 8W$; el diámetro del disco es $d = 1 \times 10^{-3}$ m. El centro del disco está inicialmente ubicado en $(x, y) = (7.6 \times 10^{-4}, 0)$ m con el origen del sistema de coordenadas en 2.5×10^{-2} m desde el borde horizontal inferior del canal como se muestra en la Figura 4.3a. Se discretiza el dominio computacional con $n_x \times n_y = 135 \times 1073$ nodos de grilla.

Se evalúan las performance del método para dos relaciones de densidad $r_\rho = 1.01$, y 1.03. En la Figuras 4.4, 4.5 y 4.7, 4.8 se muestra como función del tiempo la velocidad horizontal y vertical, la trayectoria del centro del disco, y su rotación angular para $r_\rho = 1.01$ y $r_\rho = 1.03$ respectivamente.

Cuando el disco es liberado desde la posición inicial a tiempo $t = 0$ s, comienza su desplazamiento y rotación a lo largo del canal. Como se puede observar en las Figuras 4.4, 4.5 y 4.7, 4.8, el disco tiene un movimiento inicial transitorio, convergiendo luego a uno estacionario.

Se comparan resultados utilizando el ME clásico (4.14) y (4.28), y el método corregido propuesto dado por (4.16), (4.30) y (4.21), (4.34). En la figura 4.6 se muestra una comparación de los resultados obtenidos con los presentados por Wen et al. [66] para el mismo problema⁴. Los resultados obtenidos con el método corregido tienen una buena correlación con los presentados en Li et al. [116] (obtenido utilizando LBM con SI), Wen et al. [66] (obtenido utilizando LBM con una expresión similar a (4.16), (4.30)) y Feng et al. [120] (obtenidos utilizando FEM). Se pueden observar visibles discrepancias en la determinación de la velocidad horizontal y la posición del disco obtenida con el método clásico y el método corregido. Las mayores diferencias en los resultados entre ambos métodos se encuentran en el régimen transitorio; no se observan diferencias significativas en el régimen estacionario. Observaciones similares son realizadas en [66] y [116].

⁴Se excluye una comparación de resultados para la evolución del ángulo de rotación ya que Wen et al. [66] no presentan explícitamente este valor.

4.2.2. Sedimentación de un disco elíptico

En esta sección se presenta un problema similar al anterior, se analiza la dinámica de sedimentación de un disco elíptico en un fluido Newtoniano contenidos en un canal vertical. Este problema tiene resultados conocidos, específicamente tomamos como referencia uno presentado por [115] donde el autor utiliza LBM con SI para obtener las fuerzas del fluido sobre el cuerpo.

En la Figura 4.3b se muestra un diagrama esquemático de la configuración geométrica. El problema esta caracterizado por tres parámetros adimensionales, la relación de aspecto $\alpha = a/b$, la relación de bloqueo $\beta = W/a$, y la relación de densidad r_ρ como se definió en la sección 4.2.1; con a y b el eje de mayor y menor longitud de la elipse respectivamente, y W el ancho del canal vertical.

Xia et al. [115] realizan un análisis exhaustivo de este problema de sedimentación. Estudian la influencia de los parámetros adimensionales en la dinámica del cuerpo. Por simplicidad en este trabajo se analiza el problema con una única relación de bloqueo, elegida tal que no existan interacciones del cuerpo con las fronteras del canal⁵. El interés de esta sección es verificar el método propuesto, no brindar una descripción completa del problema de sedimentación.

Las pruebas numéricas se realizan con una única configuración geométrica. Se utiliza $a = 1 \times 10^{-3}$ m, relación de aspecto $\alpha = 2$ y relación de bloqueo $\beta = 4.0$. Las propiedades del fluido son las mismas que las utilizadas en el problema de la sección 4.2.1. Inicialmente el fluido está en reposo, el centro de la elipse posicionada en $(x, y) = (0.5W, 0)$ m, con el origen del sistema de coordenadas a 4.8×10^{-2} m desde la frontera horizontal inferior del canal vertical. Para eliminar la simetría del problema se elige una posición angular inicial $\theta_0 = \frac{\pi}{4}$. Siguiendo lo presentado en [115], se adopta para el canal vertical una altura de $H = 50a$ y un ancho $W = 4a$. El dominio se discretiza con una grilla de $n_x \times n_y = 135 \times 1676$ y se utilizan tres relación de densidad $r_\rho = 1.10$, $r_\rho = 1.30$ y $r_\rho = 1.50$.

En las Figuras 4.9 y 4.10 se muestra la dinámica de las variables en función del tiempo para $r_\rho = 1.10$. Se evalúa el problema de interés utilizando los diferentes métodos presentados. En la Figura 4.10 se presenta la trayectoria completa de la elipse evaluada con: ME clásico (4.14), (4.28) y los métodos corregidos dados por (4.16), (4.30) y (4.21), (4.34).

Los resultados encontrados con el método corregido tienen una buena correlación con los de Xia et al. [115]. Se puede apreciar de las Figuras 4.9 y 4.10, que existe una importante diferencia entre el método ME clásico y el corregido, en especial en el régimen transitorio inicial. De la Figura 4.10 se puede observar también que existe una diferencia en la posición horizontal final según se obtiene con uno u otro método de evaluación de las fuerzas. Es posible notar de la Figura 4.9 que los resultados obtenidos utilizando las expresiones (4.16) y (4.30), que contienen términos impulsivos en la evaluación de las fuerzas, presentan perturbaciones apreciables. Especialmente se pueden notar con claridad en el detalle donde se muestran resultados de la velocidad vertical. Estas perturbaciones no se observan cuando se utilizan las ecuaciones (4.21) y (4.34) que no contienen términos impulsivos.

En las Figuras 4.11 y 4.12 se muestra de forma comparativa la dinámica de las variables del problema en función del tiempo para $r_\rho = 1.10$, $r_\rho = 1.30$, y $r_\rho = 1.50$. El incremento se r_ρ aumenta la característica oscilatoria del problema, el comportamiento de las variables es oscilatorio para $r_\rho = 1.30$ y $r_\rho = 1.50$.

⁵Problemas de múltiples cuerpos interactuando, o cuando un cuerpo se aproxima a una frontera del problema deben tratarse de manera especial. Cuando las fronteras entre si estén separadas distancias menores a δx , es necesario utilizar un modelo particular para contemplar la interacción de contacto [121].

4.3. Comentarios y conclusiones

En este capítulo se realizó una revisión del método de momentum exchange (ME) para evaluar las fuerzas que un flujo de fluido ejerce sobre un cuerpo sumergido, mostrando una derivación alternativa basada en principios elementales de la mecánica de fluidos. Para el caso de cuerpos estáticos se recuperan las expresiones clásicas presentadas en la literatura. Se puede observar de la derivación presentada que las expresiones para cuerpos estáticos (ME clásico) no son apropiadas para evaluar fuerza y torque sobre cuerpos en movimiento. En este sentido, como casos particulares es posible recuperar dos aproximaciones a los métodos heurísticos propuestos en la literatura para evaluar fuerza y torque sobre cuerpos en movimiento. Se muestra que estas dos propuestas son válidas y constituyen dos aproximaciones diferentes del mismo problema. Una de ellas, dada por las ecuaciones (4.21) y (4.34) brinda resultados de fuerzas con menos perturbaciones o ruido y es también computacionalmente más eficiente.

El método ME que se propone no utiliza en su derivación ningún tratamiento particular de las fronteras del cuerpo, en principio no existen limitaciones en utilizar los métodos disponibles en la literatura para imponer condiciones de borde. Tampoco existen limitaciones en el modelo de colisiones utilizado, siendo el método de aplicación general en el LBM-BGK y LBM-MRT.

En los problemas de verificación se evalúan las expresiones obtenidas analizando dos problemas de sedimentación de cuerpos rígidos con resultados conocidos: sedimentación de un disco circular y un disco elíptico en un fluido Newtoniano contenido en un canal vertical. Los resultados presentados muestran una diferencia apreciable cuando se analizan cuerpos en movimiento; en especial entre los encontrados con el método de ME corregido en comparación con el método de ME clásico de las ecuaciones (4.14) y (4.28). Los resultados obtenidos tienen una buena correlación con los presentados por otros autores utilizando diferentes métodos de la mecánica de fluido computacional.

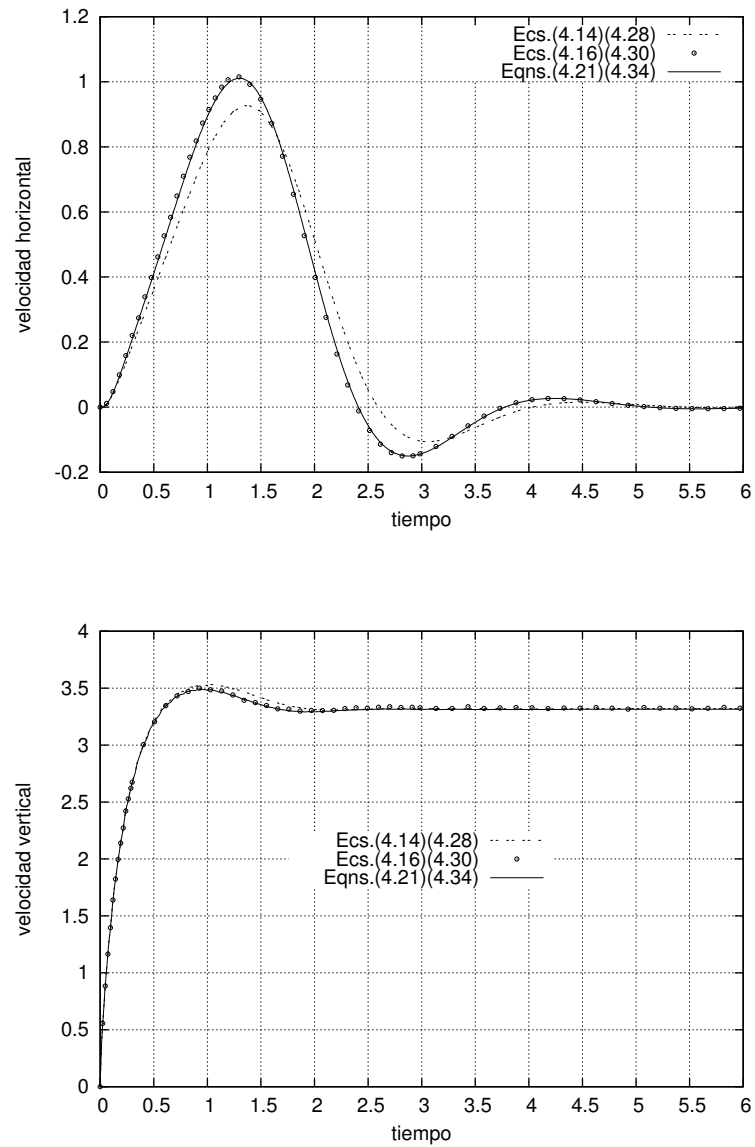


FIGURA 4.4: Resultados obtenidos del problema del disco circular en sedimentación (Figura 4.3a) con $r_\rho = 1.01$. El tiempo está expresado en segundos y la velocidad en milímetros por segundo. En línea de trazos se muestran los resultados obtenidos con (4.14), y (4.28), con \circ los obtenidos del método corregido (4.16) y (4.30), y en línea continua los obtenidos de (4.21), (4.34).

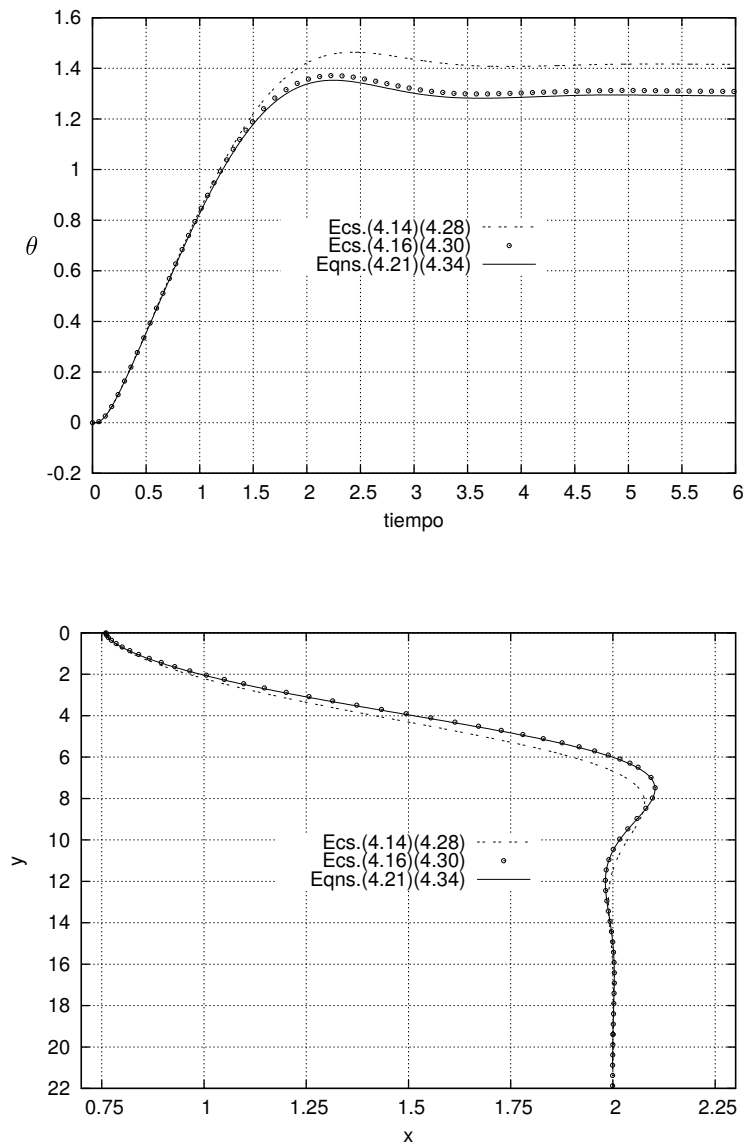


FIGURA 4.5: Resultados obtenidos del problema del disco circular en sedimentación (Figura 4.3a) con $r_\rho = 1.01$. El tiempo está expresado en segundos, el espacio en milímetros, y el ángulos en radianes. En línea de trazos se muestran los resultados obtenidos con (4.14), y (4.28), con \circ los obtenidos del método corregido (4.16) y (4.30), y en línea continua los obtenidos de (4.21), (4.34).

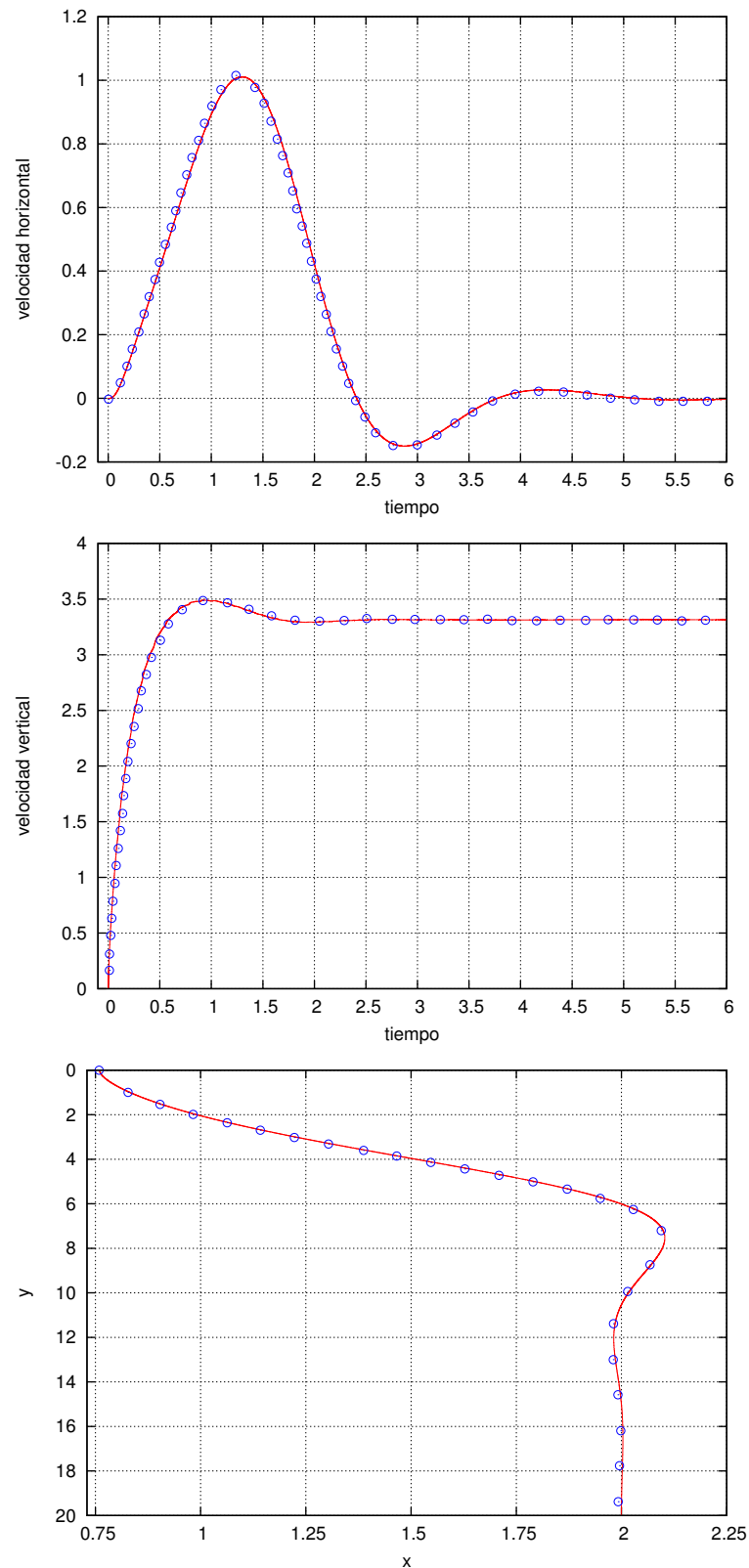


FIGURA 4.6: Resultados obtenidos del problema del disco circular en sedimentación (Figura 4.3a) con $r_\rho = 1.01$. El tiempo está expresado en segundos, el espacio en milímetros. En línea de trazo continuo se presentan los resultados obtenidos con (4.21) y (4.34), con \circ los resultados extraídos de Wen et al. [66] ([66] no presenta resultados explícitos de θ).

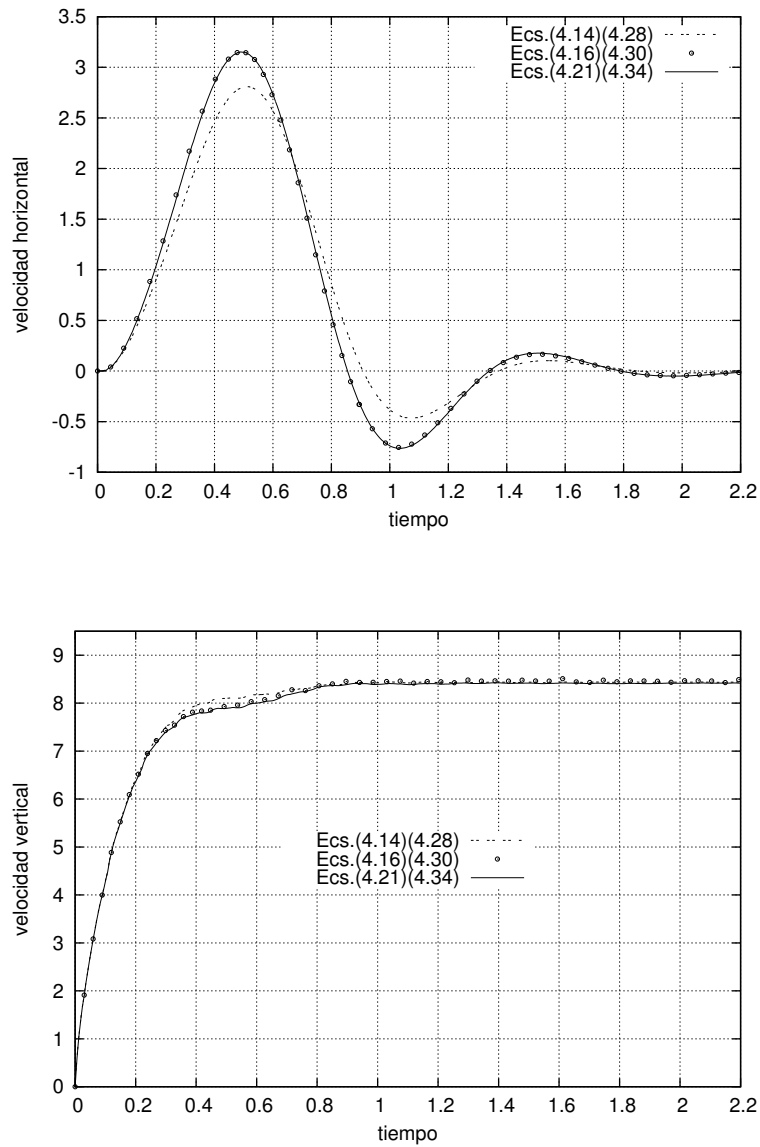


FIGURA 4.7: Resultados obtenidos del problema del disco circular en sedimentación (Figura 4.3a) con $r_\rho = 1.03$. El tiempo está expresado en segundos y la velocidad en milímetros por segundo. En línea de trazos se muestran los resultados obtenidos con (4.14), y (4.28), con \circ los obtenidos del método corregido (4.16) y (4.30), y en línea continua los obtenidos de (4.21), (4.34).

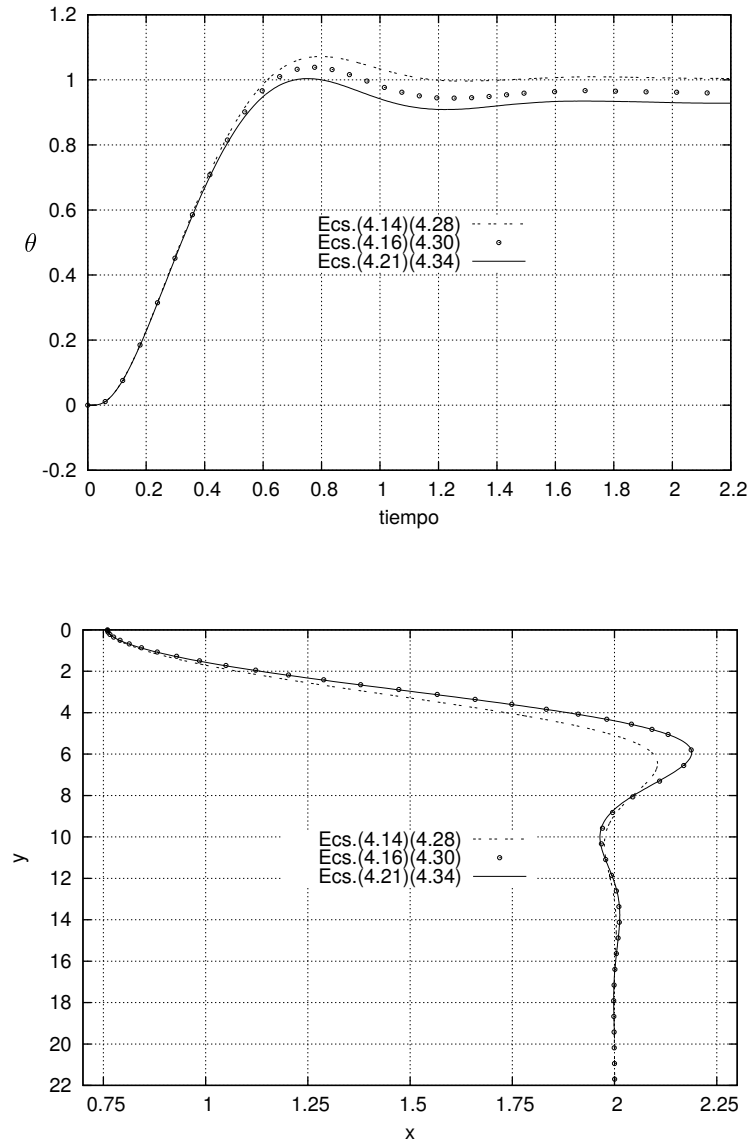


FIGURA 4.8: Resultados obtenidos del problema del disco circular en sedimentación (Figura 4.3a) con $r_p = 1.03$. El tiempo está expresado en segundos, el espacio en milímetros, y el ángulos en radianes. En línea de trazos se muestran los resultados obtenidos con (4.14), y (4.28), con \circ los obtenidos del método corregido (4.16) y (4.30), y en línea continua los obtenidos de (4.21), (4.34).

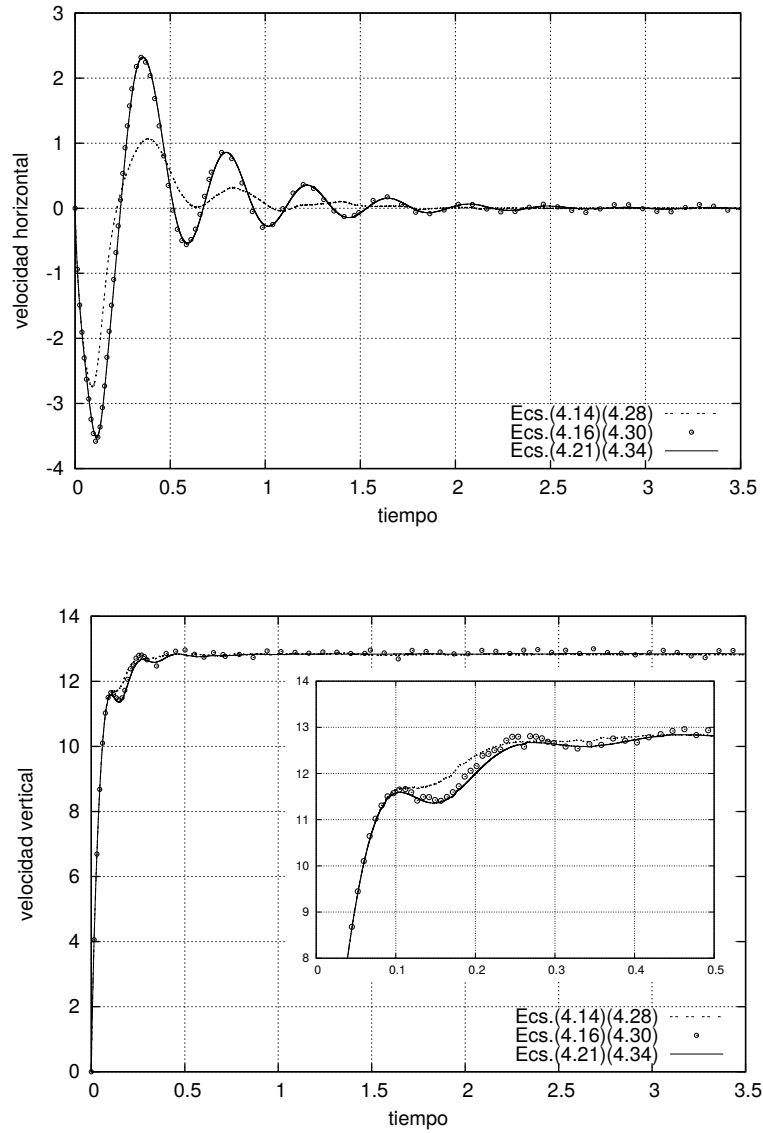


FIGURA 4.9: Resultados obtenidos del problema del disco elíptico en sedimentación (Figura 4.3b) con $r_\rho = 1.1$. El tiempo está expresado en segundos y la velocidad en milímetros por segundo. En línea de trazos se muestran los resultados obtenidos con (4.14), y (4.28), con \circ los obtenidos del método corregido (4.16) y (4.30), y en línea continua los obtenidos de (4.21), (4.34).

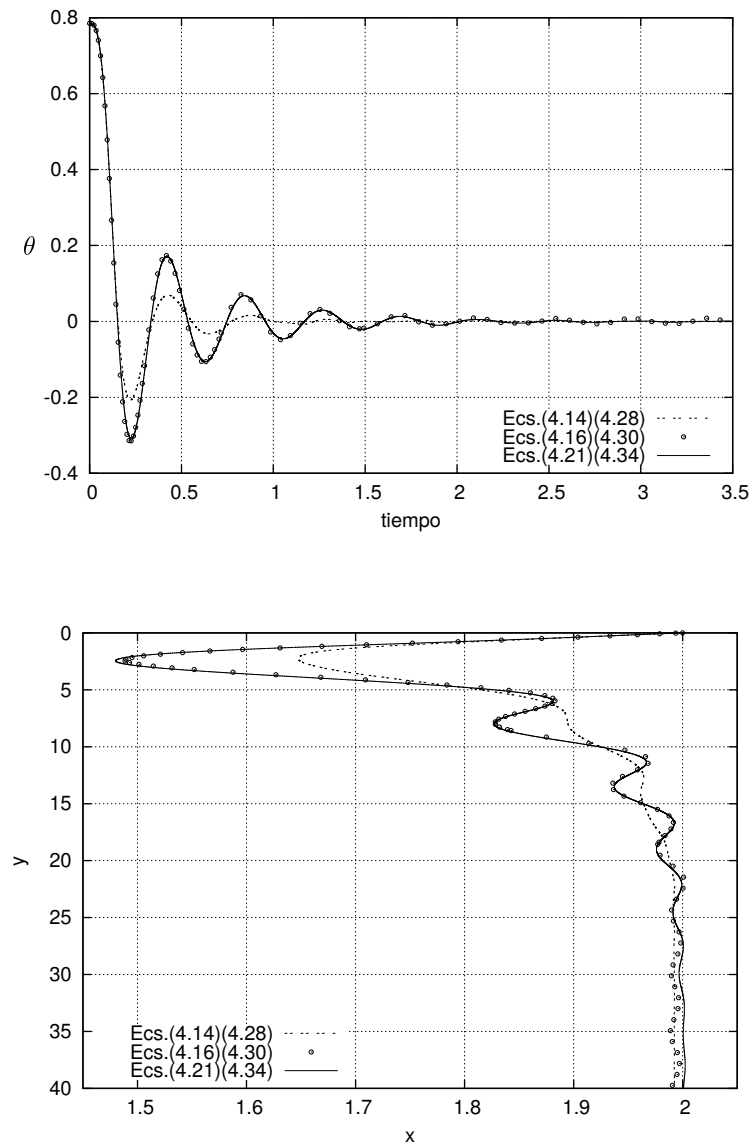


FIGURA 4.10: Resultados obtenidos del problema del disco elíptico en sedimentación (Figura 4.3b) con $r_\rho = 1.1$. El tiempo está expresado en segundos, el espacio en milímetros, y el ángulo en radianes. En línea de trazos se muestran los resultados obtenidos con (4.14), y (4.28), con \circ los obtenidos del método corregido (4.16) y (4.30), y en línea continua los obtenidos de (4.21), (4.34).

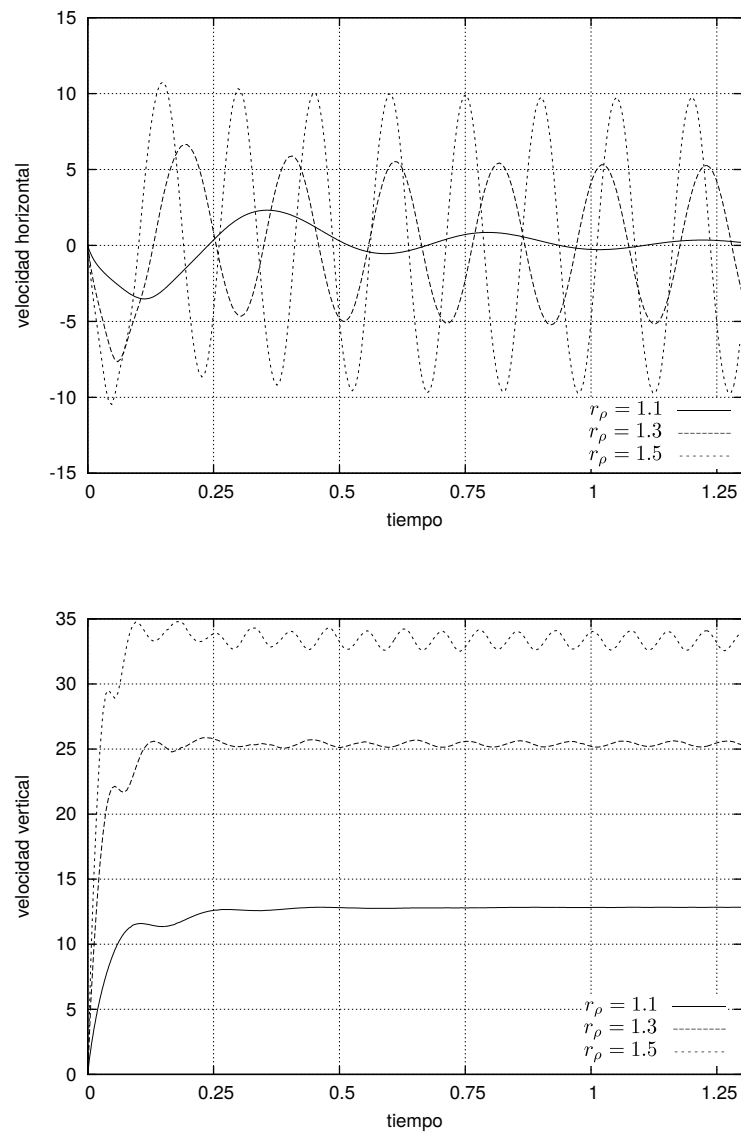


FIGURA 4.11: Comparación de resultados del problema del disco elíptico en sedimentación (Figura 4.3b) con $r_\rho = 1.1$, $r_\rho = 1.3$ y $r_\rho = 1.5$. El tiempo está expresado en segundos y la velocidad en milímetros por segundo.

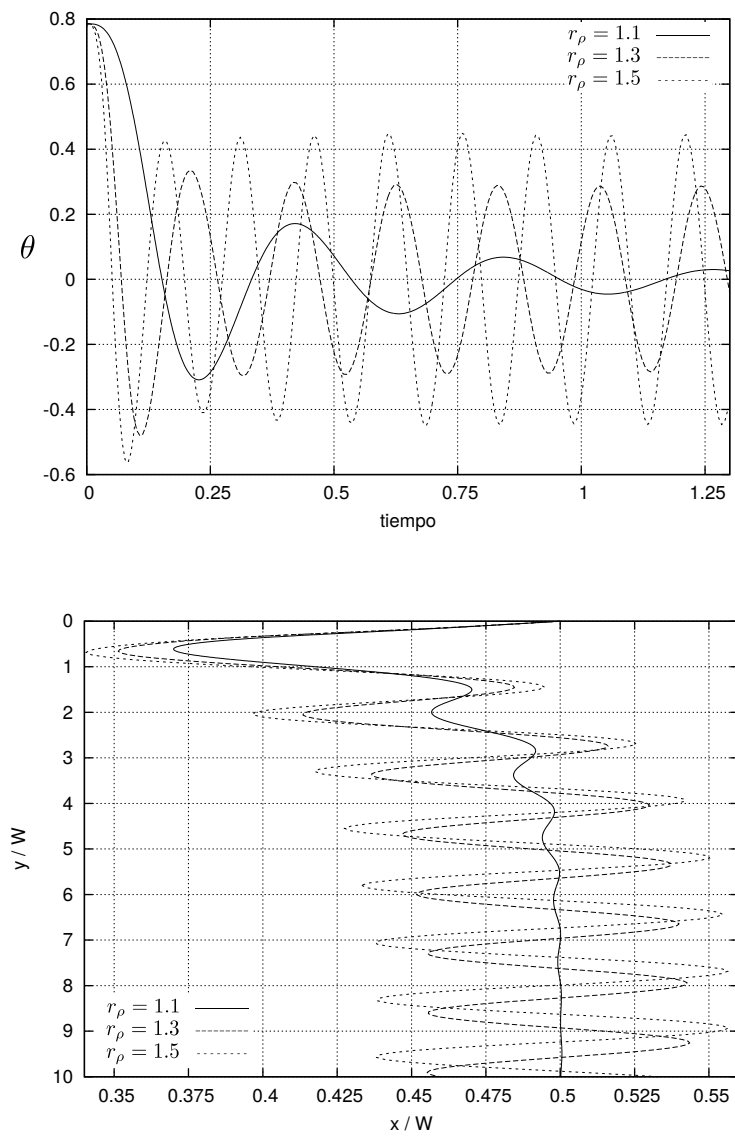


FIGURA 4.12: Comparación de resultados del problema del disco elíptico en sedimentación (Figura 4.3b) con $r_\rho = 1.1$, $r_\rho = 1.3$ y $r_\rho = 1.5$. El tiempo está expresado en segundos, el espacio en milímetros, y el ángulos en radianes.

Capítulo 5

Refinamiento de grilla

Existen problemas en mecánica de fluidos que están caracterizados por regiones localizadas donde ocurren gradientes espaciales significativos en las variables macroscópicas del fluido. Para resolver adecuadamente estas variaciones espaciales se requieren tamaños de grilla acordes a la escala en que estas se producen. La escala más pequeña a resolver impone una cota máxima sobre el tamaño de grilla δx a utilizar en el problema, siendo δx la distancia más pequeña entre dos nodos primeros vecinos en una grilla LBM. La utilización de una grilla cartesiana de nodos equiespaciados (grilla simple) junto con esta restricción en δx , impone una condición global en el tamaño de grilla para satisfacer un requerimiento local en regiones pequeñas del dominio. El resultado es en general una grilla en extremo refinada sobre regiones del dominio que no lo requieren. Esta configuración incrementa el costo computacional, limitando en muchos casos el tamaño y tipo de problemas que pueden resolverse en computadoras estándar y tiempos razonables.

En un problema típico en el LBM se cubre el dominio computacional con un arreglo conveniente de grillas. Este puede ser tan simple como una única grilla de tamaño δx uniforme, o formar un arreglo complejo de grillas con diferentes δx . Por simplicidad se considera que el conjunto de nodos en una grilla simple forman siempre un paralelepípedo ortogonal en problemas tridimensionales (o un rectángulo en problemas bidimensionales). Cuando ocurren variaciones espaciales aproximadamente uniformes en las variables macroscópicas del fluido, una grilla simple para representar todo el dominio computacional es una elección apropiada. Por el contrario, cuando existen grandes variaciones espaciales de las variables macroscópicas en pequeñas regiones del dominio, utilizar un arreglo de grillas con diferente δx reduce el costo computacional del problema. El método para integrar en un dominio computacional un conjunto de grillas simples con diferente δx se denomina *método de refinamiento de grilla*.

En el LBM existen al menos dos métodos de refinamiento de grilla¹: método *multi-grilla* (MG) [52, 68] y método *multi-dominio* (MD) (o multi-bloque) [69–71]. En el método MG, las grillas simples con menor δx están siempre superpuesta sobre otras con mayor δx . Si consideramos cada tamaño de grilla como capas o niveles de refinamiento, en el MG varias capas de grillas pueden superponerse, como se muestra de manera esquemática en la figura 5.1. En el método MD, las grillas con diferente δx están solapadas parcialmente en un conjunto particular de nodos. Este solapamiento es en una pequeña región entre dos grillas adyacentes con diferente δx . En la figura 5.2 se muestra de manera esquemática una configuración de grillas con el método MD.

¹En la literatura es frecuente encontrar métodos de refinamiento basados en una formulación volumétrica del LBM, donde los puntos de grilla se consideran centrados en las celdas [122–124].

En los esquemas de las figuras 5.1 y 5.2 se utilizan tres niveles de refinamiento. Se denota con n_{gs} a la cantidad de tamaños de grilla o niveles de refinamiento utilizados, y con $g_s = i$, $i = 0, \dots, n_{gs} - 1$ se identifica un nivel de grilla en particular; $n_{gs} = 3$ en los esquemas de las figuras 5.1 y 5.2. El subíndice i está relacionado al tamaño de grilla δx_i , incrementos en i indica una reducción en δx .

Al utilizar arreglos de grillas cartesianas uniformes, existe la siguiente relación: $\delta x_{i+1} = \frac{\delta x_i}{r_f}$ entre los tamaños de grilla en los diferentes niveles de refinamiento, con $r_f > 1$ un entero denominado *factor de refinamiento*. r_f puede variar entre los diferentes niveles de refinamiento, en este trabajo se elige un valor único. En los esquemas de las figuras 5.1 y 5.2, $r_f = 2$.

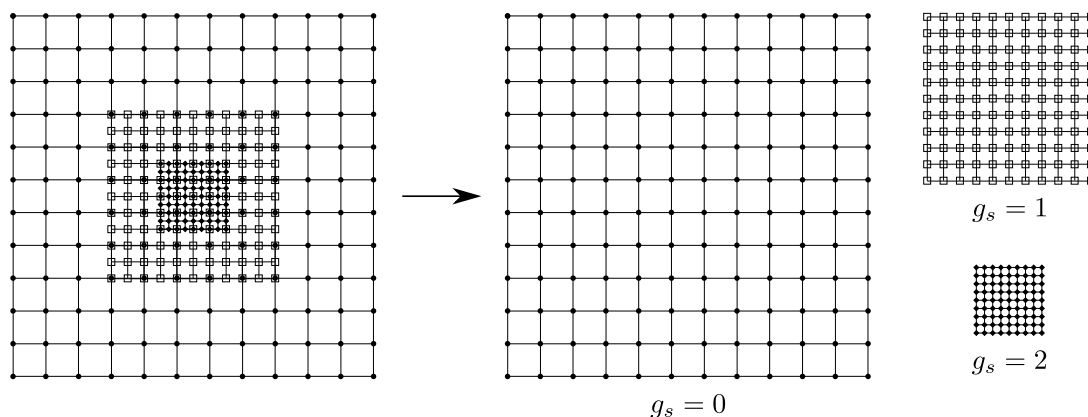


FIGURA 5.1: Esquema de un dominio bidimensional con una zona central de refinamiento utilizando el método MG. Izq.: grillas posicionadas según su ubicación en el dominio. Der.: desglose de las grillas en los diferentes niveles de refinamiento. g_s denota el nivel de refinamiento.

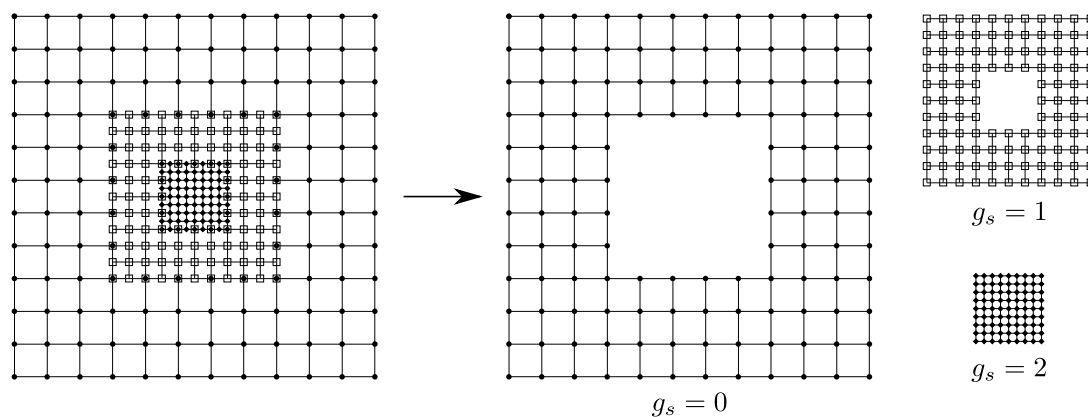


FIGURA 5.2: Esquema de un dominio bidimensional con una zona central de refinamiento utilizando el método MD. Izq.: grillas posicionadas según su ubicación en el dominio. Der.: desglose de las grillas en los diferentes niveles de refinamiento. g_s denota el nivel de refinamiento.

En este trabajo se utiliza e implementa exclusivamente el método MD. Esta elección se basa en las mejores performance numéricas que presenta [70, 71] y un requerimiento inferior de memoria para almacenamiento de datos frente al método MG. Como desventaja, requiere una implementación algo más compleja dada la necesidad de crear una interfaz para transferencia de datos entre niveles de refinamiento.

Definido un método de refinamiento, existen diferentes estrategias para establecer el arreglo de grillas (distribución y tamaños a utilizar) en el dominio del problema. El *método de refinamiento a priori* es la estrategia más elemental. La distribución de las grillas en el dominio es previa a resolver el problema de fluido y se mantiene estática para todo tiempo. En problemas no estacionarios, las escalas más pequeñas a resolver y su posición dentro del dominio fluido son variables dinámicas del problema. El método de refinamiento a priori no es la opción más eficiente en estos casos, lo más apropiado es utilizar un *método de refinamiento adaptativo* [70, 125], donde es posible modificar la posición y el arreglo de las grillas en tiempo de ejecución. Tomando algún criterio adecuado estos métodos ajustan en tiempo de ejecución el δx localmente para resolver las escalas de interés.

En este trabajo se implementa una estrategia intermedia entre las dos mencionadas anteriormente. Se establece una distribución inicial donde queda fijo n_{gs} y la cantidad de grillas que se utilizan. Sin embargo, se permite un ajuste en la dimensión de las grillas y su posición en el dominio fluido en tiempo de ejecución, la región de refinamiento no es estática. Se implementa un algoritmo para mover el arreglo de grillas siguiendo algún patrón de desplazamiento particular. Este algoritmo de desplazamiento es utilizado para analizar problemas de sedimentación de cuerpos rígidos, donde un conjunto de grillas siguen al cuerpo rígido en su desplazamiento.

5.1. Método de refinamiento multi-dominio - MD

En un problema de refinamiento utilizando el método MD con n_{gs} niveles de refinamiento, cada grilla puede considerarse un problema de fluido aislado que se resuelve de manera independiente con condiciones de borde particulares. En los bordes donde dos grillas con niveles de refinamiento g_s consecutivos se solapan, las condiciones de borde se imponen utilizando una grilla de interfaz. Son necesarias $n_{gs} - 1$ interfaces para vincular los n_{gs} niveles de refinamiento. Estas son grillas LBM estándar con dimensiones apropiadas posicionadas conveniente. Existe un vínculo (o intercambio de información) entre un conjunto de nodos particular en los niveles $g_s = i$ y $g_s = i - 1$ ($i = 1, \dots, n_{gs} - 1$) para reconstruir y fijar condiciones de borde que permiten evolucionar temporalmente en la solución del problema de fluido.

En las figuras 5.3 y 5.4 se muestran de manera esquemática las interfaces que se utilizan en el problema de la figura 5.2 con $n_{gs} = 3$. La superposición que genera la interfaz está definida por el número de nodos de solapamiento n_{Ii} , el mostrado en las figuras 5.3 y 5.4 es indicativo. En general n_{Ii} depende del problema que se analiza, si se consideran modelos de turbulencia, se requiere una mayor cantidad de nodos en la interfaz [71].

Para facilitar la implementación del método MD, cada nivel de refinamiento se construye como un arreglo de múltiples grillas regulares. Cada grilla es un subdominio computacional independiente o problema aislado con condiciones de borde particulares que lo vinculan con el resto del problema. Esta configuración es clásica en mecánica de fluidos computacional (CFD) y se la denomina *partición de dominio*. Se utiliza generalmente para incrementar la performance numérica, permitiendo resolver los múltiples subdominios de manera independiente utilizando técnicas de paralelización. En el contexto del LBM, esta estrategia facilita la adición de dominios regulares para formar las interfaces.

Luego es posible distinguir al menos tres tipos de bordes en las diferentes grillas o subdominios en un problema de refinamiento: *bordes con condiciones prescritas*, *bordes de solapamiento*, y *bordes de continuidad*. Los *bordes con condiciones prescritas* constituyen

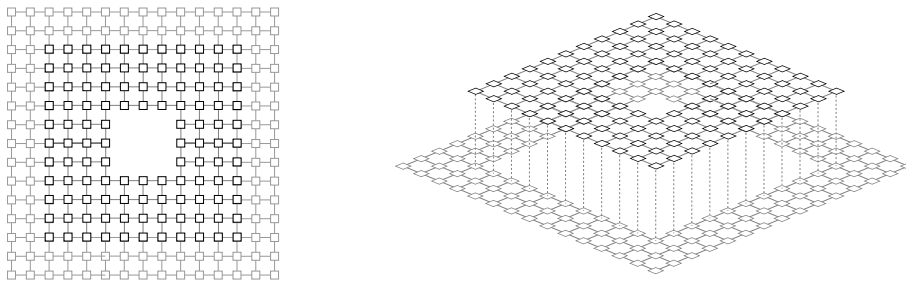


FIGURA 5.3: Detalle del nivel de refinamiento $g_s = 1$ y la interfaz (en escala de grises) que lo vincula con el $g_s = 0$. Extracto del problema presentado en la figura 5.2. Se muestra también una vista desplegada de la interfaz y la grilla. Los nodos se identifican de manera esquemática con el símbolo \square . El número de nodos de la interfaz es indicativo.

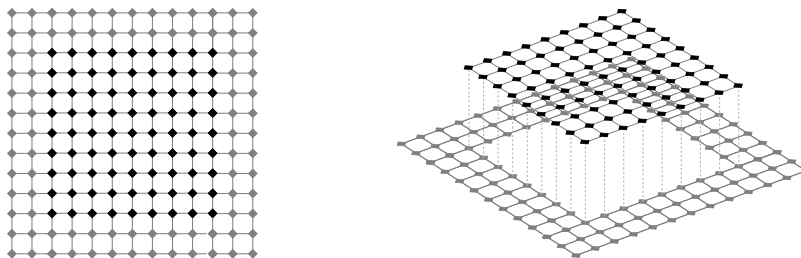


FIGURA 5.4: Detalle del nivel de refinamiento $g_s = 2$ y la interfaz (en escala de grises) que lo vincula con el $g_s = 1$. Extracto del problema presentado en la figura 5.2. Se muestra también una vista desplegada de la interfaz y la grilla. Los nodos se identifican de manera esquemática con el símbolo \diamond . El número de nodos de la interfaz es indicativo.

un límite del dominio computacional (o fluido), las variables están prescritas y determinadas para todo tiempo según las condiciones de borde del Capítulo 3. Los *bordes de solapamiento* demarcan un límite entre dos niveles de refinamiento, no se dispone de condiciones de borde prescritas, existe continuidad del dominio fluido, y se tiene una discontinuidad en la discretización espacial. Los *bordes de continuidad* existen por utilizar partición de dominio en un mismo nivel de refinamiento, son la frontera de unión entre grillas con el mismo δx . Sobre estas fronteras existe continuidad del dominio fluido y las condiciones de borde son de transferencia directa entre las grillas que comparten la frontera.

Definidas las condiciones iniciales del problema, la evolución temporal en los diferentes niveles de refinamiento — siguiendo un orden jerárquico que se detalla más adelante — no puede completarse, los bordes de solapamiento están indeterminados. No es posible completar el proceso de distribución (streaming - ecuación (2.21)) en los nodos que pertenecen a estos bordes, dado que por construcción, existen direcciones para las cuales no se dispone de nodos vecinos en el mismo estado temporal.

En la figura 5.5 se muestra un esquema con la configuración de múltiples grillas regulares formando cada nivel de refinamiento del problema presentado en la figura 5.2. Por claridad las grillas se muestran desplazadas de su posición real. Las grillas en escala de grises representan grillas de interfaz que deben adicionarse a la configuración de la figura 5.2. En el nivel de refinamiento $g_s = i$ estas se solapan con grillas $g_s = i - 1$, $\forall i | i = 1, \dots, n_{g_s} - 1$.

Cada grilla de la interfaz tiene al menos dos tipos de bordes: bordes de solapamiento y bordes de continuidad. Los bordes de solapamiento en la interfaz se denominan *bordes libres*. Los bordes de continuidad vinculan la grilla de interfaz con el resto de las grillas en el mismo nivel de refinamiento. Nodos de la interfaz en ambos bordes son utilizados para

establecer el intercambio de información entre grillas en diferentes niveles de refinamiento consecutivos. Al tratar cada grilla como un subdominio computacional, este procedimiento puede considerarse como la imposición de condiciones de borde sobre estos conjuntos de nodos.

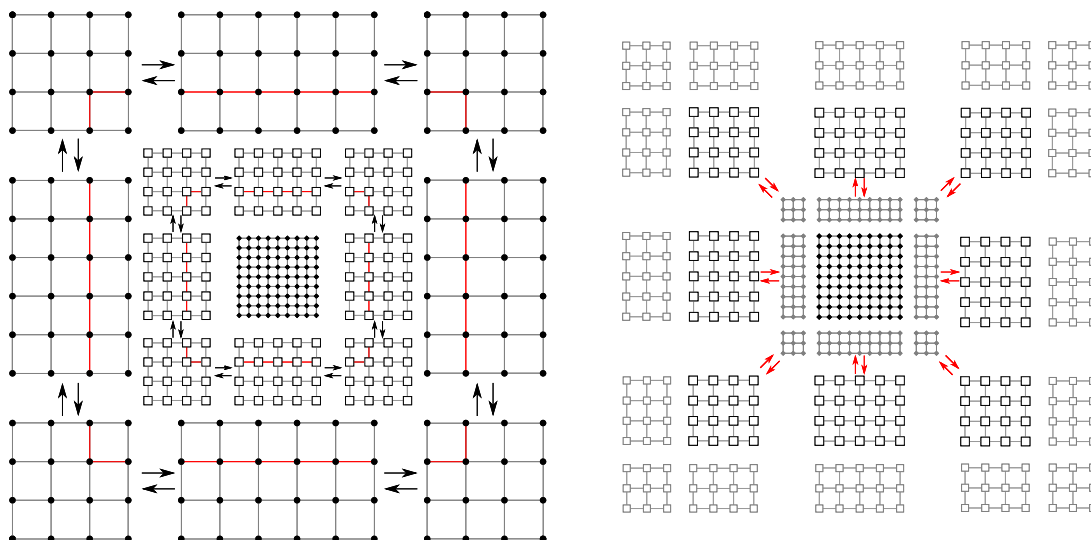


FIGURA 5.5: Detalle de las múltiples grillas simples que forman los diferentes niveles de refinamiento en el problema de la figura 5.2. Izq.: se muestran las múltiples grillas simples o subdominios computacionales en que se divide cada uno de los niveles de refinamiento. Der.: se muestra un detalles de las múltiples grillas que forman los niveles de refinamiento $g_s = 1$ y $g_s = 2$. En tono de grises se muestran las grillas simples que forman la interfaz. Cada grilla se presenta desplazada de su posición original según se puede observar en comparación con la figura 5.2. Las flechas en ambos sentidos explicitan el intercambio de datos a través de condiciones de borde particulares. Las flechas en negro representan un intercambio entre grillas para un mismo nivel de refinamiento. Las rojas explicitan la transferencia de datos a través de la interfaz, entre grillas para dos niveles de refinamiento consecutivos.

Existen diferentes propuestas [52, 70] para abordar estas condiciones de borde, se diferencian según el modelo de colisiones utilizado, LBM-SRT o LBM-MRT. Las propuestas revisadas reconstruyen las variables necesarias en la interfaz utilizando datos de grillas en otros niveles de refinamiento adyacentes, tal que se satisfagan ciertas restricciones.

En el método MD, y por construcción, pueden existir nodos en la misma posición espacial en diferentes niveles de refinamiento. Por claridad en la presentación y con motivo de introducir notación, se definen algunos conjuntos de nodos de interés:

- \mathcal{G}_{cf}^k : conjunto de nodos en el nivel de refinamiento $g_s = k$, con $k = 0, \dots, n_{g_s} - 2$ que comparten posición espacial con nodos del borde libre de grillas de interfaz en $g_s = k + 1$. Los nodos que pertenecen a este conjunto se muestran de manera esquemática en la figura 5.5 (izq.) posicionados sobre líneas coloreadas en rojo.
- \mathcal{G}_{fc}^k : conjunto de nodos en el borde de solapamiento de las grillas en el nivel de refinamiento $g_s = k$, con $k = 0, \dots, n_{g_s} - 2$. Comparten posición espacial con nodos en el borde de continuidad de grillas de interfaz en $g_s = k + 1$.
- \mathcal{I}_{cf}^k : conjunto de nodos que pertenecen al borde libre de las grillas de interfaz en el nivel de refinamiento $g_s = k$, $k = 1, \dots, n_{g_s} - 1$ (por construcción las grillas en $g_s = 0$ no requieren interfaz).

- \mathcal{I}_{fc}^k : conjunto de nodos que pertenecen al borde de continuidad de las grillas de interfaz en el nivel de refinamiento $g_s = k$, $k = 1, \dots, n_{gs} - 1$.

De las definiciones anteriores y por construcción: $\mathcal{G}_{cf}^{n_{gs}-1} = \{0\}$, $\mathcal{G}_{fc}^{n_{gs}-1} = \{0\}$, $\mathcal{I}_{cf}^0 = \{0\}$, y $\mathcal{I}_{fc}^0 = \{0\}$.

5.1.1. Evolución temporal

La evolución temporal en el problema de refinamiento debe seguir una secuencia de operaciones en las diferentes grillas y entre los diferentes niveles de refinamiento, tal que las variables en los bordes libres y de solapamiento estén determinadas para todo tiempo. Del Capítulo 2, el espaciamiento temporal es proporcional al espacial a través de c . De la relación $\delta x_{i+1} = \frac{\delta x_i}{r_f}$ entre niveles de refinamiento, y como c es una constante del problema, se tiene:

$$\delta x_{i+1} = \frac{\delta x_i}{r_f} \quad , \quad \delta t_{i+1} = \frac{\delta t_i}{r_f} \quad ; \quad i = 0, \dots, n_{gs} - 2 \quad (5.1)$$

En este trabajo se utiliza $r_f = 2$ como se muestra en las figuras esquemáticas 5.2 y 5.5. Puede adoptarse otro valor arbitrario, incluso no ser una constante del problema, con uno particular para cada nivel de refinamiento. El valor de $r_f = 2$ proporciona el algoritmo más simple para un problema con n_{gs} niveles de refinamiento.

En la figura 5.6 se introduce un esquema de la evolución temporal de los diferentes niveles de refinamiento del problema presentado en la figura 5.2. Por simplicidad se muestra un esquema unidimensional, corte $A - A$ del problema 2D (ver figura 5.2). En la figura

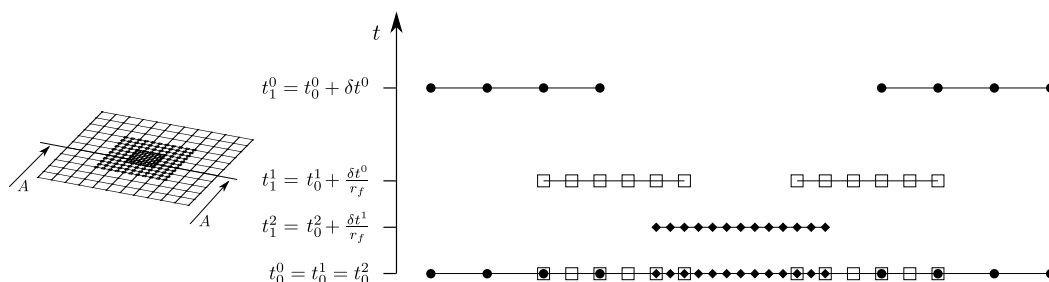


FIGURA 5.6: Esquema de la evolución temporal de las diferentes escalas de refinamiento para un problema unidimensional. El esquema es un corte $A - A$ del problema bidimensional presentado en la figura 5.2. A izquierda se muestra un detalle del corte $A - A$ de la grilla 2D.

5.6 se identifica el tiempo en cada grilla con t_j^k , donde k indica el nivel de refinamiento y j el número de pasos temporales en la grilla desde alguna referencia arbitraria común al problema. Con δt^k se denota el paso temporal del k -ésimo nivel de refinamiento.

Se presenta el detalle de las operaciones necesarias para la evolución temporal de un problema particular, luego se introduce un algoritmo general con n_{gs} arbitrario. Se considera todas las grillas inicialmente a tiempo $t = t_i^0$, $i = 0, 1, 2$. En la figura 5.6 se puede observar el solapamiento de nodos en las diferentes grillas. Se tiene interés en evolucionar temporalmente todas las grillas hasta alcanzar globalmente (en todo el dominio y para todos los niveles de refinamiento $g_s = 0, 1, 2$) la solución del problema a tiempo $t = t_1^0$. En los siguientes ítem se detalla el procedimiento de evolución temporal que se sigue:

- Se evoluciona una cantidad δt^k en todos los n_{gs} niveles de refinamiento. Este es el estado temporal que en la figura 5.6 se muestra esquemáticamente, los niveles de refinamiento se encuentran a tiempo $t_0^k + \delta t^k$, $k = 0, 1, 2$.

En el estado actual ($t_0^k + \delta t^k$, $k = 0, 1, 2$) no es posible evolucionar nuevamente en el tiempo. El conjunto \mathcal{G}_{fc}^k y $\mathcal{I}_{cf}^{k'}$ de nodos sobre los bordes de solapamiento y bordes libres para $k = 0, \dots, n_{gs} - 2$ y $k' = 1, \dots, n_{gs} - 1$ contienen variables indeterminadas. Estas se obtienen utilizando datos de otros niveles de refinamiento. Se utilizan métodos de transferencia que garanticen conservación de las cantidades macroscópicas y que no degraden la precisión intrínseca del LBM. Es necesario diferenciar si la transferencia de datos es desde la grilla $g_s = i$ hacia la $g_s = i + 1$ o viceversa. Cuando la transferencia de datos se realiza desde la grilla $g_s = i$ hacia otra más refinada $g_s = i + 1$, se utiliza una función F_{cf} , en el caso inverso se utiliza una función F_{fc} . Ambas funciones se detallan en secciones posteriores. Los subíndices cf y fc hacen referencia a la dirección de transferencia, de una grilla gruesa a otra fina y viceversa.

- El proceso continua desde las grillas en $g_s = 2$. Se diferencian dos casos de interés: cuando los nodos en \mathcal{I}_{cf}^2 coinciden en posición espacial con nodos en \mathcal{G}_{cf}^1 , y cuando no coinciden. En el primer caso se determinan las variables en nodos que pertenecen a \mathcal{I}_{cf}^2 mediante interpolación temporal con datos de nodos que pertenecen a \mathcal{G}_{cf}^1 . En \mathcal{G}_{cf}^1 todas las variables son conocidas a tiempo t_0^1 y t_1^1 , se utiliza la función F_{cf} sobre las variables que se interpolan. En el segundo caso (debido al factor de refinamiento r_f , $\{\mathcal{I}_{cf}^2\} > \{\mathcal{G}_{cf}^1\}$), las variables en los nodos de interés se determinan a tiempo t_1^2 siguiendo una interpolación espacial. Se utilizan datos de nodos en \mathcal{I}_{cf}^2 a $t = t_1^2$ establecidos en la interpolación temporal anterior. Luego todas las variables están determinadas en las grillas $g_s = 2$ a tiempo $t = t_1^2$. El orden de la interpolación espacial debe ser tal que no degrade los requisitos sobre las variables conservadas y precisión del LBM.
- Evolución temporal de las grillas en $g_s = 2$, desde t_1^2 a $t_2^2 = t_1^1$. Ahora las grillas en $g_s = 1, 2$ están en el mismo estado temporal. Por la evolución, los nodos en \mathcal{I}_{cf}^2 tienen nuevamente variables indeterminadas.
- Se especifican las variables en \mathcal{G}_{fc}^1 y \mathcal{I}_{cf}^2 . Esto es posible dado el arreglo de grillas propuesto, las grillas de interfaz facilitan esta interacción. Para todo nodo en \mathcal{G}_{fc}^1 existe siempre otro en \mathcal{I}_{fc}^2 en la misma posición espacial y con todas sus variables conocidas. Luego, utilizando la función F_{fc} se determinan todas las variable en \mathcal{G}_{fc}^1 . Se tiene igual que antes dos tipos de nodos en \mathcal{I}_{cf}^2 , los que coinciden en posición espacial con nodos en \mathcal{G}_{cf}^1 y los que no. Ahora el problema es mas simple, ambos niveles de refinamiento están al mismo tiempo. Para los nodos del primer tipo, se utiliza la función F_{cf} para determinar sus variables. Para los restantes se especifican las variables mediante interpolación espacial con valores conocidos en \mathcal{I}_{cf}^2 en $t = t_2^2$.
- Se determinan las variables en \mathcal{I}_{cf}^1 mediante interpolación temporal utilizando datos de \mathcal{G}_{cf}^0 , y una interpolación espacial posterior para los nodos restantes en \mathcal{I}_{cf}^1 que no coinciden en posición espacial con nodos en \mathcal{G}_{cf}^0 . Se sigue el mismo procedimiento indicado para los nodos en \mathcal{I}_{cf}^2 . Se evolucionan las grillas en el nivel $g_s = 1$ desde $t = t_1^1$ a $t_2^1 = t_1^0$.
- Es posible evolucionar dos pasos temporales sobre las grillas en $g_s = 2$ hasta alcanzar el tiempo $t = t_4^2 = t_1^0$. Dado el primer paso, las variables se determinan en \mathcal{I}_{cf}^2 mediante interpolación temporal y espacial. Luego se evolucionan hasta $t = t_4^2$. En el estado actual, es posible conocer las variables de las grillas en todos los niveles de refinamiento del problema utilizando las funciones de transferencia e interpolación espacial.

Para continuar la evolución en el tiempo se repite tantas veces el procedimiento detallado anteriormente hasta alcanzar el tiempo requerido. En la sección 5.1.1.1 se presenta un algoritmo general para evolucionar temporalmente en un problema con n_{gs} escalas de refinamiento. Según se puede observar de los procedimientos detallados, es necesario especificar las funciones F_{fc} y F_{cf} utilizadas para transferir información entre niveles de refinamiento sucesivos. También debe especificarse la interpolación temporal y espacial que se utiliza. En las secciones siguientes se detallan los métodos implementados y utilizados.

5.1.1.1. Algoritmo de evolución para n_{gs} niveles de refinamiento.

La evolución temporal para un problema con n_{gs} niveles de refinamiento debe seguir un orden establecido de operaciones sobre cada una de las grillas. No se encontró una recomendación o algoritmo en la literatura para realizar la evolución temporal sobre un número arbitrario n_{gs} . En este trabajo se propone e implementa un algoritmo general que se considera apropiado.

Es posible identificar dos grupos de operaciones sucesivas a realizar sobre todas las grillas en los n_{gs} nivel de refinamiento. Estos se denotan como: *grupo 1* ($g1$) y *grupo 2* ($g2$). Las operaciones identificadas con $g1$ que se aplican a un nivel de refinamiento $g_s = i$ en el proceso de evolución son:

- Evolución temporal: se evalúan las ecuaciones (2.20) y (2.21) (o sus correspondientes en LBM-MRT) en todas las grillas del nivel de refinamiento. El proceso de distribución sobre los nodos de borde se realiza en las direcciones factibles.
- Se vinculan las diferentes grillas a través de sus bordes de continuidad cuando corresponda; proceso esquematizado con flechas negras en la figura 5.5. Esto completa el proceso de distribución en los nodos de los bordes de continuidad que comparten las grillas.

Las operaciones identificadas con $g2$ que se aplican a un nivel de refinamiento $g_s = i$ son:

- Interpolación temporal (utilizando datos del conjunto \mathcal{G}_{cf}^{i-1}) y espacial para asignar valores en los nodos del conjunto \mathcal{I}_{cf}^i .
- Evolución temporal en todas las grillas: ídem $g1$.
- Transferencia de datos desde la grilla $g_s = i - 1$ utilizando F_{cf} . Se realiza para todo nodo que pertenece a \mathcal{I}_{cf}^i con la misma posición espacial que los nodos que pertenecen a \mathcal{G}_{cf}^{i-1} . Para los que no satisfacen esta condición se realiza una interpolación espacial con los ya determinados vía transferencia directa.
- Transferencia de datos hacia las grillas $g_s = i - 1$ utilizando F_{fc} . Para todo nodo que pertenece a \mathcal{G}_{fc}^{i-1} que coincide en posición espacial con otro que pertenece a \mathcal{I}_{fc}^i se transfieren datos vía F_{fc} . En este caso no es necesaria una interpolación espacial.

Identificadas y definidas las operaciones ($g1$ y $g2$) a realizar sobre las grillas de los n_{gs} niveles de refinamiento, es necesario establecer el orden en que se aplican. Se propone una estrategia eficiente para ordenar estas operaciones, recorriendo un árbol binario por derecha. Cada elemento del árbol está compuesto por un par ordenado (g_s, gX) , el primer componente g_s corresponde al nivel de refinamiento, mientras que el segundo gX al tipo de operación: $g1$ o $g2$. Se construye el árbol de manera estándar, cada elemento tiene

dos subelementos (hijos) formados por la escala de refinamiento $g_s = i - 1$ y un tipo de operación: $g2$ a izquierda y $g1$ a derecha. En la figura 5.7 se muestra la mitad derecha de un árbol binario para $n_{gs} = 5$. En el caso particular que se muestra en la figura 5.7, el

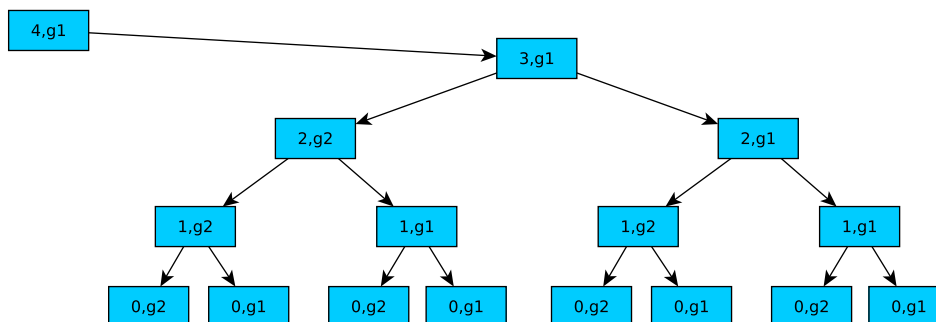


FIGURA 5.7: Mitad derecha del árbol binario propuesto para determinar el orden de operaciones a seguir en la evolución temporal del problema sobre $n_{gs} = 5$ niveles de refinamiento. El orden correcto de las operaciones $g1$ y $g2$ sobre los n_{gs} niveles de refinamiento se obtiene recorriendo el árbol por derecha.

ordenamiento correcto y tipo de operaciones para evolucionar temporalmente en todas las grillas y los $n_{gs} = 5$ niveles de refinamiento hasta el tiempo $t + \delta t^0$ es recorriendo el árbol binario por derecha: $4, g1 \rightarrow 3, g1 \rightarrow 2, g1 \rightarrow 1, g1 \rightarrow 0, g1 \rightarrow 0, g2 \rightarrow 1, g2 \rightarrow 0, g1 \rightarrow 0, g2 \rightarrow 2, g2 \rightarrow 1, g1 \rightarrow 0, g1 \rightarrow 0, g2 \rightarrow 1, g2 \rightarrow 0, g1 \rightarrow 0, g2$.

5.2. Acoplamiento entre niveles de refinamiento

El acoplamiento entre niveles de refinamiento es el proceso de transferencia de datos entre grillas en niveles de refinamiento consecutivos, a través de las interfaces. Para dos nodos que comparten la misma posición espacial y pertenecen a niveles de refinamiento consecutivos, no es factible realizar una transferencia directa (entre nodos) de todas sus variables, en especial para las que dependen de parámetros de la grilla. La transferencia de datos y asignación de variables está basada en la expansión (B.5):

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{f}^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) + \mathbf{f}^{neq}(\mathbf{x}, t) \quad (5.2)$$

donde $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ se puede determinar en los nodos de interés si se conoce o especifica la relación que existe para \mathbf{f}^{eq} y \mathbf{f}^{neq} entre nodos en diferentes niveles de refinamiento.

En esta sección se especifican las relaciones que satisfacen las cantidades macroscópicas y las funciones \mathbf{f}^{eq} y \mathbf{f}^{neq} entre niveles de refinamiento. Se explicita el método de acoplamiento y las funciones de transferencia F_{fc} y F_{cf} . También se muestran los esquemas de interpolación temporal y espacial utilizados.

5.2.1. Requerimiento sobre cantidades macroscópicas

Para una misma posición espacial, la densidad ρ y cantidad de movimiento $\rho \mathbf{u}$ (o velocidad \mathbf{u}) del fluido, son independientes del nivel de refinamiento. Luego sobre todo nodo $p \in \mathcal{G}_{cf}^i$ y $\hat{p} \in \mathcal{I}_{cf}^{i+1}$ (o $p \in \mathcal{G}_{fc}^i$ y $\hat{p} \in \mathcal{I}_{fc}^{i+1}$) que compartan coordenadas espaciales $\tilde{\mathbf{x}}$ se debe satisfacer:

$$\rho^i(\tilde{\mathbf{x}}, t) = \rho^{i+1}(\tilde{\mathbf{x}}, t) \quad , \quad (\rho \mathbf{u})^i(\tilde{\mathbf{x}}, t) = (\rho \mathbf{u})^{i+1}(\tilde{\mathbf{x}}, t) \quad (5.3)$$

El requerimiento (5.3) determina implícitamente restricciones sobre la función distribución y momentos de equilibrio $\mathbf{f}^{eq}(\rho, \mathbf{u})$ y $\mathbf{m}^{eq}(\rho, \mathbf{u})$ según se utilice el modelo de colisiones LBM-SRT o LBM-MRT, esto es:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^{eq,i}(\rho, \mathbf{u}, t)|_{\mathbf{x}=\bar{\mathbf{x}}} &= \mathbf{f}^{eq,i+1}(\rho, \mathbf{u}, t)|_{\mathbf{x}=\bar{\mathbf{x}}} \\ \mathbf{m}^{eq,i}(\rho, \mathbf{u}, t)|_{\mathbf{x}=\bar{\mathbf{x}}} &= \mathbf{m}^{eq,i+1}(\rho, \mathbf{u}, t)|_{\mathbf{x}=\bar{\mathbf{x}}} \end{aligned} \quad (5.4)$$

donde el superíndice i e $i + 1$ hacen referencia al nivel de refinamiento.

5.2.2. Requerimiento sobre coeficientes de viscosidad ν y ν_B

De la expansión multi-escala (ver apéndice B) se encuentran relaciones que vinculan los coeficientes de viscosidad ν y ν_B con parámetros geométricos y temporales de la grilla tal que exista consistencia entre el LBM y NS. En el LBM-MRT la viscosidad cinemática y la volumétrica son parámetros libres que pueden elegirse de manera independiente; en el LBM-SRT solo ν es un parámetro libre. ν y ν_B son propiedades físicas del fluido que no dependen del nivel de refinamiento, $\nu^i = \nu^{i+1}$ y $\nu_B^i = \nu_B^{i+1}$. De las relaciones (B.72) y (B.73) para ν y ν_B se tiene:

$$\left(\frac{1}{s_\nu^i} - 0.5\right) \delta t^i = \left(\frac{1}{s_\nu^{i+1}} - 0.5\right) \delta t^{i+1} \quad (5.5)$$

$$\left(\frac{1}{s_{\nu_B}^i} - 0.5\right) \delta t^i = \left(\frac{1}{s_{\nu_B}^{i+1}} - 0.5\right) \delta t^{i+1} \quad (5.6)$$

con s_ν y s_{ν_B} parámetro de relajación relacionados a la viscosidad cinemática y volumétricas respectivamente. Los superíndices i e $i + 1$ hacen referencia al nivel de refinamiento. La expresión (5.5) es una restricción implícita sobre el número de Reynolds Re (2.26) que caracteriza el problema, un número adimensional independiente del nivel de refinamiento.

En el LBM-MRT D2Q9 $s_\nu = s_8 = s_9$ y $s_{\nu_B} = s_2$, mientras que en el LBM-SRT es aplicable solamente la restricción (5.5) en ν , ya que ν_B no es un parámetro libre del problema (ver sección B.2.2). Como $\tau_\nu = \frac{1}{s_\nu}$ de (5.5) se tiene:

$$\tau_\nu^{i+1} = \left(\tau_\nu^i - \frac{1}{2}\right) r_f + \frac{1}{2} \quad (5.7)$$

De (5.7) es posible encontrar cotas en r_f . Para el rango estable de τ_ν se obtiene $r_f \sim 50$ (valor también propuesto en [52]). Si bien esto es factible, lo estándar en la literatura es $r_f = 2$. Al incrementar r_f crece la cantidad de interpolaciones temporales necesarias para poder evolucionar en el tiempo. Dupuis et al. [126] presenta un método de refinamiento alternativo donde no existen limitaciones sobre r_f . Para $r_f = 2$ es factible utilizar entre 6 y 7 niveles de refinamiento en un problema LBM-SRT. En el LBM-MRT, la cantidad de niveles de refinamiento que se pueden utilizar es mayor. Esto ocurre debido a que el τ mínimo por problemas de estabilidad numérica es más pequeño en el LBM-MRT que en el LBM-SRT.

5.2.3. Determinación de \mathbf{f}^{neq} y \mathbf{m}^{neq}

Se aborda de manera independiente la determinación de \mathbf{f}^{neq} para los modelos LBM-SRT, y de \mathbf{m}^{neq} para los modelos LBM-MRT. Si bien es posible derivar ambos desde el

LBM-MRT, con el LBM-SRT como un caso particular del primero, se tratan de manera independiente por motivos de claridad.

5.2.3.1. LBM-SRT

Si es posible encontrar una expresión para $\mathbf{f}^{neq}(\mathbf{x}, t)$, se determinan completamente \mathbf{f} de (5.2). Siguiendo lo realizado en [126], se aproxima \mathbf{f}^{neq} a orden ϵ , se utiliza $\mathbf{f}^{neq}(\mathbf{x}, t) \approx \epsilon \mathbf{f}^1(\mathbf{x}, t)$. Del resultado (B.15) se tiene:

$$\mathbf{f}^1 = -\tau_\nu \delta t (\partial_t^0 \mathbf{f}^0 + \mathbf{c}_{i\alpha} \partial_{\mathbf{x}_\alpha} \mathbf{f}^0) \quad (5.8)$$

El término entre paréntesis (\cdot) de (5.8) es independiente del nivel de refinamiento, $\mathbf{f}^0 = \mathbf{f}^{eq}$. Luego de (5.8) se tiene:

$$\mathbf{f}^{neq,i} = \frac{\tau_\nu^i r_f}{\tau_\nu^{i+1}} \mathbf{f}^{neq,i+1} \quad (5.9)$$

con el superíndice i indicando el nivel de refinamiento. Las expresiones (5.9) y (5.4) establecen relaciones para \mathbf{f}^{neq} y \mathbf{f}^{eq} entre los niveles de refinamiento $g_s = i$ y $g_s = i + 1$; luego de (5.2) pueden obtenerse las relaciones buscadas.

Conocidas las variables en \mathbf{x}, t en el nivel $g_s = i + 1$ es posible determinar las variables en $g_s = i$:

$$\mathbf{f}^i(\mathbf{x}, t) = \mathbf{f}^{eq,i+1}(\mathbf{x}, t) + \frac{\tau_\nu^i r_f}{\tau_\nu^{i+1}} (\mathbf{f}^{i+1}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{eq,i+1}(\mathbf{x}, t)) \quad (5.10)$$

De igual manera se puede obtener:

$$\mathbf{f}^{i+1}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{f}^{eq,i}(\mathbf{x}, t) + \frac{\tau_\nu^{i+1}}{r_f \tau_\nu^i} (\mathbf{f}^i(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{eq,i}(\mathbf{x}, t)) \quad (5.11)$$

Las ecuaciones (5.10) y (5.11) son aproximaciones a las expresiones buscadas para las funciones de transferencia F_{fc} y F_{cf} respectivamente.

5.2.3.2. LBM-MRT

Por simplicidad se considera el LBM-MRT utilizando un esquema de velocidades D2Q9. Se obtienen expresiones que luego pueden generalizarse a otros esquemas de velocidad. De la sección B.3.2 se obtienen las siguientes aproximaciones, a primer orden en ϵ , de componentes del tensor de tensiones en el fluido:

$$\sigma_x = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{s_2}{2}\right) m_2^1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{s_8}{2}\right) m_8^1 \quad (5.12)$$

$$\sigma_y = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{s_2}{2}\right) m_2^1 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{s_8}{2}\right) m_8^1 \quad (5.13)$$

$$\tau_{xy} = \left(1 - \frac{s_9}{2}\right) m_9^1 \quad (5.14)$$

σ_x y σ_y son componentes de la diagonal del tensor de tensiones, mientras que τ_{xy} es la componente no diagonal.

Dados dos niveles de refinamiento $g_s = i$ y $g_s = i + 1$, se requiere que las tensiones en el fluido (expresiones (5.12), (5.13), y (5.14)) sean iguales para nodos que comparten posición

espacial y pertenecen a niveles de refinamiento diferentes. Estas restricciones determinan:

$$\frac{1}{6} \left(1 - \frac{s_2^i}{2}\right) m_2^{1,i} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{s_8^i}{2}\right) m_8^{1,i} = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{s_2^{i+1}}{2}\right) m_2^{1,i+1} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{s_8^{i+1}}{2}\right) m_8^{1,i+1} \quad (5.15)$$

$$\frac{1}{6} \left(1 - \frac{s_2^i}{2}\right) m_2^{1,i} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{s_8^i}{2}\right) m_8^{1,i} = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{s_2^{i+1}}{2}\right) m_2^{1,i+1} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{s_8^{i+1}}{2}\right) m_8^{1,i+1} \quad (5.16)$$

$$\left(1 - \frac{s_9^i}{2}\right) m_9^{1,i} = \left(1 - \frac{s_9^{i+1}}{2}\right) m_9^{1,i+1} \quad (5.17)$$

De la sección B.3.2, en el LBM-MRT y para el esquema D2Q9, $s_9 = s_8 = s_\nu$ y $s_2 = s_{\nu_B}$. Combinando las expresiones (5.15), (5.16), y (5.17) junto con las relaciones (5.5) y (5.6) se obtiene:

$$m_2^{1,i+1} = \frac{s_2^i}{s_2^{i+1} r_f} m_2^{1,i} \quad , \quad m_8^{1,i+1} = \frac{s_8^i}{s_8^{i+1} r_f} m_8^{1,i} \quad , \quad m_9^{1,i+1} = \frac{s_9^i}{s_9^{i+1} r_f} m_9^{1,i} \quad (5.18)$$

De la sección B.3.2 se pueden obtener relaciones adicionales para el esquema D2Q9 considerando la expansión a orden ϵ para los momentos no conservados. El término del lado izquierdo de las ecuaciones (B.48), (B.50), y (B.52) depende de variables macroscópicas que son independientes del nivel de refinamiento. Luego se satisfacen las siguientes relaciones en nodos con la misma posición espacial y en diferentes niveles de refinamiento:

$$\frac{s_3^i m_3^{1,i}}{\delta t^i} = \frac{s_3^{i+1} m_3^{1,i+1}}{\delta t^{i+1}} \quad , \quad \frac{s_5^i m_5^{1,i}}{\delta t^i} = \frac{s_5^{i+1} m_5^{1,i+1}}{\delta t^{i+1}} \quad , \quad \frac{s_7^i m_7^{1,i}}{\delta t^i} = \frac{s_7^{i+1} m_7^{1,i+1}}{\delta t^{i+1}} \quad (5.19)$$

Los parámetros de relajación en (5.19) no están involucrados en la determinación de consistencia del LBM con la ecuación de Navier-Stokes (NS) (ver sección B.3). Estos pueden tratarse como parámetros arbitrarios, si bien no intervienen en las ecuaciones hidrodinámicas tienen influencia en la estabilidad numérica [31]. Por simplicidad, y siguiendo el criterio de Chen et al. [127], se consideran estos parámetros de relajación como constantes en todos los niveles de refinamiento. Con los resultados anteriores es posible escribir las siguientes relaciones entre $\mathbf{m}^{neq,i}$ y $\mathbf{m}^{neq,i+1}$:

$$\mathbf{m}^{neq,i} = T_{i+1}^i \mathbf{m}^{neq,i+1} \quad , \quad \mathbf{m}^{neq,i+1} = T_i^{i+1} \mathbf{m}^{neq,i} \quad (5.20)$$

T_{i+1}^i y T_i^{i+1} son transformaciones que relacionan los momentos de no equilibrio entre niveles de refinamiento:

$$T_{i+1}^i = \text{diag} \left(1 \quad \frac{r_f s_e^{i+1}}{s_e^i} \quad r_f \quad 1 \quad r_f \quad 1 \quad r_f \quad \frac{r_f s_\nu^{i+1}}{s_\nu^i} \quad \frac{r_f s_\nu^{i+1}}{s_\nu^i} \right) \quad (5.21)$$

$$T_i^{i+1} = \text{diag} \left(1 \quad \frac{s_e^i}{r_f s_e^{i+1}} \quad \frac{1}{r_f} \quad 1 \quad \frac{1}{r_f} \quad 1 \quad \frac{1}{r_f} \quad \frac{s_\nu^i}{r_f s_\nu^{i+1}} \quad \frac{s_\nu^i}{r_f s_\nu^{i+1}} \right) \quad (5.22)$$

Luego es necesario, igual a lo realizado en el LBM-SRT, determinar las variables $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ en todos los niveles de refinamiento utilizando métodos de transferencia apropiados. De las relaciones obtenidas se encuentran las siguientes ecuaciones para la transferencia de

imponiendo un valor constante de $\tilde{\mathbf{f}}^{neq,i+1}(\mathbf{x}_{fc}, t)$ para todas las direcciones de velocidad discretas. El argumento para aplicar esta restricción en la transferencia es que la solución del problema en el nivel $g_s = i + 1$ contiene información que no puede ser resuelta en el nivel $g_s = i$.

Es posible aplicar en el LBM-MRT los métodos de restricciones (5.30) y (5.31). Chen et al. [127] utiliza directamente la expresión (5.23) para la transferencia de datos entre escalas de refinamiento en el LBM-MRT, sin restricciones. En $\{LBM\}$ se implementan los métodos de restricción (5.30) y (5.31). No se obtienen resultados aceptables al utilizar el método de restricción (5.31). Un problema particular se encuentra al no poder aplicar el método propuesto en nodos de borde, para ciertas direcciones de velocidad no se dispone de nodos primeros vecinos. En los resultados presentados no se utilizan restricciones.

5.2.5. Acoplamiento entre grillas desde $g_s = i$ a $g_s = i + 1$

El acoplamiento entre grillas desde un nivel de refinamiento $g_s = i$ hacia otro $g_s = i + 1$ requiere de un procedimiento más elaborado que el de la sección 5.2.4 anterior. Como se menciona en secciones anteriores, se tienen dos situaciones diferentes en la evolución temporal: cuando ambos niveles de refinamiento $g_s = i$ y $g_s = i + 1$ se encuentran en el mismo estado temporal $t^{i+1} = t^i$, y cuando grillas en $g_s = i + 1$ se encuentran temporalmente desfasadas una cantidad δt^{i+1} respecto a grillas en $g_s = i$.

Cuando las grillas se encuentran temporalmente desfasadas, la transferencia de datos entre nodos $p \in \mathcal{I}_{cf}^{i+1}$ y $\hat{p} \in \mathcal{G}_{cf}^i$ con igual coordenada espacial \mathbf{x}_{cf} requiere una interpolación temporal que determine las variables a tiempo $t^{i+1} = t^i - \frac{\delta t^i}{2}$. En el LBM-SRT, sobre los nodos $p \in \mathcal{I}_{cf}^{i+1}$ con coordenadas espaciales \mathbf{x}_{cf} se realiza la transferencia de datos utilizando:

$$\mathbf{f}^{i+1}(\mathbf{x}_{cf}, \tilde{t}) = \tilde{\mathbf{f}}^{eq,i}(\mathbf{x}_{cf}, \tilde{t}) + \frac{\tau_\nu^{i+1}}{r_f \tau_\nu^i} \tilde{\mathbf{f}}^{neq,i}(\mathbf{x}_{cf}, \tilde{t}) \quad (5.32)$$

con $\tilde{\mathbf{f}}^{eq,i}(\mathbf{x}_{cf}, \tilde{t}) = \mathbf{f}^{eq,i}(\tilde{\rho}^i, \tilde{\mathbf{u}}^i)$ donde $\tilde{\rho}^i = \rho^i(\mathbf{x}_{cf}, \tilde{t})$ y $\tilde{\mathbf{u}}^i = \mathbf{u}^i(\mathbf{x}_{cf}, \tilde{t})$ son cantidades macroscópicas a tiempo $\tilde{t} = t^{i+1}$. Las variables con tilde ($\tilde{\cdot}$) son una aproximación a tiempo $\tilde{t} = t^{i+1}$. Estas se obtienen vía interpolación temporal con datos en los niveles $g_s = i$ a tiempo t^i y $t^i - \delta t^i$. La interpolación temporal que se utiliza (ver sección 5.2.6) aproxima las variables a tiempo $\tilde{t} = t^{i+1}$ con precisión $\mathcal{O}(\delta t^{i+1})$, equivalente al orden de precisión temporal del LBM (ver sección 2.4). Es posible utilizar interpolaciones temporales más precisas, siendo necesario más de dos estados temporales de las variables que se interpolan.

Cuando las grillas en ambos niveles $g_s = i$ y $g_s = i + 1$ se encuentran en el mismo estado temporal $t^{i+1} = t^i$, la transferencia de datos entre aquellos nodos $p \in \mathcal{I}_{cf}^{i+1}$ y $\hat{p} \in \mathcal{G}_{cf}^i$ con igual coordenada \mathbf{x}_{cf} se realiza utilizando (5.11) en el LBM-SRT, y (5.24) en el LBM-MRT. Existen nodos $p \in \mathcal{I}_{cf}^{i+1}$ en coordenadas espaciales $\bar{\mathbf{x}}_{cf}$ donde no existe $\hat{p} \in \mathcal{G}_{cf}^i$. Sobre estos, la transferencia de datos se obtiene vía interpolación espacial. Se utilizan valores ya conocidos en los nodos p con coordenadas \mathbf{x}_{cf} . En el LBM-SRT se utiliza:

$$\mathbf{f}^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf}, t) = \bar{\mathbf{f}}^{eq,i}(\bar{\mathbf{x}}_{cf}, t) + \frac{\tau_\nu^{i+1}}{r_f \tau_\nu^i} \bar{\mathbf{f}}^{neq,i}(\bar{\mathbf{x}}_{cf}, t) \quad (5.33)$$

$\bar{\mathbf{f}}^{eq,i}(\bar{\mathbf{x}}_{cf}, t) = \mathbf{f}^{eq,i}(\bar{\rho}^{i+1}, \bar{\mathbf{u}}^{i+1})$, donde $\bar{\rho}^{i+1} = \rho^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf}, t)$ y $\bar{\mathbf{u}}^{i+1} = \mathbf{u}^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf}, t)$. La barra sobre las variables indica que son una interpolación espacial en $\bar{\mathbf{x}}_{cf}$ utilizando valores conocidos de las variables en los nodos \mathbf{x}_{cf} en la grilla $g_s = i + 1$.

En todos los casos, las interpolaciones espaciales utilizadas son polinomios unidimensionales de grado 3 y 4, la utilización de uno u otro depende si es un nodo cercano a una

esquina o un nodo interno. En la sección 5.2.6 se presentan los métodos de interpolación temporal y espacial utilizados. El procedimiento es equivalente en el LBM-MRT, donde se debe utilizar la expresión (5.24) para determinar \mathbf{f}^{i+1} .

5.2.6. Interpolación temporal y espacial

El acoplamiento entre grillas desde niveles de refinamiento $g_s = i$ a $g_s = i+1$ definido en la sección 5.2.5 requiere interpolaciones temporales y espaciales. En las secciones siguientes se presentan los métodos utilizados en la implementación del algoritmo de refinamiento.

Interpolación temporal Un método de interpolación temporal es necesario para la transferencia de datos entre nodos $p \in \mathcal{I}_{cf}^{i+1}$ y $\hat{p} \in \mathcal{G}_{cf}^i$ que coinciden en posición espacial. Las coordenadas espaciales de estos nodos se las denota con \mathbf{x}_{cf} . La interpolación temporal se realiza con valores de las variables en dos estados temporales consecutivos t^i y $t^i - \delta t^i$ en nodos $\hat{p} \in \mathcal{G}_{cf}^i$. Identificando las variables a interpolar con una función $h^i(\mathbf{x}, t)$ arbitraria, y utilizando un esquema $\mathcal{O}(\delta t^{i+1})$ se tiene:

$$h^{i+1}(\mathbf{x}_{cf}, t^{i+1}) = \frac{1}{2} (h^i(\mathbf{x}_{cf}, t^{i+1} + \delta t^{i+1}) + h^i(\mathbf{x}_{cf}, t^{i+1} - \delta t^{i+1})) \quad (5.34)$$

Interpolación espacial Un método de interpolación espacial es necesario para asignar valores en nodos $p \in \mathcal{I}_{cf}^{i+1}$ donde no existe $\hat{p} \in \mathcal{G}_{cf}^i$ en la misma posición espacial. Las coordenadas espaciales de estos nodos se las denota con $\bar{\mathbf{x}}_{cf}$. Se identifican las variables a interpolar con una función $h^{i+1}(\mathbf{x}, t)$ arbitraria en $g_s = i + 1$. Utilizando un esquema en una dimensión y de precisión $\mathcal{O}(\delta x^3)$ se tiene:

$$h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf}, t) = \frac{9}{16} (h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf} + \delta x, t) + h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf} - \delta x, t)) - \frac{1}{16} (h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf} + 3\delta x, t) + h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf} - 3\delta x, t)) \quad (5.35)$$

donde por simplicidad $\delta x = \delta x^{i+1}$. La interpolación en los bordes de cada grilla se trata de manera particular. En los bordes es necesario disponer de un esquema descentrado, a orden $\mathcal{O}(\delta x^2)$ se tiene:

$$h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf}, t) = \frac{3}{8} h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf} - \delta x, t) + \frac{3}{4} h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf} + \delta x, t) - \frac{1}{8} h^{i+1}(\bar{\mathbf{x}}_{cf} + 3\delta x, t) \quad (5.36)$$

La elección del polinomio interpolador para el esquema centrado y descentrado determina de manera indirecta los nodos mínimos necesarios en la grilla de interfaz.

5.3. Movimiento de grillas

Existen diferentes estrategias para establecer el arreglo de grillas (distribución, tamaños de grilla y dimensiones a utilizar) en el dominio del problema. En este trabajo se implementa una estrategia de distribución de grillas que se encuentra en una posición intermedia entre: el *método de refinamiento a priori* y el *métodos de refinamiento adaptativo*. Se establece una distribución inicial donde queda fijo n_{gs} y la cantidad de grillas que se utilizan. Sin embargo, se permite un ajuste en la dimensión de las grillas y su posición en el dominio fluido en tiempo de ejecución. La región de refinamiento no es estática.

Se implementa un algoritmo para mover el arreglo de grillas siguiendo algún patrón de desplazamiento particular.

Se tiene interés en resolver problemas de sedimentación de cuerpos rígidos, en especial los que se presentan en el Capítulo 6. Se busca una estrategia para reducir el costo computacional. Se utiliza un algoritmo elemental donde cada cuerpo rígido está siempre inmerso completamente en una grilla con el menor δx del problema. Esto garantiza que la geometría del cuerpo está siempre definida con la mayor precisión geométrica que garantiza el problema. Por simplicidad, la frontera del cuerpo y la de la grilla no se intersectan, no existe un cuerpo rígido contenido en dos grillas diferentes del problema. Se propone un patrón de desplazamiento particular que reduce el tamaño de la grilla más finas, no es necesario un tamaño adicional para contemplar movimientos del cuerpo rígido en su interior.

Definida la longitud del dominio computacional en el problema particular de interés, el tamaño de la grilla más gruesa elegido es el máximo permitido por límite de estabilidad numérica del LBM en el problema. El tamaño de la grilla más fina es una relación de compromiso entre precisión y costo computacional. En los problemas del Capítulo 6, siguiendo un criterio de precisión, se buscan límites superiores en el tamaño de la grilla más pequeña. Si la relación entre los tamaños de grilla más gruesa y más fina es mayor a r_f , es necesario adicionar grillas con δx intermedios adecuadamente posicionadas (ver configuración en las figuras 5.2 y 5.5). Para distinguirlas de las demás, denotamos a estas grillas como *grillas de transición*. Esta configuración es la que permite introducir la grilla más fina, vincularla con el resto del problema y poder evolucionar temporalmente.

En el problema de interés, la grilla más fina se desplaza siguiendo siempre al cuerpo rígido mediante movimientos discretos. Las grillas son estáticas respecto a un referencial inercial, lo que se modifica es su distribución y tamaño para algún instante determinado. El desplazamiento de las grillas se puede considerar como la creación de un nuevo problema con condiciones iniciales dadas de la solución del problema previo al desplazamiento.

Asumiendo que el cuerpo rígido está contenido en una grilla en $g_s = i$; cuando la partícula se desplaza una longitud $2\delta x^i = \delta x^{i-1}$ sobre alguno de los ejes coordenados, la grilla más fina se desplaza esa misma longitud en la dirección de desplazamiento del cuerpo rígido. La elección de un desplazamiento $2\delta x^i$ es el desplazamiento mínimo para la grilla $g_s = i$. Con esta elección, la mayoría de los nodos del nuevo problema pertenecen al mismo nivel de refinamiento y coinciden en posición espacial con nodos de la distribución de grillas previa al desplazamiento. Esto garantiza, en la mayoría de los casos, una asignación de valores directa. Cuando dos nodos coinciden en posición espacial pero pertenecen a grillas en diferentes niveles de refinamiento, la inicialización de variables se realiza siguiendo el método presentado en la sección 5.2.4 o 5.2.5 según corresponda. Cuando no existen nodos en la misma posición espacial se utiliza interpolación espacial como la presentada en la sección 5.2.6. No se elige un desplazamiento mayor con el objetivo principal de reducir el número de nodos a inicializar, y los errores introducidos con esta operación.

Es de interés conservar una distribución uniforme de las grillas de transición alrededor de las grillas con δx más pequeño. Garantizar una distribución uniforme evita zonas pequeñas donde existe una transición brusca en la discretización del dominio, esto no es deseable y debe evitarse o minimizarse ya que son regiones caracterizadas por transferencia de datos utilizando métodos aproximados.

En este trabajo, en especial para resolver los problemas del Capítulo 6, se adopta una estrategia donde las grillas de transición se desplazan y adaptan su tamaño para mantener una distribución uniforme alrededor de la grilla más fina. Cuando la grilla en $g_s = i$ se desplaza sobre otra en $g_s = i - 1$ una longitud $2\delta x^i$, las grillas en $g_s = i - 1$ alteran su

tamaño para adaptarse al desplazamiento de la anterior, sin movimientos de las grillas en $g_s = i - 1$ sobre las grillas en $g_s = i - 2$ (si existe). Si la grilla $g_s = i$ se desplaza nuevamente sobre otra en $g_s = i - 1$ una longitud $2\delta x^i$ en la misma dirección que la anterior, las grillas en $g_s = i - 1$ alteran su tamaño retornando al inicial asignado, para lo cual deben desplazarse sobre la $g_s = i - 2$. Todas las grillas alrededor de la más fina siguen esta secuencia de redimensionamiento y desplazamiento sobre las demás para mantener una distribución cuasi-uniforme. Esta estrategia reduce los errores por inicialización en los nodos del nuevo problema, y el costo computacional en el movimiento de grillas.

El algoritmo presentado se puede considerar una estrategia elemental, rudimentaria y no general para aplicar en problemas arbitrarios. Métodos más generales son los basados en refinamiento adaptativo [70, 125], donde en general se propone una distribución inicial uniforme del tamaño de grilla en todo el dominio, y luego en tiempo de ejecución, bajo algún criterio adecuadamente definido, se introducen zonas de refinamiento según se requiera. En resumen esto no es más que algún método eficiente que determine cual es la configuración y arreglo de las grillas en el dominio del problema, el resto de la implementación es equivalente a la presentada y utilizada en $\{LBM\}$.

En el algoritmo desarrollado es necesario definir a priori el origen del sistema de coordenadas y la extensión de todas las grillas. Luego si dos bordes de grilla están solapados y tienen diferente δx se crea una grilla de interfaz con las dimensiones apropiadas según sea necesario.

En la sección 6.2.2 se brindan algunos detalles adicionales del algoritmo y estrategia utilizada para el movimiento de las grillas.

5.4. Problemas de verificación

Se analizan una serie de problemas con el objetivo de verificar el método propuesto y algoritmo implementado para el refinamiento de grillas. En la sección 5.4.1 se analiza el problema de Poiseuille 3D utilizando dos configuraciones de refinamiento para diferentes esquemas de velocidad en el LBM. Este problema tiene solución analítica conocida desde las ecuaciones de NS. Utilizando una de las configuraciones se verifica de manera numérica la convergencia del error de aproximación para la velocidad. En la sección 5.4.2 se analiza el problema de una esfera en sedimentación dentro de un canal de sección cuadrada que contiene un fluido. Este problema está caracterizado experimentalmente y se conocen curvas de ajuste que se utilizan como comparación de los resultados numéricos. En la sección D.1 se analizan resultados de un problema de Poiseuille 2D utilizando tres niveles de refinamiento.

5.4.1. Problema de Poiseuille 3D

El problema de Poiseuille es un problema clásico de flujo interno viscoso. Se analiza el flujo laminar incompresible completamente desarrollado, contenido entre placas paralelas infinitas en el caso bidimensional (2D) o en un tubo de sección rectangular en el caso tridimensional (3D). En la figura 5.8 se muestra un esquema de la configuración geométrica del problema.

Sobre las paredes se impone velocidad cero, mientras que en las secciones de entrada-salida se fija una presión constante. En estas fronteras de geometría regular se utilizan condiciones de borde Dirichlet de presión y velocidad presentadas en la sección 3.2.3. Como resultado del gradiente de presión se genera en la sección del tubo un perfil de

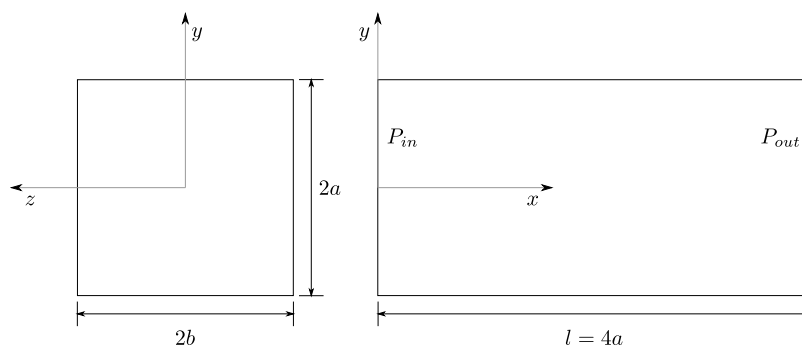


FIGURA 5.8: Esquema de la geometría de un problema de Poiseuille 3D.

velocidad particular. Este problema tiene solución analítica exacta, siendo de utilidad para comparar con los resultados numéricos obtenidos del LBM.

El problema de Poiseuille 3D queda determinado al definir las longitudes l , a , y b junto con las propiedades del fluido ν y ρ , y los valores de presión a la entrada P_{in} y salida P_{out} del canal. En flujo desarrollado incompresible, no existen variaciones en el perfil de velocidades en la dirección de movimiento. El perfil de velocidad en la sección transversal de un tubo de sección rectangular con gradiente de presión impuesto es una solución analítica dada por:

$$u(y, z) = -\frac{dp}{dx} \frac{16a^2}{\mu\pi^3} \sum_{i=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{(-1)^{\frac{i-1}{2}}}{i^3} \left(1 - \frac{\cosh\left(\frac{i\pi z}{2a}\right)}{\cosh\left(\frac{i\pi b}{2a}\right)} \right) \cos\left(\frac{i\pi y}{2a}\right) \quad (5.37)$$

con $-a \leq y \leq a$, $-b \leq z \leq b$, y $\mu = \frac{\nu}{\rho}$ la viscosidad dinámica del fluido.

Es deseable que el método de refinamiento implementado conserve las características intrínsecas de precisión del LBM, convergencia del error $\mathcal{O}(\delta x^2)$ en la velocidad (ver sección 2.4). En la sección 5.4.1.1 a continuación se realizan pruebas numéricas utilizando el problema de Poiseuille 3D para verificar que el método de refinamiento no degrada la convergencia del LBM en este problema. En la sección 5.4.1.2 se presentan resultados del mismo problema utilizando otra configuración de grillas de refinamiento.

5.4.1.1. Test de convergencia

El problema que se resuelve tiene solución analítica exacta (5.37), luego es posible definir una medida para estimar el error de aproximación. Como medida del error numérico se considera el error relativo de aproximación a la velocidad máxima en el problema de Poiseuille 3D. De la solución (5.37), la velocidad máxima se obtiene en el centro de la sección transversal del problema. El error relativo se define en la ecuación (5.38), $u(y, z)$ es la velocidad analítica exacta de (5.37), y $\bar{u}(x, y, z)$ la aproximación numérica obtenida del LBM. Se adopta el centro de la sección transversal en la región de salida como punto de evaluación de las velocidades $((x, y, z) = (l, 0, 0))$.

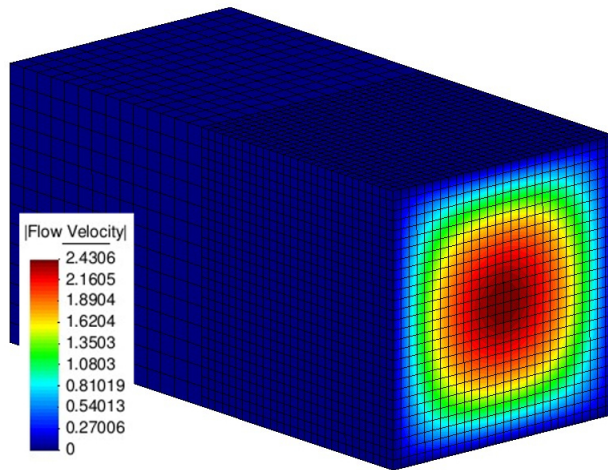


FIGURA 5.9: Distribución de velocidad en el dominio utilizado para resolver el problema de Poiseuille 3D. Se muestra un detalle de las grillas utilizadas en el problema.

$$\epsilon_r = \left| \frac{u(0,0) - \bar{u}(l,0,0)}{u(0,0)} \right| \quad (5.38)$$

Se elige $a = 0.005$ m y $b = 0.005$ m. Se impone un gradiente de presión $\frac{dp}{dx} = -10132.5 \frac{\text{Pa}}{\text{m}}$. Considerando 50 términos de la expresión (5.37) se obtiene $u(0,0) = 2.4374 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ en el centro de la sección. El dominio del problema está formado por dos grillas simples de dimensiones $2a \times 2b \times l/2$. En la figura 5.9 se pueden apreciar las grillas consideradas y la distribución de velocidad obtenida del LBM-SRT con esquema de velocidad D3Q15 y el menor tamaño de grilla.

Se analiza el problema para seis discretizaciones. En la grilla más fina se utiliza: $13 \times 13 \times 13$, $17 \times 17 \times 17$, $21 \times 21 \times 21$, $25 \times 25 \times 25$, y $29 \times 29 \times 29$ nodos, evaluando $\bar{u}(\mathbf{x})$ en el punto medio de la sección de salida. En la figura 5.10 se muestra la convergencia del error (5.38) para el problema propuesto. Se utiliza el modelo LBM-SRT cuasi—incompresible con los esquemas de velocidad D3Q15, D3Q19 y D3Q27, y el modelo LBM-MRT para el esquema de velocidad D3Q15.

De los resultados se puede observar una convergencia de segundo orden del error en la estimación de la velocidad en el centro de la sección de salida. No se aprecian diferencias significativas en el error cuando se utiliza el esquema de velocidad D3Q15 y D3Q19. Sí se observa, como es esperable, un error inferior al utilizar el esquema D3Q27.

5.4.1.2. Arreglo alternativo de grillas de refinamiento

Se analiza un problema de Poiseuille 3D con la configuración geométrica y propiedades del fluido presentadas en la sección 5.4.1.1. Se utilizan dos niveles de refinamiento con una partición de dominios dispuestos como se muestra en la figura 5.11. Se analiza el problema utilizando el modelo LBM-SRT cuasi—incompresible con esquemas de velocidad D3Q15, D3Q19, y D3Q27. En la figura 5.12 se muestra la distribución de velocidad obtenida utilizando el modelo D3Q15. En la figura 5.12a se muestra en escala de colores la distribución de velocidad en el dominio del problema. También se presentan algunos subdominios que forman el problema con motivo de observar la distribución interna de velocidades. En la figura 5.12b se muestra un perfil de velocidad de un corte central ($y = 0$) en la sección de salida. Se puede apreciar una buena correlación entre los resultados obtenidos y la solución exacta. Se observa que la configuración propuesta brinda menor error de aproximación a la solución exacta que los resultados presentados en la sección anterior.

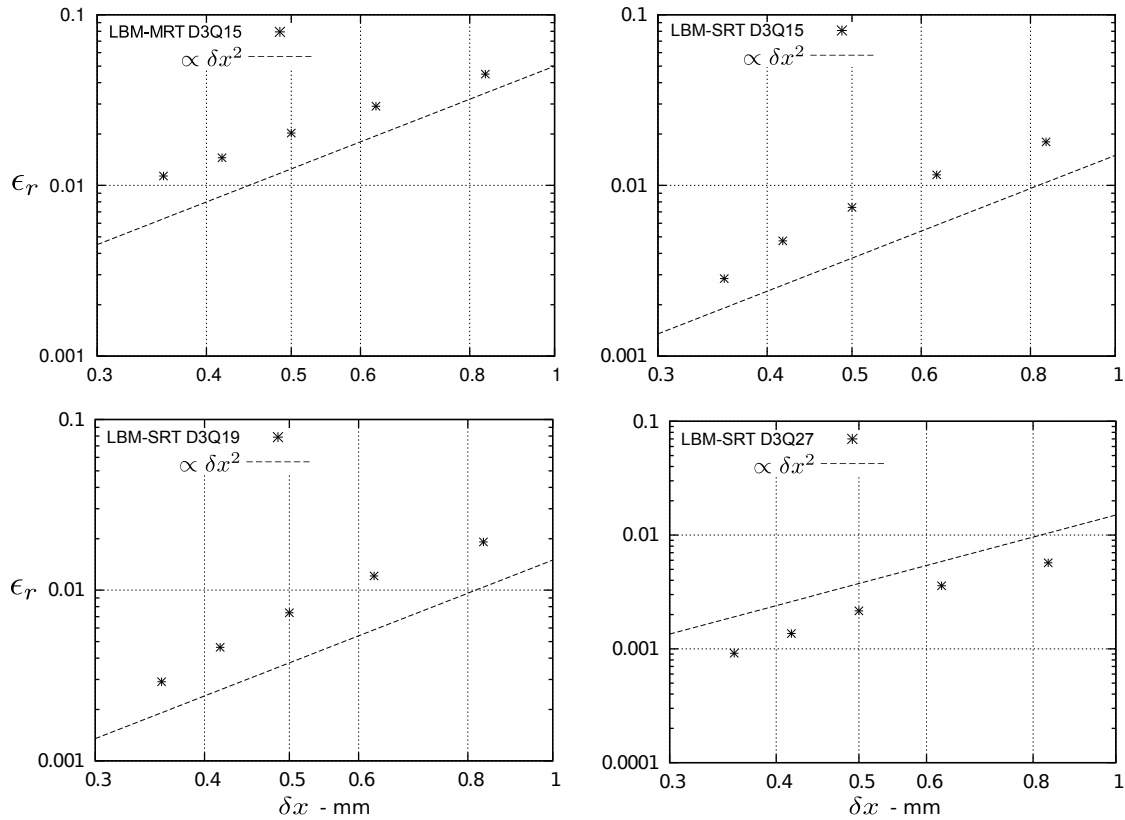


FIGURA 5.10: Convergencia del error (5.38) en función del espaciamiento de grilla δx en el problema de Poiseuille 3D. Se utiliza el modelo LBM-SRT quasi—incompresible con los esquemas de velocidad D3Q15, D3Q19 y D3Q27, y el modelo LBM-MRT con el esquema D3Q15.

5.4.2. Sedimentación de una esfera dentro de un ducto de sección cuadrada

En este problema se evalúa la velocidad terminal de una esfera en caída libre en un fluido viscoso dentro de un tubo de sección cuadrada. En la figura 5.13a se muestra una configuración esquemática del problema. Se evalúa numéricamente la velocidad terminal v_c de la esfera para diferentes relaciones $\frac{2r}{L}$, con r el radio de la esfera y L la longitud de la sección transversal del ducto. El interés es cuantificar el efecto de la proximidad de las paredes del ducto sobre v_c . En especial se busca la relación $\frac{v_c}{v_T}$ denominada *factor de corrección de pared*, con v_T la velocidad terminal de la esfera en un dominio infinito, velocidad de sedimentación libre.

La velocidad terminal de un cuerpo rígido es la velocidad estacionaria que alcanza en sedimentación cuando las fuerzas másicas se equilibran con las viscosas actuando sobre el cuerpo. Considerando las fuerzas viscosas como las obtenidas en un problema de Stokes [5], v_T para la esfera es:

$$v_T = \frac{2}{9} r^2 \frac{g}{\nu} \left(\frac{\rho_e}{\rho_f} - 1 \right) \quad (5.39)$$

con ρ_e la densidad del material de la esfera, ρ_f y ν la densidad y viscosidad cinemática del fluido.

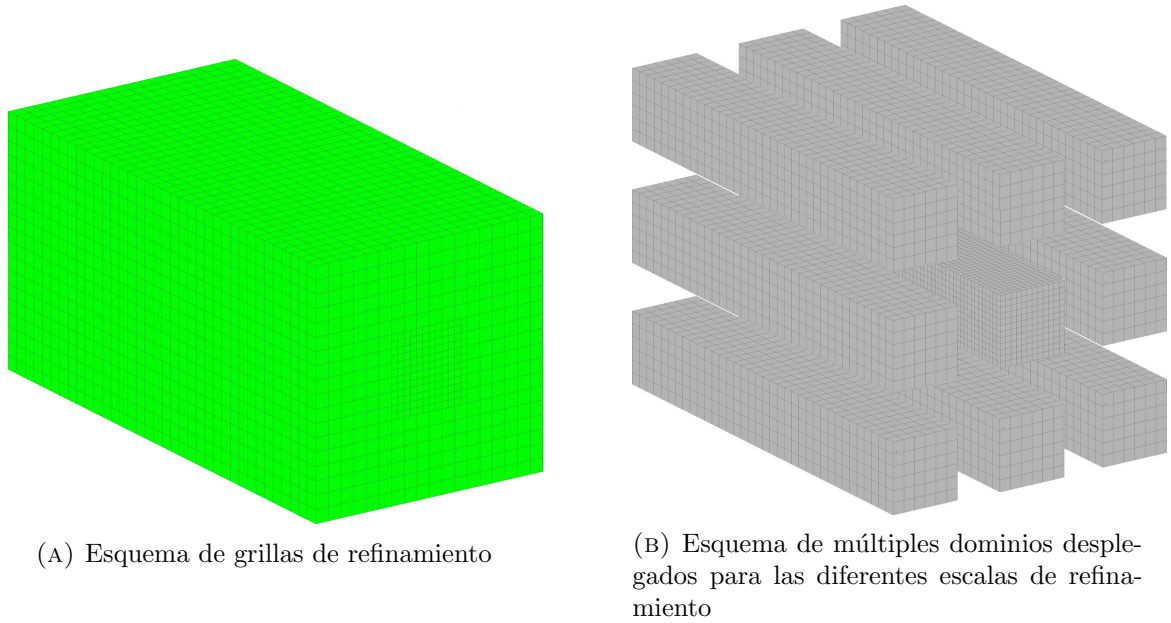


FIGURA 5.11: Partición de dominio del problema de Poiseuille 3D en múltiples dominios regulares y disposición de la región de refinamiento en la zona central para dos niveles de refinamiento.

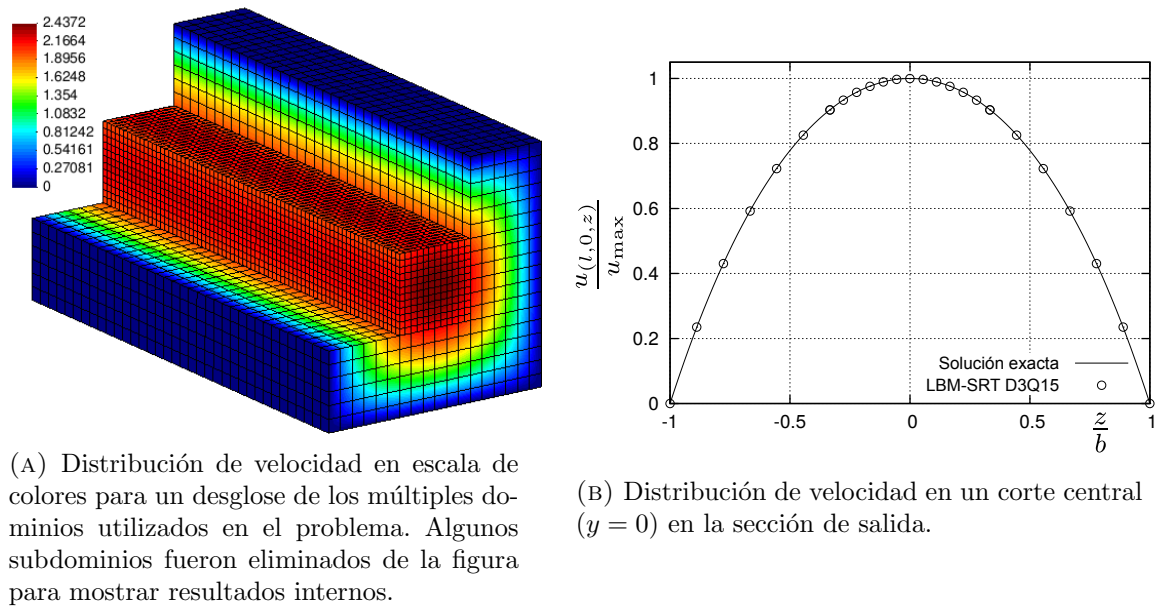


FIGURA 5.12: Resultados del problema de Poiseuille 3D.

El problema de sedimentación de una esfera en un ducto de sección cuadrada es analizado por Aidun et al. [62] - utilizando el método de lattice Boltzmann - y experimentalmente por Miyamura et al. [128]. En [62] utilizan el LBM-SRT con esquema de velocidad D3Q15 para modelar el fluido, con condiciones de borde y evaluación de fuerzas particulares propuestas en el mismo trabajo. En [128] analizan experimentalmente el efecto de la proximidad de los bordes sobre v_T . Examinan el problema de sedimentación para diferentes diámetros de esferas y configuraciones de la sección transversal del ducto.

En este trabajo se analiza el problema para tres configuraciones del dominio fluido, se

las denota como: *test 1*, *test 2* y *test 3*. En la configuración *test 1* y *test 2* se utiliza un modelo LBM-SRT para diferentes dimensiones y discretizaciones del dominio con tamaño de grilla uniforme. En el *test 3* se utiliza un modelo LBM-MRT, condiciones de borde convectivas de la sección 3.5 con refinamiento y movimiento de grilla. El objetivo de esta configuración es disminuir el costo computacional. Se ensayan las configuraciones propuestas para verificar resultados en dos rangos diferentes de números de Reynolds, uno que contiene los resultados presentados en [62], y el otro los presentados en [128]. También se verifica la influencia en los resultados de las diferentes condiciones de borde y refinamiento de grilla utilizado.

En la configuración *test 1* se utiliza un tubo de sección cuadrada de lado $L = 50$ mm y longitud $H = 20L$. Se evalúa v_c para seis diámetros de esferas (desde $r = 5$ mm a $r = 17.5$ mm), obteniendo relaciones $\frac{2r}{L}$ en el rango 0.2 a 0.7. Se utiliza una discretización de $35 \times 680 \times 35$ nodos de grilla.

En la configuración *test 2* se modela el ensayo experimental presentado por Miyamura et al. [128]. Se elige $L = 10$ mm y $H = 70L$, y se evalúa v_c para siete diámetros de esferas ($r = [0.5, 4]$ mm) con $\frac{2r}{L}$ en el rango 0.1 a 0.8. En rigor esta configuración es una aproximación al experimento realizado en [128], la longitud H utilizada es menor a la del experimento. Se utiliza una discretización de $31 \times 2101 \times 31$ nodos de grilla, también se realizan ensayos numéricos particulares con $51 \times 3501 \times 51$ con motivo de verificar la influencia de la discretización en los resultados.

En la configuración *test 1* y *test 2* se utilizan condiciones de borde Dirichlet (sección 3.2.3) con velocidad cero para todos los bordes y todo tiempo. Sobre la superficie de la esfera se utiliza el método FH-MSL [51], presentado en la sección 3.3.2. En ambas configuraciones la esfera se posiciona inicialmente en el centro de la sección transversal, y a una distancia $h = 10L$ y $h = 50L$ respectivamente desde la superficie horizontal inferior del dominio fluido. El ensayo consiste en dejar caer libremente la esfera desde su posición inicial h (ver figura 5.13a) a $t = t_0$ con velocidad inicial cero. Luego, alcanzado el estado estacionario se evalúa v_c para los casos de interés.

En la configuración *test 3* se ensaya el problema en el mismo rango de números de Reynolds que el *test 2*. A diferencia del anterior, en este caso se adopta un esquema de refinamiento y movimiento de grillas (sección 5.3). La región de refinamiento está posicionada como se muestra de forma esquemática en la figura 5.13a, desde H_1 hasta $H_1 + H_2$. Se consideran cuatro escalas ($n_{gs} = 4$) de refinamiento, la de menor δx contiene al cuerpo rígido y se desplaza en combinación con las demás siguiendo el movimiento del cuerpo. Los valores de H y h que brindan resultados aceptables y reducen el costo computacional se obtienen realizando una serie de ensayos numéricos de verificación (no se incluyen en este trabajo). Se considera resultado aceptable aquel que no se encuentra influenciado por la relación $\frac{H}{L}$. De las evaluaciones numéricas, no se observa influencia en los resultados para relaciones $\frac{H}{L} \geq 12$. En la configuración *test 3* se adopta $L = 0.01$ m y $H = 12L$, con una región de refinamiento de longitud $H_2 = 2.6L$ posicionada en $H_1 = 6L$. Se utiliza una discretización de $81 \times 81 \times 81$ nodos para la grilla más fina que contiene al cuerpo rígido en su posición central. A ambos lados de esta grilla y en la dirección longitudinal, se introduce un apilamiento de grillas - dos niveles de refinamiento hacia ambos lados de $L \times 0.4L \times L$ - hasta alcanzar la grilla más gruesa.

En el *test 3* y para la frontera que define la superficie de la esfera se imponen condiciones de borde Dirichlet de velocidad utilizando el método BFL [53] de la sección 3.3.3. Sobre las paredes laterales e inferior del dominio se imponen condiciones de borde de Dirichlet. En la pared superior horizontal se utilizan condiciones de borde convectivas para representar un dominio de longitud cuasi-infinita (ver sección 3.5).

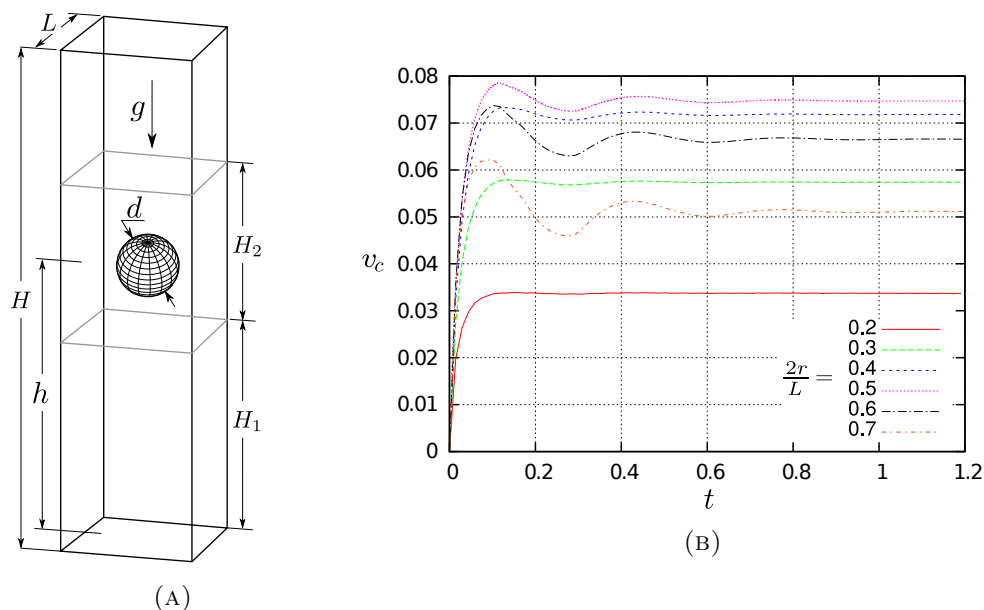


FIGURA 5.13: Figura A: esquema de la configuración geométrica del problema. Figura B: evolución temporal de la velocidad vertical de la esfera para la configuración test 1.

La posición inicial de la esfera es en el centro de la sección transversal a una distancia $h = 7L$ desde la base del dominio computacional. Se impone como condición inicial una velocidad homogénea \mathbf{u}_0 sobre todo el dominio fluido. La esfera es liberada en su posición inicial a $t = 0$ s con velocidad \mathbf{u}_0 , aproximadamente igual y en dirección opuesta a v_c . Existen al menos dos motivos principales para analizar el problema en un referencial con velocidad constante. Por un lado, mantener el cuerpo rígido en una posición aproximadamente constante - relativa al dominio computacional - disminuye el desplazamiento necesario de las grillas para que el cuerpo rígido permanezca siempre en la región de refinamiento. Por otro lado, utilizar esta configuración junto con condiciones de borde convectivas permite reducir notablemente el tamaño del dominio computacional. El cuerpo rígido se mantiene en una posición aproximadamente constante, permitiendo adoptar la relación mínima $\frac{H}{L}$ apropiada tal que se encuentre siempre en una posición alejado de los bordes para el tiempo de sedimentación que se modela.

Obtenida v_c para las tres configuraciones analizadas, y evaluando la velocidad terminal v_T de la ecuación (5.39), se encuentra el factor de corrección de pared ($\frac{v_c}{v_T}$) para las relaciones $2r/L$ de interés. En las figuras 5.13b, 5.14 y 5.15 se muestran los resultados obtenidos para las configuraciones test 1, 2, y 3. En la figura 5.13b se muestra la evolución temporal de la velocidad vertical para las diferentes relaciones $\frac{2r}{L}$ analizadas en la configuración test 1.

En la figura 5.14 se muestran los resultados de ($\frac{v_c}{v_T}$) para las configuraciones test 1 y 2. Por motivos de claridad se presenta en la figura 5.15 los resultados obtenidos para la configuración test 3. En ambas figuras, y con motivos de contrastar los resultados del LBM, se introduce el polinomio de ajuste de los datos experimentales presentado en [128].

Los resultados para la configuración test 1 se obtuvieron con el LBM-SRT cuasi—incompresible y un esquema de velocidad D3Q19 con discretización $35 \times 545 \times 35$. También se realizan evaluaciones del problema utilizando los esquemas D3Q27 y D3Q15 sin observar diferencias significativas respecto a los obtenidos con el D3Q19. En base a estos resultados y con motivos de reducir el costo computacional, en el test 2 se utiliza exclusivamente el

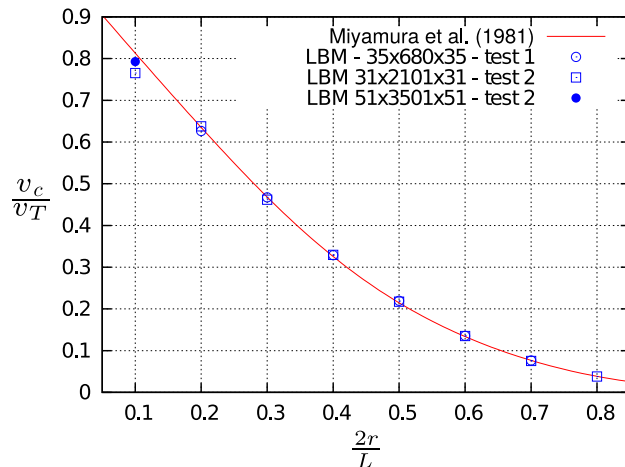


FIGURA 5.14: Factor de corrección de pared $\frac{v_c}{v_T}$ en función de la relación $\frac{2r}{L}$ para una esfera de radio r en sedimentación dentro de un tubo de sección cuadrada. Resultados de la configuración test 1 y test 2 para diferentes discretizaciones.

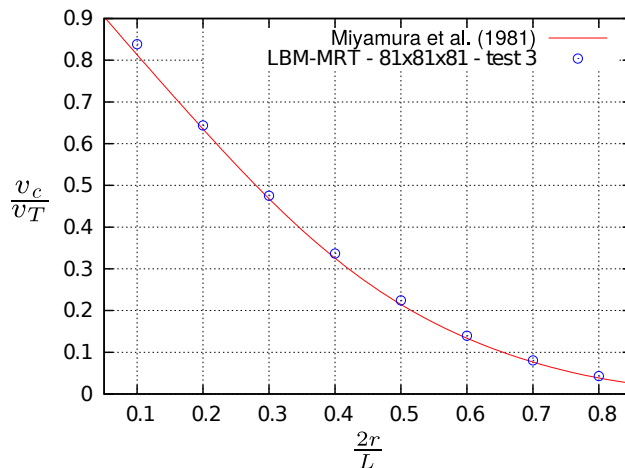


FIGURA 5.15: Factor de corrección de pared $\frac{v_c}{v_T}$ en función de la relación $\frac{2r}{L}$ para una esfera de radio r en sedimentación dentro de un tubo de sección cuadrada. Resultados de la configuración test 3. Se utiliza el LBM-MRT con un esquema de velocidad D3Q15.

esquema de velocidad D3Q15. En el test 3 se utiliza el modelo LBM-MRT con un esquema de velocidad D3Q15.

El rango de números de Reynolds de las simulaciones es de $0.34 \leq Re \leq 1.99$ para el test 1, y de $0.0005 \leq Re \leq 0.39$ para los test 2 y 3, frente a $0.2 \leq Re \leq 0.6$ en [62] y $0.000241 \leq Re \leq 0.699$ en [128].

Se puede apreciar de las figuras 5.14 y 5.15 que los resultados obtenidos del LBM, para todas las configuraciones analizadas, presentan una buena correlación con los datos experimentales presentados en [128]. Se observa un error de aproximación para el caso $\frac{2r}{L} = 0.1$ en el test 2 con discretización $31 \times 2101 \times 31$. Esta discrepancia se atribuye a una discretización gruesa de la geometría, notable especialmente para los tamaños más pequeños de esferas ya que la discretización se mantiene constante en cada configuración para todo r analizado. Para verificar esta afirmación se realizan ensayos numéricos de la configuración test 2 utilizando una discretización de $51 \times 3501 \times 51$. En la figura 5.14 se muestra el resultado obtenido para esta discretización, se puede observar una mejor aproximación a la curva de ajuste de los resultados experimentales cuando aumenta el número de puntos

que describen la geometría de la esfera. Si la discretización es incrementada como ocurre en el test 3, el error de aproximación para $\frac{2r}{L} = 0.1$ disminuye como es esperable, esto se puede observar en la figura 5.15. De los resultados presentados, se puede apreciar que los obtenidos con la configuración test 3, además de presentar una buena correlación con los obtenidos experimentalmente, son los de menor costo computacional.

Los resultados obtenidos con el algoritmo propuesto presentan una mejor aproximación a los datos experimentales que los presentados por Aidun et al. [62], donde también utilizan el LBM.

5.5. Comentarios y conclusiones

En este capítulo se muestran detalles del algoritmo implementado y los métodos necesario para poder aplicar refinamiento de grillas en el LBM. Se identifican las operaciones necesarias a realizar en el problema de refinamiento para poder evolucionar temporalmente en múltiples grillas con diferente δx . Se identifica también un patrón de operaciones que se repite siguiendo un orden jerárquico, basado en esto se propone un algoritmo general que permite evolucionar temporalmente en n_{gs} niveles de refinamiento. Este es un aporte original de esta sección, ya que en la literatura se abordan siempre problemas con $n_{gs} = 2$ o 3 niveles de refinamiento sin mayores detalles del algoritmo general para n_{gs} arbitrario.

De los resultados presentados en la sección 5.4.1, se puede observar que el algoritmo propuesto brinda una convergencia cuadrática en el error de aproximación a la velocidad. Esto es deseable y se condice con el orden de precisión intrínseca del LBM y las condiciones de borde. En rigor, en los problemas de verificación se evalúa no solamente el método de refinamiento propuesto, sino que también el acoplamiento entre: el LBM en el interior del dominio, los métodos de condición de borde y el método de refinamiento. Los resultados de la sección 5.4.2 muestran también un comportamiento correcto del método refinamiento implementado, con una buena correlación con los resultados experimentales presentados.

Un tema relevante y de interés en mecánica computacional del que no se hace énfasis en este capítulo es la posibilidad de paralelizado que brinda la estrategia de partición de dominio implementada. Esto es de especial relevancia en los modelos LBM y esquemas de velocidad utilizados, donde las evaluaciones son locales o entre primeros vecinos.

Sobre el algoritmo utilizado para el movimiento de grillas, si bien es una propuesta elemental y rudimentaria de aplicación no general, cumple con los objetivos en los problemas de interés. Con lo implementado es posible introducir algún algoritmo de refinamiento adaptativo que determine de manera eficiente cual es la configuración y arreglo de las grillas en el dominio del problema, luego el resto de la implementación es equivalente a la presentada y utilizada en $\{LBM\}$.

Capítulo 6

Simulación y análisis numérico de la sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera

En este capítulo se utiliza el método de lattice Boltzmann (LBM) para simular y analizar la sedimentación de pequeños cristales de hielo en la atmósfera. Se tiene especial interés en evaluar la velocidad terminal de cristales de hielo con geometría tipo columna de sección hexagonal. El objetivo principal es evaluar el LBM como una herramienta numérica de utilidad para resolver el problema de sedimentación utilizando una variedad de tamaños de cristales de hielo. Se presentan resultados del LBM en comparación con mediciones experimentales de laboratorio y aproximaciones teóricas conocidas. Los resultados numéricos para las configuraciones geométricas analizadas muestran una buena correlación con las estimaciones teóricas y resultados experimentales.

El contenido de este capítulo está basado en un trabajo publicado en [2].

6.1. Sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera

En la atmósfera, específicamente en nubes, se pueden encontrar cristales de hielo con una variedad de formas, tamaños y masas. Las características de los cristales que se forman están fuertemente influenciadas por la temperatura [129, 130]. Una clasificación de estos cristales, con una descripción general de formas, tamaños y masas puede encontrarse en Ryan et al. [129], Heymsfield and Iaquinta [130], Magono and Lee [131], Bailey and Hallett [132], Lindqvist et al. [133], Um and McFarquhar [134].

Ciertos comportamientos de la atmósfera y de las nubes están caracterizados por parámetros relacionados con la dinámica de las partículas de hielo [135]. Se requiere una estimación precisa de la velocidad terminal de los cristales para determinar cuantitativamente su evolución en la atmósfera. Es necesario conocer la velocidad de sedimentación para la simulación del *ice water path*¹ y para la determinación de los contornos de las nubes [136]. También es utilizada para el estudio de procesos micro-físicos en nubes y en modelos del clima [136, 137].

¹El contenido de hielo-agua (IWC) se define como la masa de hielo en la nube por unidad de volumen. La integral vertical de IWC es el *ice water path* (IWP)

Para un gran espectro de formas, es deseable disponer de mediciones detalladas y con cierta exactitud, de la relación entre: la velocidad terminal, la masa y dimensiones características de los cristales. Una determinación precisa de estas relaciones permite obtener parametrizaciones confiables de la velocidad terminal de las partículas en la nube; estas son esenciales para simulaciones confiables de nubes en los modelos de circulación general (GCMs) de cantidad de precipitación, disipación y propiedades ópticas de nubes [130, 136].

Si bien existe una variedad de propuestas en la literatura, el problema de sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera no ha sido completamente caracterizado [130, 138, 139]. Existen soluciones analíticas que determinan con exactitud la velocidad terminal de partículas esféricas. Sin embargo, no existe una estimación analítica precisa para predecir la velocidad terminal de otras formas que no sean esferas; esto debido a la gran variedad de formas, tamaños, masas, y el amplio rango de números de Reynolds involucrado en los problemas de sedimentación de cristales de hielo. Diversos trabajos en la literatura [130, 136, 138–144] proponen esquemas que parametrizan la masa, formas y tamaños de los cristales para estimar su velocidad terminal. También se puede obtener la velocidad terminal de las partículas de hielo, mediante estimaciones teóricas o experimentales, de la relación entre el número de Reynolds (Re) y el Best (o Davis) number (X) [140, 142, 145, 146]. Existe una variedad de trabajos experimentales donde la velocidad terminal, la masa y el tamaño de varios tipos de partículas de hielo han sido medidos y caracterizados. Algunos resultados experimentales, relevados de mediciones de laboratorio y observaciones de campo en la atmósfera, pueden ser encontrados en [137, 145–149].

Las propuestas teóricas presentadas en [136, 140–144], han mostrado para una variedad de partículas, buenas aproximaciones a la velocidad terminal de los cristales cuando $Re \gg 1$. Sin embargo, Westbrook et al. [150] muestra que en el régimen de flujo viscoso ($Re \ll 1$) estas formulaciones sobrestiman la velocidad terminal de los cristales. Utilizando una aproximación y resultados de Westbrook et al. [150] y Hubbard and Douglas [151], Westbrook [138] brinda una estimación para la relación de sedimentación de pequeños cristales de hielo (dimensiones menores a $100\mu\text{m}$). Para cristales de hielo tipo columna, estas estimaciones tienen una buena correlación con resultados experimentales (errores menores al 20%). Una revisión completa de las principales aproximaciones teóricas y resultados experimentales puede encontrarse en [130, 136, 139, 142–144].

La sedimentación del cristal de hielo en la atmósfera es un problema de interacción cuerpo rígido-fluido e interacción entre cuerpos rígidos. Cada cristal se mueve bajo la acción de su propio peso, fuerzas de flotación, y por la interacción con otros cuerpos rígidos y el fluido que lo rodea. Dada una caracterización de la forma, tamaño y densidad de masa del cristal, junto con las condiciones atmosféricas, es posible determinar completamente su comportamiento dinámico utilizando algún método de dinámica de fluido computacional que pueda resolver el problema de manera adecuada. Con un método numérico preciso es posible evaluar la velocidad terminal de cristales de hielo para tamaños, formas y masas de los que no se disponen datos experimentales. Además, para una forma definida del cristal, se puede analizar la sensibilidad del problema relacionada a su masa y tamaño.

En la literatura revisada, y para el rango de longitudes analizadas en éste trabajo ($l = 15 - 80\mu\text{m}$), no se encuentran resultados numéricos del problema de sedimentación de interés. Sin embargo, existen algunos trabajos que resuelven numéricamente el problema de sedimentación de cristales en la atmósfera [152–154]. Hashino et al. [154], utilizando un software comercial (ANSYS Fluent) basado en el método de volúmenes finitos, estudia el problema de sedimentación de cristales con forma de columna para $l > 600\mu\text{m}$.

El método de lattice Boltzmann (LBM) permite resolver, de manera precisa y relativamente simple, el flujo de fluido en problemas de cuerpo con movimiento arbitrario y

de geometrías no regular (problemas de interacción cuerpo rígido-fluido). El comportamiento de partículas en sedimentación ha sido analizado con el LBM en una variedad de problemas [49, 62, 113, 115, 117, 155]. En los capítulos 4 y 5 se muestran resultados de la sedimentación de algunos cuerpos rígidos de interés.

En este capítulo se utiliza el LBM para analizar el comportamiento dinámico de cristales de hielo con geometría de columna (o tipo columna). Se obtiene la velocidad terminal de los cristales para un rango de tamaños, con longitud característica en el rango $l = 15 - 80 \mu\text{m}$. Los resultados LBM son obtenidos en un régimen viscoso ($\text{Re} \ll 1$). Este es el régimen del flujo de fluido en el cual tiene lugar la sedimentación de las partículas de hielo más pequeñas en la atmósfera. La precisión del LBM para resolver estos problemas, es evaluada por comparación con resultados experimentales [137, 146, 148, 149] y con propuestas teóricas conocidas [136, 138, 142–144].

En las sección 6.2 se resuelve, utilizando LBM, la sedimentación de partículas de hielo en la atmósfera. Resultados numéricos para geometrías tipo columna se muestran en la sección 6.2.1, mientras que en la sección 6.4 se presentan tablas con los resultados obtenidos del LBM. En la sección 6.3 se verifica la convergencia del método implementado con respecto al tamaño de grilla. Para finalizar, en la sección 6.5 se presentan comentarios y conclusiones del capítulo.

6.2. Sedimentación de cristales de hielo tipo columna

En esta sección se estudia el problema principal de este trabajo, se resuelve y analiza la sedimentación de cristales de hielo en la atmósfera. Se tiene especial interés en evaluar, utilizando el LBM, la velocidad terminal de los cristales de hielo de geometría tipo columna de sección hexagonal para cierto rango de tamaños. Se modela este problema considerando al cristal como un cuerpo rígido que se mueve por acción de su propio peso, fuerzas de flotación y por interacción con el fluido que lo rodea. No se consideran interacciones entre cuerpos rígidos, el interés es analizar cuerpos rígidos aislados en la atmósfera. Luego el problema de sedimentación de un cristal o partícula en la atmósfera, es un problema de interacción cuerpo rígido-fluido.

La hipótesis de cuerpo aislado es una buena aproximación al movimiento de los cristales de hielo en la atmósfera. La concentración de partículas de hielo en cirrus se encuentra típicamente entre 50 y 500 l^{-1} , mientras que las concentraciones máximas en cumulonimbus alcanza 300 l^{-1} [156]. Los cristales de hielo de geometría tipo columna de sección cuasi-hexagonal y tipo agujas crecen típicamente en la atmósfera en el rango de temperaturas de -3 a -9°C y -18 a -24°C [129, 131, 132, 138, 157].

En las evaluaciones numéricas, los cristales son modelados como columnas de sección hexagonal. La sedimentación es analizada en un flujo de fluido con $0.006 < \text{Re} < 0.4$. Este es aproximadamente el régimen de Re en el cual ocurre la sedimentación de las partículas de hielo más pequeñas en la atmósfera. En la figura 6.1 se muestra un esquema de la geometría del cuerpo rígido que representa el cristal de hielo, se denota con l su longitud, y con a la semi-longitud de su sección transversal. x', y', z' son las coordenadas cartesianas en un marco de referencia fijo al cuerpo. La orientación espacial del cuerpo rígido con respecto a un sistema de coordenadas inercial x, y, z fijo en el espacio, esta definida por los ángulos de Euler ϕ, θ y ψ siguiendo el orden rotacional intrínseco z, x, z . Se adopta $\tilde{l} = \sqrt{l^2 + (2a)^2}$ como una longitud de referencia, utilizada para evaluar el número de Reynolds del problema.

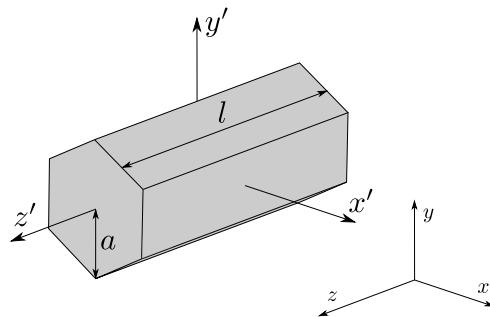


FIGURA 6.1: Esquema de la geometría del cuerpo rígido utilizado para representar los cristales de hielo de geometría tipo columna de sección hexagonal. x' , y' , z' son las coordenadas cartesianas en un marco de referencia solidario con el cuerpo, mientras que x , y , z es un sistema de coordenadas inercial fijo en el espacio.

Se realizan evaluaciones numéricas para una variedad de relaciones de aspecto $a_r = \frac{l}{2a} \in [1, 3]$. La longitud de los cristales analizados está en el rango $15 \mu\text{m} \leq l \leq 80 \mu\text{m}$. Las propiedades del fluido son elegidas como las del aire a una temperatura $T = -8^\circ\text{C}$ con una presión atmosférica $P = 101325 \text{ Pa}$. Se eligen estas propiedades con intención de modelar las condiciones de laboratorio utilizadas en Bürgesser et al. [149].

6.2.1. Resultados y discusiones

En las figuras 6.2 y 6.3 se muestra la velocidad terminal v_c de las columnas y cristales de hielo como función de su longitud. Se muestran los resultados del LBM en comparación con resultados experimentales de laboratorio presentados por Kajikawa [137], Jayaweera and Ryan [146] y Bürgesser et al. [149]. En la figura 6.2, resultados del LBM y experimentales son presentados para relaciones de aspecto entre 1 y 2; mientras que en la figura 6.3 se muestran resultados comparativos para relaciones de aspecto entre 2 y 3. En la sección 6.4 se incluyen tablas con los resultados obtenidos del LBM.

Para cada configuración geométrica (l y a_r) de la columna hexagonal se obtuvieron resultados con dos orientaciones preferenciales, horizontal y vertical ($(\phi, \theta, \psi) = (0, 0, 0)$ y $(0, \frac{\pi}{2}, 0)$ respectivamente). Se eligen estas orientaciones ya que brindan un límite inferior y superior en la velocidad terminal. Esta estrategia de simulación es particularmente válida en problemas que no muestran una orientación preferencial de sedimentación. Esta estrategia permite reducir el costo computacional en comparación con la de realizar evaluaciones para una gran cantidad de orientaciones. Otra estrategia, de costo computacional considerable y que se probó inicialmente en este trabajo, es modelar la dinámica completa para tiempos suficientemente largos y diferentes orientaciones iniciales. Con ambas estrategias se puede obtener una aproximación al valor medio de la velocidad de sedimentación. En especial, la última brinda una historia de la dinámica del problema con la posibilidad de evaluar la existencia de orientaciones preferenciales o arbitrarias.

La densidad de masa del hielo ρ_{ice} utilizada se elige en el rango de valores presentado por Ryan et al. [129] para $T = -8^\circ\text{C}$. Es posible también, obtener una estimación para la masa de los cristales de las relaciones propuestas por Mitchell [142]. Heymsfield and Iaquinta [130] proponen $\rho_{ice} = 810 \text{ kg m}^{-3}$ para cristales de geometría tipo columna. En los resultados que se presentan se eligen dos valores definidos para la densidad del hielo, $\rho_{ice} = 800 \text{ kg m}^{-3}$ en la mayoría de los casos que se analizan, y $\rho_{ice} = 400 \text{ kg m}^{-3}$ en algunos casos particulares. El último valor de densidad (aproximadamente igual a la densidad de

masa de los cristales columna huecos) se utiliza para verificar la dependencia de una velocidad terminal normalizada con la densidad de masa.

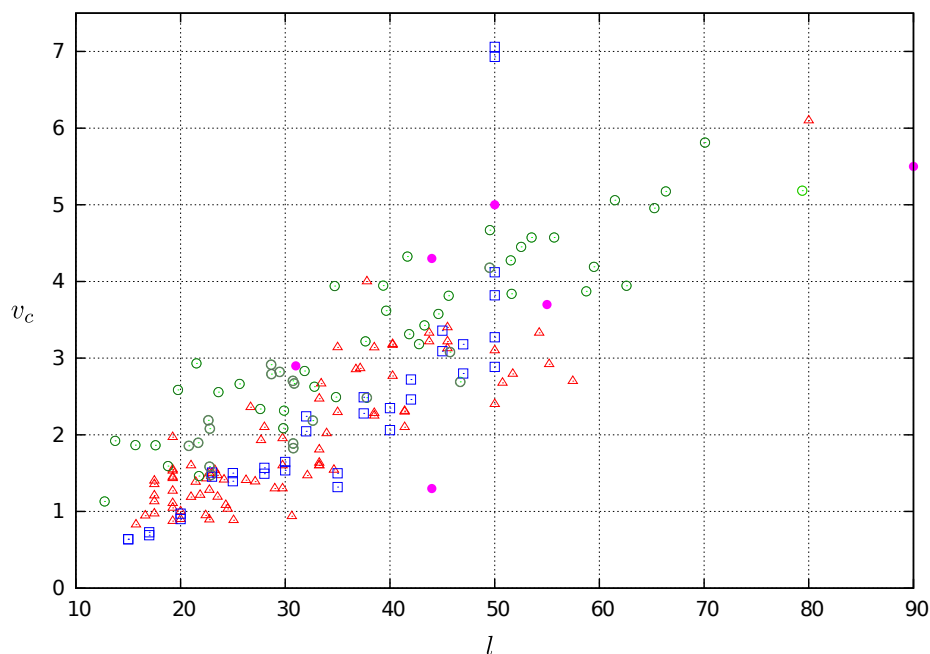


FIGURA 6.2: Velocidad terminal v_c de columnas hexagonales y cristales de hielo de geometría tipo columnas como una función de su longitud l . Los resultados corresponden a $a_r \in [1, 2]$. La velocidad está expresada en cm s^{-1} , la longitud en μm . Los resultados LBM con $\rho_{ice} = 800\text{kg m}^{-3}$ se muestran con \square . Los resultados experimentales se muestran con: \triangle para los datos de [149], con \circ para los datos de [137], y con \bullet para los datos de [146]. Los resultados numéricos del LBM son presentados en la sección 6.4.

Como se puede observar en las figuras 6.2 y 6.3, los resultados de v_c del LBM con $\rho_{ice} = 800\text{kg m}^{-3}$ están de acuerdo con las mediciones de laboratorio. Los resultados de Kajikawa [137], Jayaweera and Ryan [146], Bürgesser et al. [149] presentan cierta dispersión como es esperado de un conjunto de datos experimentales. Sin embargo, un factor importante en esta dispersión de v_c , se debe a la dispersión en la configuración geométrica de los cristales. Esto es, pueden existir diferentes valores de a_r para un l dado [158], originando la dispersión observada en v_c . Las combinaciones utilizadas de a_r y l , fueron seleccionadas dentro del rango de parámetros geométricos observados experimentalmente [149]. Para el rango de l y a_r analizados, todos los resultados numéricos, a excepción de dos valores particulares que merecen una aclaración, están contenidos dentro de la dispersión de datos experimentales. En la figura 6.2, dos resultados para $l = 50\mu\text{m}$ con $a_r = 1.0$ en sedimentación horizontal y vertical se encuentran por fuera de la dispersión. Estas diferencias no son un error de las simulaciones numéricas. Los resultados del LBM se corresponden con una configuración geométrica que no está contenida en los datos experimentales que se dispone. Cristales de hielo con esta configuración geométrica fueron observados en la naturaleza [158], pero no se observan en los datos experimentales presentados en la figura 6.2.

En los experimentos de laboratorio, la longitud medida l' de los cristales en sedimentación es una proyección en el plano vertical de su longitud real. Luego la longitud presentada puede ser una subestimación de su longitud real l (ver detalles de esta medición en [149]). Por este motivo, los datos experimentales en las figuras 6.2 y 6.3 pueden presentar un sesgo hacia la izquierda. Bürgesser et al. [149] presenta diferencias entre los valores medios de l y l' de: 25 % para $2a \in [5, 15]\mu\text{m}$, 17 % para $2a \in [15, 25]\mu\text{m}$, y 13 % para $2a \in [25, 35]\mu\text{m}$.

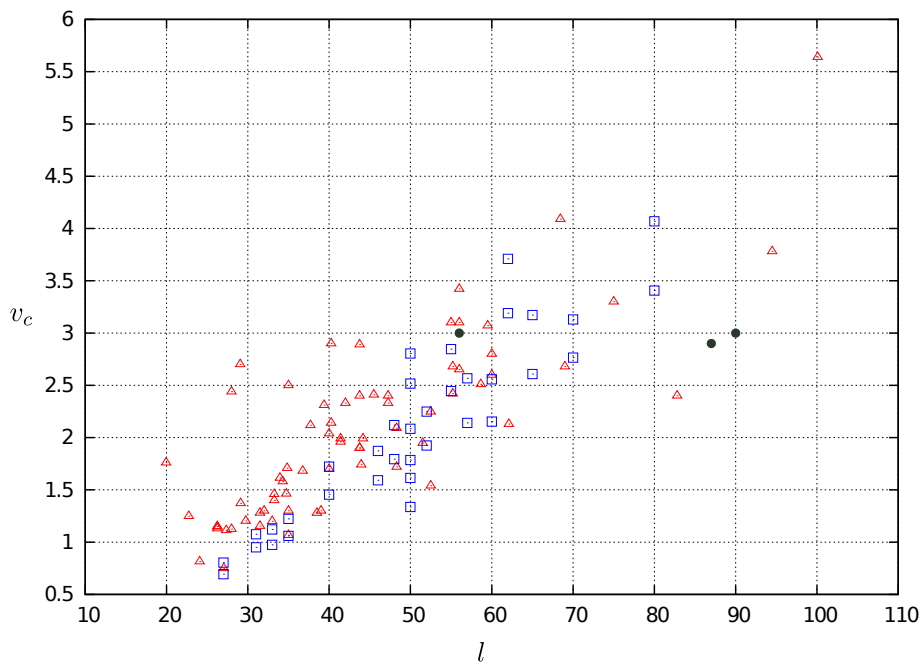


FIGURA 6.3: Velocidad terminal v_c de columnas hexagonales y cristales de hielo de geometría tipo columnas como una función de su longitud l . Los resultados corresponden a $a_r \in [2, 3]$. La velocidad está expresada en cm s^{-1} , la longitud en μm . Los resultados LBM con $\rho_{ice} = 800 \text{ kg m}^{-3}$ se muestran con \square . Los resultados experimentales se muestran con: Δ para los datos de [149], y con \bullet para los datos de [146]. Los resultados numéricos del LBM son presentados en la sección 6.4.

En la figura 6.4 se muestra v_c , obtenida del LBM en comparación con mediciones de laboratorio [149], como una función de la capacitancia C del cristal. Este parámetro depende de la geometría de la partícula, para una columna de sección hexagonal la capacitancia es [150]:

$$C = 0.58a (1 + 0.95a_r^{0.75}) \quad (6.1)$$

Los resultados numéricos están en el régimen de números de Reynolds que permiten comparar con las mediciones presentadas en [149], donde C es la longitud característica para evaluar el Re. Adoptando C como longitud característica para evaluar el Re, el rango para los resultados LBM es $0.002 < \text{Re} < 0.15$.

Se puede observar de la figura 6.4 que la dispersión de los resultados LBM se reduce cuando la capacitancia es utilizada como variable, lo mismo ocurre con los datos experimentales. Se puede notar que los resultados del LBM no están uniformemente distribuidos, tienen un sesgo hacia la parte inferior de la región que contiene los resultados experimentales. Este puede ser explicado por las diferencias entre l y l' , particularmente para pequeños valores de $2a$ donde existen los mayores errores en las mediciones. En la figura 6.4 los resultados del LBM para $l = 50 \mu\text{m}$ con $a_r = 1$ no se muestran, se ubican por fuera de la dispersión.

En la figura 6.5 se muestra la velocidad terminal normalizada v_n obtenida del LBM en comparación con resultados teóricos y experimentales conocidos. Los resultados son los mismos que se presentaron en las figuras anteriores, pero en este caso se muestran en una forma normalizada. En la figura 6.5 se incluye también los resultados LBM obtenidos para $\rho_{ice} = 400 \text{ kg m}^{-3}$. La velocidad normalizada se evalúa como propone Westbrook [138]. Para obtener v_n , la velocidad terminal del cristal v_c se divide por la velocidad de

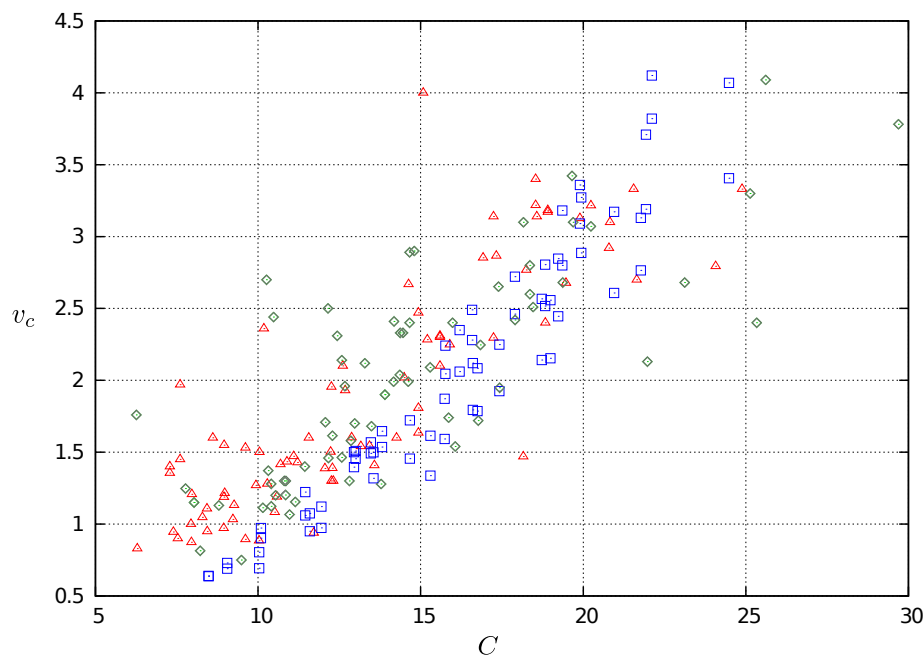


FIGURA 6.4: Velocidad terminal v_c de columnas hexagonales y cristales de hielo de geometría tipo columnas como una función de la capacitancia C . La velocidad está expresada en cm s^{-1} , y C en μm . Los resultados LBM con $\rho_{ice} = 800 \text{ kg m}^{-3}$ se muestran con \square . Los datos experimentales de [149] son presentados con: \triangle para las relaciones de aspecto entre 1 y 2, y con \diamond para relaciones de aspecto entre 2 y 3. Los resultados numéricos del LBM son presentados en la sección 6.4.

sedimentación v_T de una esfera equivalente, de radio r y masa m_s igual a la del cristal de hielo m_{ic} .

Westbrook [138], basado en resultados de [151], propone una expresión para v_c utilizando la solución de Stokes [5] para una esfera en flujo viscoso, (5.39). El radio r de la esfera es remplazado por un radio hidrodinámico efectivo, proporcional a la capacitancia C . La línea continua en la figura 6.5 es la propuesta de Westbrook [138] para v_n de columnas hexagonales con orientación aleatoria. La línea de trazo y punto en la figura 6.5, denotada como MHKC, corresponde a las propuestas de Khvorostyanov and Curry [136], Mitchell [142], Mitchell and Heymsfield [143], Khvorostyanov and Curry [144] para cristales columna con orientación aleatoria. MHKC es la nomenclatura típica en la literatura para referirse a estos métodos, idénticos cuando $\text{Re} < 100$ [139]. En la figura 6.5 se muestran también algunos resultados experimentales [137, 146, 148].

Los resultados LBM en la figura 6.5 son comparables con los de la propuesta teórica de Westbrook [138] para columnas hexagonales en orientación aleatoria, y se encuentran por debajo de la propuesta MHKC. Los resultados LBM adquieren un comportamiento esperado, para las orientaciones horizontal y vertical se ubican por debajo y por arriba de la propuesta de Westbrook [138]. La diferencia de v_n para cristales con orientación vertical y horizontal se incrementa con a_r . Se puede observar de la figura 6.5 que v_n es independiente de la masa para los problemas analizados. Como se menciona anteriormente, algunos de los datos presentados corresponden a densidad de masa diferentes. Además, se puede observar que la propuesta MHKC sobrestima v_n (v_c) para las longitudes analizadas.

En las figuras 6.6 y 6.7 se muestra, como usualmente se presenta en la literatura, la velocidad terminal para una columna hexagonal con $l = 50 \mu\text{m}$ en el rango $a_r \in [1, 3]$. Los resultados LBM de las figuras 6.6 y 6.7 fueron obtenidos con $\rho_{ice} = 800 \text{ kg m}^{-3}$ y

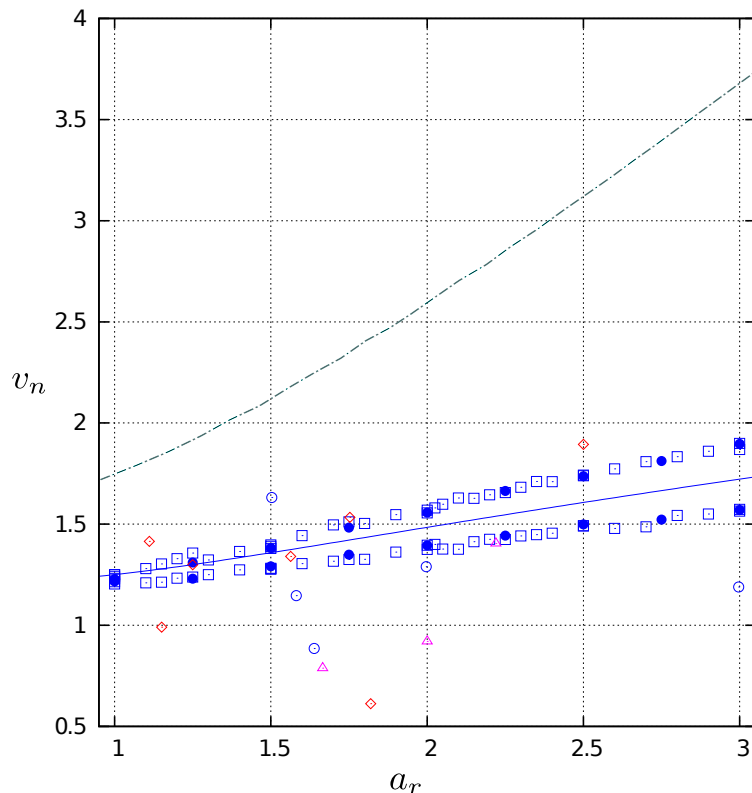


FIGURA 6.5: Velocidad terminal normalizada v_n de columnas hexagonales y cristales de hielo de geometría tipo columnas en función de la relación de aspecto a_r . Los resultados LBM se muestran con \square y \bullet para $\rho_{ice} = 800\text{kg m}^{-3}$ y $\rho_{ice} = 400\text{kg m}^{-3}$ respectivamente. Los resultados numéricos del LBM son presentados en la sección 6.4. La líneas continuas muestran la velocidad terminal normalizada propuesta en [138] para una orientación aleatoria de los cristales. Se utilizan \triangle para identificar los resultados experimentales de [148], \diamond para los de [146], y \circ para los de [137]. La línea en punto y trazos es la propuesta de MHKC [136, 142–144] (ver el texto).

$\rho_{ice} = 400\text{kg m}^{-3}$ respectivamente. Se reordenan convenientemente para enfatizar, con una longitud particular del cristal, la variación de la velocidad terminal como una función de la relación de aspecto. La longitud adoptada para el cuerpo rígido se elige sin ninguna razón particular.

Como se menciona en la sección 6.1, es posible obtener estimaciones de la velocidad terminal de las partículas de hielo, utilizando una relación entre el número de Reynolds (Re) y el Best (o Davis) number (X) [140, 142, 145, 146]. Es importante notar algunas diferencias entre la aproximación numérica de este trabajo y la aproximación Best-Reynolds frecuentemente utilizada en la literatura para estimar velocidad terminal de cristales de hielo. Existe una diferencia conceptual entre las dos aproximaciones. Por un lado, la aproximación Best-Reynolds puede ser un buen método práctico que depende de curvas de ajuste experimental o aproximaciones analíticas. Son necesarias estimaciones para la masa y área de referencia de las partículas, y en el caso de utilizar estimaciones analíticas, de una aproximación al coeficiente de resistencia C_D . Por otro lado, el método propuesto en este trabajo es una aproximación de las ecuaciones diferenciales fundamentales que describen el movimiento del cuerpo rígido y el flujo de fluido. No es necesario realizar estimación del coeficiente de resistencia, este se puede obtener como un resultado secundario de la evaluación de fuerzas sobre el cuerpo. La masa es un parámetro de entrada a través de estimaciones de la densidad de masa del cuerpo rígido. El área es exacta, definida por la

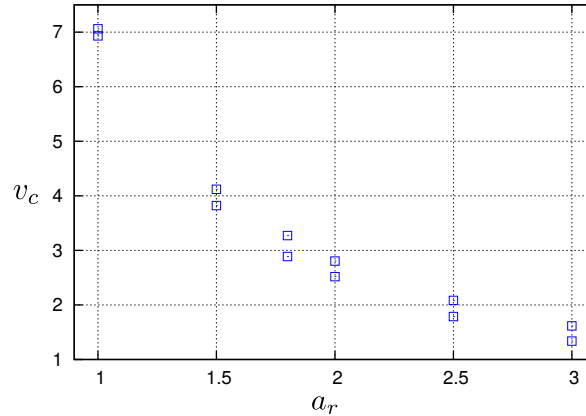


FIGURA 6.6: Velocidad terminal v_c para columnas de sección hexagonal como una función de la relación de aspecto a_r . Los resultados LBM corresponden a $l = 50\mu\text{m}$ con $\rho_{ice} = 800\text{kg m}^{-3}$. La velocidad es expresada en cm s^{-1} .

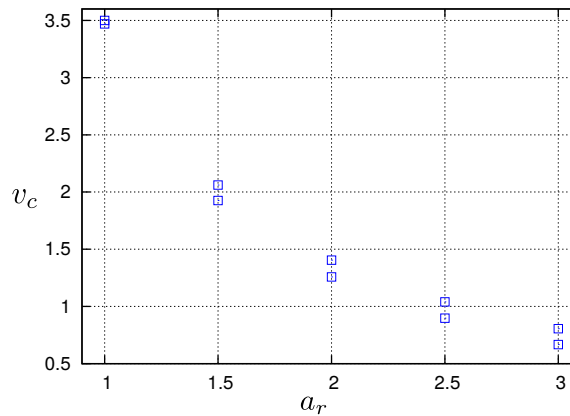


FIGURA 6.7: Velocidad terminal v_c para columnas de sección hexagonal como una función de la relación de aspecto a_r . Los resultados LBM corresponden a $l = 50\mu\text{m}$ con $\rho_{ice} = 400\text{kg m}^{-3}$. La velocidad es expresada en cm s^{-1} .

geometría del cuerpo rígido, no son necesaria estimaciones.

Se considera necesario hacer algunas aclaraciones adicionales respecto a la orientación de las partículas. En este capítulo se analiza un cuerpo rígido con orientación vertical y horizontal para obtener un límite superior e inferior en el espectro de velocidades terminales esperadas para el cuerpo rígido con orientaciones arbitrarias. Esta estrategia tiene sentido siempre que el cuerpo rígido no tenga una orientación preferencial. Que un cuerpo rígido tenga orientación preferencial en sedimentación depende fuertemente de la geometría y del número de Reynolds del problema. Para la geometría tipo columna, de interés en este capítulo, no es claro en la literatura cual es el límite o rango de números de Reynolds para el cual existe una orientación preferencial. Se pueden encontrar ciertas discrepancias entre los autores. Katz [159], basado en predicciones teóricas y observaciones experimentales, afirma que los cuerpos rígidos con geometría tipo aguja (columna con $a_r \gg 1$) tienen una orientación indeterminada cuando $\text{Re} \rightarrow 0$. Sin embargo, para un Re pequeño y finito (no especificado) existe un torque que alinea el cuerpo rígido con su eje longitudinal en posición horizontal. Basado en ensayos experimentales de cilindros en sedimentación, Jayaweera et al. [160] observan que a números de Reynolds muy bajos $\text{Re} < 0.01$, los cilindros no muestran una orientación preferencial; los cilindros tienden a caer con las misma orientación en la que fueron liberados. Mientras que para $0.01 < \text{Re} < 0.1$ los cilindros se orientan

para ofrecer máxima resistencia; si $2a/L < 1$ la orientación es con su eje longitudinal en posición horizontal. En este rango observan que existe un movimiento oscilatorio previo a alcanzar un estado estacionario. Bohm [161] afirma que en régimen viscoso ($Re \ll 1$) la orientación de cuerpos ortotrópicos (cuerpos con al menos tres ejes perpendiculares de simetría) en sedimentación, es estable y no tienen una específica. Hashino et al. [154] obtienen resultados numéricos de la sedimentación de cristales de hielo tipo columnas hexagonales, muestran algunas regiones de inestabilidad en la orientación del cuerpo rígido para $Re > 1$. Burgüesser et al. [149] observan experimentalmente un comportamiento con orientaciones arbitrarias para la sedimentación de cristales tipo columnas en un rango de Re similar a las simulaciones realizadas en este trabajo.

Considerando los comentarios anteriores, y con motivo de reducir el costo computacional, es que se decide evaluar dos orientaciones, vertical y horizontal con el propósito de estudiar los casos límites en el problema de sedimentación. En el caso que exista una orientación preferencial, es esperable que esta sea horizontal para la geometría tipo columna analizada.

6.2.2. Detalles de la implementación

El dominio computacional, una porción acotada del dominio fluido, está representado por un paralelepípedo de fluido con fronteras regulares. El problema de fluido se analiza utilizando el LBM-MRT presentado en el Capítulo 2 con un esquema de velocidad D3Q15 (ver Apéndice C). La configuración del modelo, parámetros de relajación, expresiones de equilibrio y otros parámetros se pueden encontrar en el Apéndice C.2 [37]. Como se analiza en el Capítulo 3 las fronteras del problema requieren un tratamiento especial para imponer las condiciones de borde. El cuerpo rígido, que se mueve en el interior del dominio computacional, está descrito por su geometría arbitraria según se requiere. En las fronteras del cuerpo rígido se imponen condiciones de borde Dirichlet de velocidad, se utiliza el método BFL [53] de la sección 3.3.3. La evaluación de fuerza y torque se realiza con el método presentado en el Capítulo 4 para cuerpos en movimiento. El movimiento del cuerpo rígido está determinado resolviendo las ecuaciones de movimiento de Newton. Las fuerzas que actúan sobre el cuerpo están dadas por las fuerzas del flujo de fluido, el propio peso del cuerpo y las fuerzas de flotación. Para integrar las ecuaciones de movimiento en el tiempo, se utiliza un esquema numérico Forward Euler, de primer orden de precisión temporal como el LBM utilizado.

La dinámica del fluido es evaluada en un marco de referencia que se desplaza hacia abajo a una velocidad constante con respecto a un marco de referencia de laboratorio. La velocidad del referencial se establece igual a una aproximación de la velocidad terminal esperada de las partículas con respecto a la tierra.

En la figura 6.8a se muestra un esquema del dominio computacional. En la zona central del dominio se posiciona una región de refinamiento de longitud h . Se utiliza el método de refinamiento de grilla MD introducido en el Capítulo 5. La región de refinamiento contiene un arreglo de grillas de diferente δx . El cuerpo rígido permanece, para todo tiempo, completamente dentro de la región de menor espaciamiento de grilla. En la figura 6.8b se muestra un esquema de la configuración de grillas. Se muestran tres zonas características del dominio computacional: zona inferior, media (donde se encuentra la región de refinamiento) y superior. Se puede observar que por arriba y debajo de la grilla más fina se posicionan bloques de grillas. Este arreglo se repite a ambos lados de la grilla más fina, disminuyendo sucesivamente el tamaño de grilla hasta alcanzar la grilla más gruesa del problema. Se utilizan seis niveles de refinamiento a lo largo del eje longitudinal como se

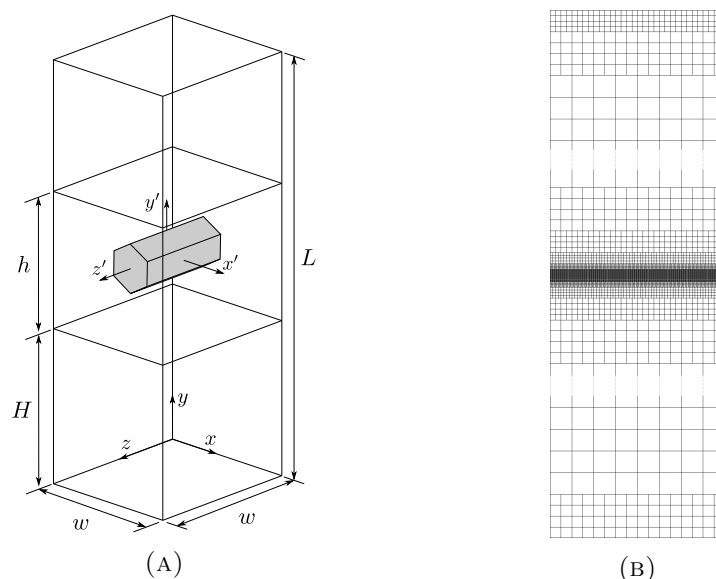


FIGURA 6.8: Esquema del dominio computacional utilizado para resolver los problemas de sedimentación de este capítulo. Figura A: esquema con los detalles globales de la región de refinamiento y posicionamiento del cuerpo rígido. Figura B: esquema de la distribución de grillas utilizada; se muestra tres regiones del dominio computacional, zona inferior, media (donde se encuentra la región de refinamiento) y superior.

muestra en la figura 6.8b. Las grillas en los extremos del dominio computacional, como se puede apreciar en el esquema de la figura 6.8b, se utilizan por problemas de estabilidad numérica y precisión en los métodos de condiciones de borde. En especial se encuentran problemas de precisión, si la grilla no es lo suficientemente fina, en la evaluación del esquema numérico en diferencias necesario para imponer las condiciones de borde convectivas de la sección 3.5.

Como se menciona brevemente en el Capítulo 5, existen al menos dos razones principales para analizar el problema en un marco de referencia a velocidad constante. Por un lado, es posible mantener el cuerpo rígido en una posición aproximadamente constante relativa al dominio computacional. Esto reduce el costo computacional en el movimiento de grillas, es posible mantener la región de refinamiento aproximadamente fija en el tiempo. Por otro lado, el marco de referencia con velocidad permite reducir la longitud del dominio computacional ya que no se debe considerar una longitud adicional para contener grandes desplazamientos del cuerpo rígido. Para mantener el cuerpo rígido siempre contenido en la grilla más fina, se utiliza el método de desplazamiento de grillas descrito en la sección 5.3.

Como condiciones iniciales, se asigna al fluido en todo el dominio una velocidad homogénea u_0 en la dirección positiva del eje y ; luego el fluido está en reposo en un marco de referencia de laboratorio. El cuerpo rígido que se analiza se libera en su posición inicial a $t = 0$ s con velocidad u_0 igual a la inicial del fluido. Se adopta esta configuración ya que, liberar el cuerpo rígido con otra velocidad inicial diferente a la del fluido, introduciría una discontinuidad en la distribución de velocidad en la vecindad del cuerpo. Esto genera perturbaciones no físicas que se desplazan por el dominio computacional, retrasando la convergencia a un estado estacionario. Para $t > 0$ existe un período transitorio para la dinámica del fluido y el movimiento del cuerpo, el cual no es de nuestro interés. Luego de un período de tiempo t_s el problema alcanza un régimen estacionario. Si la velocidad u_0 fue elegida correctamente, el cuerpo permanecerá aproximadamente en una posición

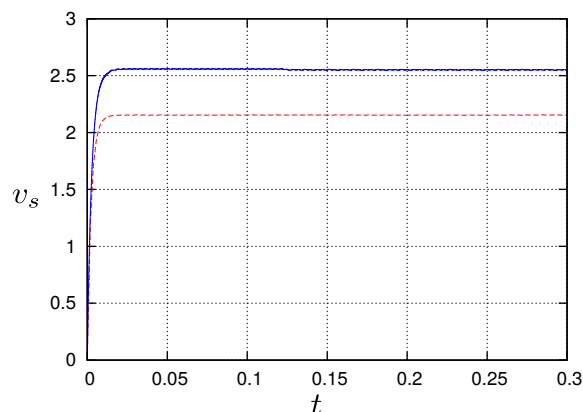


FIGURA 6.9: Evolución de la velocidad de descenso para una columna hexagonal de $l = 60\mu\text{m}$ y $a_r = 2.8$. Las curvas muestran la velocidad de descenso para las columnas en sedimentación horizontal (línea de trazos) y vertical (línea continua). La velocidad es expresada en cm s^{-1} y el tiempo en s.

estática en régimen estacionario. En la figura 6.9 se muestra la evolución de la velocidad de descenso para una columna hexagonal en sedimentación vertical y horizontal. El resultado corresponde a una columna con $l = 60\mu\text{m}$ y $a_r = 2.8$. Se puede observar que los resultados numéricos tienen pequeñas perturbaciones. Por este motivo, la velocidad terminal se obtiene como una velocidad media en aproximadamente los últimos 0.1s del tiempo de simulación. Se realizaron evaluaciones numéricas para tiempos más extensos que los presentados en la figura 6.9, no encontrando diferencias apreciables en la velocidad terminal obtenida.

Como el dominio computacional es una pequeña porción de un dominio fluido cuasi-infinito, se debe adoptar una configuración, dimensiones y condiciones de borde sobre el dominio computacional que minimicen la influencia de las fronteras en la dinámica del cuerpo rígido que se analiza. Las condiciones de borde impuestas sobre el dominio computacional son, condición de deslizamiento (sección 3.2.2) en las fronteras verticales, velocidad constantes u_0 en la fronteras horizontal inferior (sección 3.2.3), y condiciones de borde convectivas (sección 3.5) en la fronteras horizontal superior.

El cuerpo rígido se posiciona inicialmente en el centro de la sección transversal a aproximadamente $7w$ desde la fronteras horizontal inferior. w es la longitud de los lados de la sección transversal del dominio computacional (ver figura 6.8a). La presencia de las fronteras de deslizamiento puede tener una influencia menor, pero no despreciable en la velocidad de sedimentación que se obtiene numéricamente. Para relaciones de bloqueo, definidas como \tilde{l}/w , más grandes que un cierto valor, no son necesarias correcciones adicionales sobre los resultados numéricos. Se observa que para relaciones de bloqueo menores que 5.5%, la influencia de las paredes es despreciable. Este máximo aceptable de relación de bloqueo es obtenido evaluando el efecto de interferencia en la sedimentación de una esfera. Estos efectos de interferencia son cuantificados por la relación entre la v_c obtenida del LBM y v_T obtenida por estimaciones analíticas en un dominio no restringido. Se obtiene convergencia en los resultados y diferencias menores al 0.5% entre v_c y v_T para $\tilde{l}/w \leq 0.055$. Se utilizan dominios computacionales que satisfagan la relación $\frac{L}{w} \geq 12$. Esta razón mínima se encuentra siguiendo el mismo procedimiento descrito anteriormente para determinar el \tilde{l}/w máximo aceptable.

Los resultados presentados fueron obtenidos con relaciones de bloqueo menores al 5.5%.

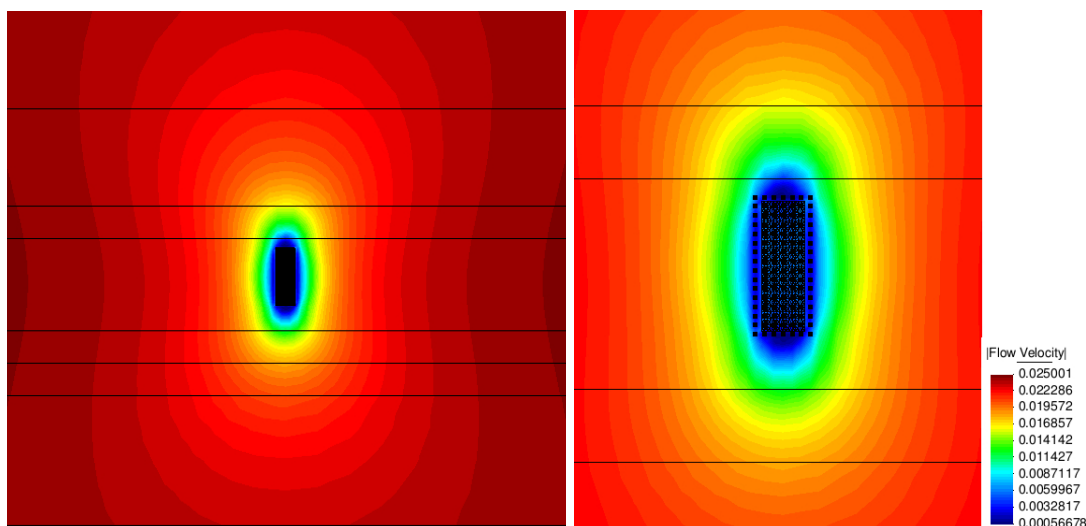


FIGURA 6.10: Distribución de velocidad en una sección del dominio computacional en el problema de sedimentación vertical de una columna hexagonal con $l = 57 \mu\text{m}$ y $a_r = 2.6$ a $t = 0.1 \text{ s}$. Ambas figuras corresponden al mismo problema, la figura de la derecha es un detalle ampliado de la figura de la izquierda. Las líneas horizontales indican el límite de las grillas para diferentes niveles de refinamiento. En la figura de la derecha se pueden apreciar los nodos de borde del problema y con menor definición la geometría del problema.

Esta configuración permite obtener v_n por evaluación numérica de v_c y con v_T obtenida de la ecuación de Stokes, (5.39).

En la figura 6.10 se muestra un detalle de la distribución de velocidad en una sección del dominio computacional para el problema de sedimentación vertical de una columna hexagonal. Los resultados corresponden a una columna hexagonal con $l = 57 \mu\text{m}$ y $a_r = 2.6$ para $t = 0.1 \text{ s}$. En la figura se pueden apreciar los nodos de borde utilizados en el problema, y con menor definición, la geometría discretizada en elementos triangulares de superficie.

6.3. Verificación de convergencia de grilla

Con el objetivo de no incrementar el costo computacional más de lo necesario para los propósitos de este trabajo, se analiza la influencia del espaciamiento de grilla δx en los resultados numéricos del LBM. Como un ejemplo típico, se analiza el caso de un cilindro en sedimentación horizontal con $a_r = 2$, $l = 50 \mu\text{m}$ y $\rho_{ice} = 650 \text{ kg m}^{-3}$. Se quiere determinar un valor aceptable de $2a/\delta x$, tal que no existan cambios sustanciales en los resultados si este parámetro es incrementado. La cantidad $2a/\delta x$ define el número de nodos en el diámetro de un cilindro de radio a . En la figura 6.11 se muestra la velocidad de sedimentación obtenida para diferentes discretizaciones. Para todas las evaluaciones numéricas realizadas en este trabajo, se consideran aceptables discretizaciones en el rango $5.5 < \frac{2a}{\delta x} < 6.1$.

Se elige un cilindro para este ensayo de verificación ya que existen resultados experimentales conocidos, y la geometría es similar a la de las columnas de sección hexagonal. Resultados experimentales para la velocidad de sedimentación normalizada v_n pueden ser encontrados en [138], $v_{c_h} \simeq 2.3 \text{ cm s}^{-1}$ ($v_n \approx 1.3$), para sedimentación horizontal, y $v_{c_v} \simeq 2.65 \text{ cm s}^{-1}$ ($v_n \approx 1.5$) para sedimentación vertical. Del LBM y con $\frac{2a}{\delta x} \approx 5.5$ se obtiene $v_{c_h} = 2.31 \text{ cm s}^{-1}$ y $v_{c_v} = 2.64 \text{ cm s}^{-1}$.

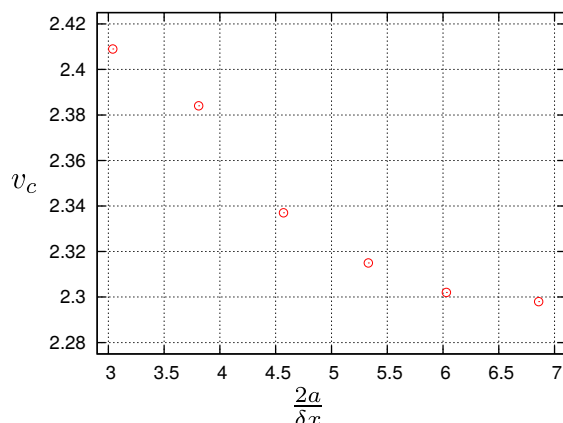


FIGURA 6.11: Velocidad terminal v_c como función de nodos por diámetro del cilindro. Los resultados corresponden al problema de sedimentación horizontal de un cilindro con $a_r = 2$ y $l = 50 \mu\text{m}$.

Si bien la discretización de la geometría es gruesa, de los resultados se puede apreciar que es aceptable para evaluar la velocidad terminal en los casos particulares que se analizan. Esta afirmación no se puede generalizar a otros problemas similares. Para reducir el costo computacional, siempre es necesario determinar un número mínimo de nodos en la discretización de la geometría. Como alternativa para reducir significativamente el costo computacional, es posible adoptar una distribución optimizada de las grillas de refinamiento alrededor del cuerpo.

6.4. Resultados obtenidos del LBM

Se presenta un detalle de los resultados mostrados en la sección 6.2.1. Las tablas 6.1 y 6.2 contienen los resultados para $a_r \in [1, 2]$ y $a_r \in (2, 3]$ respectivamente. Los valores elegidos de l y a_r están en el rango de datos medidos en [149].

Los resultados identificados como Test 1 y 20-24 en la tabla 6.1 fueron obtenidos con $\rho_{ice} = 650 \text{kg m}^{-3}$ y $\rho_{ice} = 400 \text{kg m}^{-3}$ respectivamente. Los resultados identificados como Test 20, 21, y 22 se muestran exclusivamente en las figuras 6.7 y 6.5. Los resultados del Test 1, 23, y 24 son mostrados solamente en la figura 6.5, donde es esperable que los resultados sean independiente de la masa.

Los resultados identificados como Test 18-21 en la tabla 6.2 fueron obtenidos con $\rho_{ice} = 400 \text{kg m}^{-3}$. Los resultados identificados como Test 18 y 19 se muestran exclusivamente en las figuras 6.7 y 6.5. Los resultados en Test 20 y 21 son mostrados únicamente en la figura 6.5.

6.5. Conclusiones y comentarios

Se utiliza el método de lattice Boltzmann para determinar la dinámica de cristales de hielo en la atmósfera. Dada una caracterización de la forma, tamaño y densidad de masa de los cristales, junto con las condiciones atmosféricas, es posible determinar su comportamiento dinámico. El método numérico utilizado brinda buenos resultados de la velocidad de sedimentación para las geometrías, tamaños y rango de números de Reynolds analizados.

Test	a_r	l	v_{c_v}	v_{c_h}	v_T	C
1	2	50	2.30	2.02	1.465	18.83
2	1.5	37.5	2.49	2.28	1.782	16.58
3	1.2	20	0.97	0.90	0.731	10.09
4	1.75	40	2.35	2.06	1.555	16.2
5	1.0	23	1.51	1.45	1.207	13.0
6	1.1	17	0.73	0.69	0.570	9.05
7	1.9	35	1.49	1.32	0.968	13.55
8	1.4	30	1.64	1.53	1.205	13.81
9	1.8	50	3.27	2.88	2.176	19.94
10	1.7	47	3.18	2.80	2.125	19.357
11	1.15	25	1.50	1.39	1.150	12.95
12	1.25	32	2.24	2.04	1.651	15.76
13	1.6	42	2.72	2.46	1.885	17.9
14	1.0	15	0.642	0.637	0.513	8.48
15	1.3	28	1.57	1.49	1.186	13.47
16	1.5	45	3.36	3.09	2.416	19.90
17	1.0	50	7.06	6.93	5.704	28.27
18	1.5	50	4.12	3.82	2.983	22.11
19	2.0	50	2.52	2.81	1.803	18.83
20	1.0	50	3.5	3.47	2.85	28.27
21	1.5	50	2.06	1.92	1.491	22.11
22	2.0	50	1.40	1.26	0.902	18.83
23	1.25	30	0.954	0.893	0.725	14.77
24	1.75	30	0.610	0.555	0.411	12.15

TABLA 6.1: Resultados del LBM para $a_r \in [1, 2]$. l y C están expresados en μm , la velocidad en cm s^{-1} . v_{c_v} y v_{c_h} son la velocidad terminal para las columnas en sedimentación vertical y horizontal respectivamente. Todos los resultados son obtenidos con $\rho_{ice} = 800\text{kg m}^{-3}$, excepto los identificados como Test 1 y 20-24, donde se utiliza $\rho_{ice} = 650\text{kg m}^{-3}$ y $\rho_{ice} = 400\text{kg m}^{-3}$ respectivamente.

Para los cristales con geometría de columnas hexagonales, los resultados obtenidos del LBM están completamente dentro de la región de dispersión de las mediciones de laboratorio para rangos de l y a_r similares. Cuando la capacitancia (ecu. 6.1, [150]) es utilizada como una variable, la dispersión de los resultados LBM así como la de los resultados experimentales disminuye notablemente. En este caso puede ser observado un pequeño sesgo de los resultados LBM hacia la parte inferior de la dispersión de los datos experimentales. Este problema puede tener origen en las diferencias encontradas entre la longitud medida y la real de los cristales.

No es el objetivo de este trabajo obtener una curva de ajuste para la velocidad terminal, sino que por el contrario, realizar una comparación directa del LBM con los resultados experimentales y teóricos conocidos. Para obtener una curva de ajuste, es necesario disponer de una mayor cantidad de resultados numéricos del LBM.

Por comparación directa, se puede observar que los resultados del LBM en la figura 6.5 son comparables con los de la propuesta teórica de Westbrook [138], y están por debajo de la propuesta MHKC. Los resultados del LBM adquieren un comportamiento esperado, para las orientaciones horizontal y vertical se ubican por debajo y por arriba de la propuesta de Westbrook [138], válida para columnas hexagonales en orientación

<i>Test</i>	a_r	l	v_{c_h}	v_{c_v}	v_T	C
1	2.05	27	0.69	0.80	0.503	10.036
2	2.1	40	1.45	1.72	1.057	14.67
3	2.2	35	1.06	1.22	0.743	11.45
4	2.5	52	1.92	2.25	1.29	17.42
5	2.8	60	2.15	2.56	1.395	18.99
6	2.3	55	2.44	2.83	1.692	19.23
7	2.025	31	0.95	1.07	0.678	11.59
8	2.15	33	0.97	1.12	0.689	11.95
9	2.35	48	1.79	2.12	1.238	16.604
10	2.6	57	2.14	2.57	1.447	18.724
11	2.4	46	1.59	1.87	1.094	15.74
12	2.7	65	2.61	3.17	1.753	20.95
13	3.0	80	3.41	4.07	2.176	24.48
14	2.25	62	3.19	3.71	2.239	21.93
15	2.9	70	2.76	3.31	1.777	21.77
16	2.5	50	1.78	2.08	1.198	16.75
17	3.0	50	1.34	1.61	0.850	15.3
18	3.0	50	0.667	0.806	0.425	15.3
19	2.5	50	0.898	1.04	0.599	16.75
20	2.25	30	0.378	0.436	0.262	10.61
21	2.75	30	0.275	0.328	0.180	9.58

TABLA 6.2: Resultados del LBM para $a_r \in (2, 3]$. l y C están expresados en μm , la velocidad en cm s^{-1} . v_{c_v} y v_{c_h} son la velocidad terminal para las columnas en sedimentación vertical y horizontal respectivamente. Todos los resultados son obtenidos con $\rho_{ice} = 800\text{kg m}^{-3}$, excepto los identificados como Test 18-21 donde se utiliza $\rho_{ice} = 400\text{kg m}^{-3}$.

aleatoria. La diferencia entre la velocidad terminal para cristales con orientación vertical y horizontal se incrementa con a_r . Se puede apreciar de la figura 6.5, que la propuesta de MHKC sobrestima la velocidad terminal de los cristales de hielo para las configuraciones geométricas analizadas.

El método propuesto en este trabajo es una aproximación de las ecuaciones diferenciales fundamentales que describen el flujo de fluido y el movimiento del cuerpo rígido. No es necesario realizar estimación del coeficiente de resistencia, este se puede obtener como un resultado secundario de la evaluación de fuerzas sobre el cuerpo. Utilizando el LBM es posible modelar la geometría real de los cristales, no son necesarias aproximaciones como las propuestas por Böhm [140] y Mitchell [142], utilizadas ampliamente en la literatura.

Como un mensaje final de este capítulo, se quiere enfatizar que una gran cantidad de problemas de interés en física de la atmósfera pueden ser analizados utilizando el LBM. Con respecto a las partículas de hielo en sedimentación, es posible estudiar diferentes geometrías y una variedad de valores de los parámetros que caracterizan el problema. Es posible obtener una caracterización estadística de problemas donde los experimentos de laboratorio son complejos de realizar. También se puede utilizar el LBM para verificar otros modelos simplificados propuestos, la sensibilidad de los parámetros involucrados, entre otros.

Capítulo 7

Determinación del campo de velocidad inestacionario en un problema de flujo interno

En este capítulo¹ se analiza, utilizando el método de lattice Boltzmann (LBM) y un método de resonancia magnética nuclear (RMN) [3], el campo de velocidad inestacionario de un fluido contenido por una cavidad con fronteras en movimiento prescrito. Se tiene especial interés en conocer el campo de velocidad del fluido en una variedad de problemas. El método de RMN permite conocer, mediante técnicas de medición no invasivas, una aproximación del campo de velocidad en un fluido. La RMN es utilizada para determinar el campo de velocidad de un fluido en problemas estacionarios [162, 163]. Serial et al. [3] proponen un método que tiene como objetivo evaluar la distribución inestacionaria de la velocidad en un fluido.

No es la intención de este capítulo discutir el método de RMN utilizado para evaluar el campo de velocidad en el problema de interés (ver [3]). El objetivo es presentar el problema de fluido, los detalles de la implementación numérica junto con los resultados obtenidos del LBM y su comparación con resultados conocidos y los experimentales de RMN. Se tiene interés en determinar numéricamente el campo de velocidad transitorio para dos fluidos diferentes, agua y 2-propanol (alcohol isopropílico), contenidos en una cavidad con movimiento prescrito.

Los resultados numéricos hallados mediante el LBM tienen el propósito de servir como solución de referencia para verificar el método experimental de RMN. Además estas simulaciones brindan un detalle de los tiempos característicos del problema para las configuraciones analizadas. La comparación cuantitativa no es de utilidad para evaluar la precisión del LBM, en especial por el error de aproximación y la dispersión encontrada en los datos experimentales.

En las secciones siguientes se presenta el problema de interés principal y los resultados encontrados para una serie de problemas de verificación utilizados para comprobar el algoritmo implementado. Se comprueban los resultados del LBM con soluciones conocidas, válidas en casos particulares del problema de interés. Luego se muestran comparaciones de resultados numéricos y experimentales de RMN.

¹El contenido de éste capítulo surge de una colaboración con la Lic. Raquel Serial y el Dr. Rodolfo Acosta, del grupo de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de la Facultad de Matemática, Astronomía y Física (FaMAF) de la Universidad Nacional de Córdoba (UNC).

7.1. Descripción del problema

En la figura 7.1 se muestra un esquema de la geometría del problema principal de interés. A izquierda se muestra una vista en perspectiva de la geometría junto con un

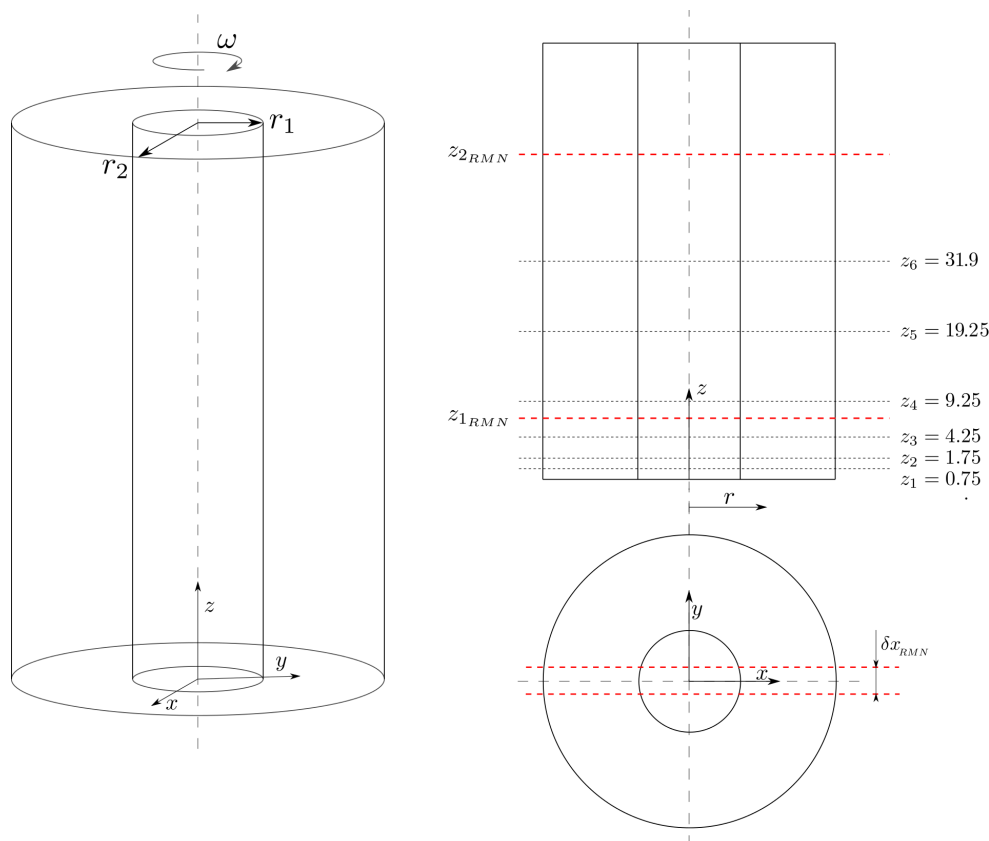


FIGURA 7.1: Diagrama esquemático de la geometría del problema que se analiza. A izq.: vista en perspectiva de la geometría. A der.: detalle de una serie de secciones de interés de la geometría analizada. Dimensiones expresadas en mm.

detalle de la posición del sistema de ejes coordenados y definición de algunos parámetros geométricos. El fluido está contenido en la región entre dos cilindros concéntricos de radio $r_1 = 1.5$ mm y $r_2 = 7.9$ mm ($r_1 < r < r_2$), y longitud $L = 63.8$ mm. Ambos extremos están cerrados con dos tapas anulares en $z = 0$ y $z = L$ ($0 < z < L$). A derecha en la figura 7.1 se identifican de manera esquemática una serie de secciones transversales (z_1, \dots, z_6).

Como se indica en la figura 7.1, sobre la geometría se impone una velocidad angular $\omega(t)$ respecto del eje z , luego la velocidad sobre las fronteras está determinada para todo tiempo. Utilizando el LBM y RMN, se determina el campo de velocidad del fluido para algún $\omega(t)$ impuesto. La velocidad angular $\omega(t)$, las dimensiones de la cavidad y el fluido utilizado determinan completamente el campo de velocidad. Para los casos analizados se verifica una distribución axisimétrica de la velocidad del fluido, es decir $\mathbf{u}(r, \theta, z) = \mathbf{u}(r, z)$; con r, θ, z un sistema de coordenadas cilíndricas.

El método de RMN que propone Serial et al. [3] tiene la particularidad de poder obtener el campo de velocidad del fluido en intervalos de tiempo $\delta t_{RMN} \approx 80 - 90 \times 10^{-3}$ s. Las mediciones son una media espacial y temporal del campo de velocidad en una sección del dominio fluido cada intervalos δt_{RMN} . En la figura 7.1 se denota con z_{1RMN} , z_{2RMN} , y δx_{RMN} al límite inferior, superior, y espesor respectivamente de la sección del dominio

fluido donde se realizan las mediciones experimentales (sección de análisis). Sobre esta sección, se obtiene una distribución en la dirección x de la componente y de la velocidad, u_y . En 7.3 se dan detalles adicionales del método experimental.

La estrategia para verificar la precisión del método de RMN propuesto [3], es evaluar un campo de velocidad inestacionario en un fluido conocido y compararlo con resultados numéricos. Con el objetivo de generar y medir un campo de velocidad inestacionario en el fluido, mediante la elección apropiada de $\omega(t)$ se impone una velocidad sobre las fronteras de la cavidad que contienen el fluido (figura 7.1). Se aplican aceleraciones controladas que generan una distribución de velocidad inestacionaria. En el ensayo experimental se utilizan dos configuraciones de $\omega(t)$:

Configuración 1:

- De $t = 0$ s a $t = 0.8$ s se impone aceleración angular constante hasta alcanzar $\omega = 2$ rps.
- De $t = 0.8$ s a $t_0 = 5.0$ s se mantiene velocidad angular constante: $\omega = 2$ rps.
- De $t_0 = 5.0$ s a t_1 se impone aceleración angular constante $\dot{\omega} = -3.3 \frac{\text{rps}}{\text{s}}$ hasta alcanzar $\omega = 0$ rps.
- Fluido: agua.

Configuración 2:

- De $t = 0$ s a $t = 0.8$ s se impone aceleración angular constante hasta alcanzar $\omega = 2$ rps.
- De $t = 0.8$ s a $t_0 = 30.0$ s se mantiene velocidad angular constante²: $\omega = 2$ rps.
- De $t_0 = 30.0$ s a t_1 se impone aceleración angular constante $\dot{\omega} = -3.3 \frac{\text{rps}}{\text{s}}$ hasta alcanzar $\omega = 0$ rps.
- Fluido: 2-propanol (alcohol isopropílico).

Para la configuración geométrica que se analiza, y debido a la viscosidad del fluido, si $\omega(t) = \bar{\omega} \forall t \geq \hat{t} = 0.8$ existe $t > \hat{t}$ tal que la distribución de velocidad en el fluido alcanza un estado estacionario. Luego no existen variaciones temporales en el campo de velocidad del fluido. A tiempo $t = t_0$ se aplica una aceleración constante hasta detener la rotación ($\omega = 0$ rps) en $t = t_1$. La aceleración inicial y la desaceleración posterior, producen la distribución de velocidad inestacionaria de interés.

7.2. Problemas de verificación

Antes de comparar los resultados numéricos del LBM con los experimentales de RMN, se analizan una serie de problemas de verificación con el objetivo de comprobar el funcionamiento correcto del algoritmo implementado. Los problemas de verificación se eligen tal que representen soluciones simplificadas del problema de interés; o geometrías y configuración donde se conocen soluciones en algún límite o región particular.

²En las simulaciones numéricas se utiliza un tiempo inferior, $t_0 \approx 7$ s, donde se alcanza un estado estacionario buscado.

En la sección 7.2.2 se verifica la convergencia de la solución numérica al resultado analítico estacionario, una distribución lineal de $u_\theta(r)$. El fluido de análisis es agua, y $\omega(t)$ es igual al ítem 1 de las configuraciones 1 y 2, luego $\omega(t) = 2$ rps constante hasta finalizar la evaluación numérica para $t = 12$ s. En la sección 7.2.3 se comprueban algunas soluciones particulares del LBM con resultados de un problema equivalente donde $L = \infty$. Este problema tiene solución conocida desde la ecuación de Navier-Stokes (NS) escrita en coordenadas cilíndricas [4, 5]. En la sección 7.2.4 se analiza un problema con una geometría y configuración similar a la del problema de interés. Se verifica la distribución de velocidad en una geometría que modela una celda electroquímica, donde es de interés determinar la distribución de velocidad en una región acotada del dominio que tiene solución conocida.

7.2.1. Detalles generales de la implementación numérica

Los resultados numéricos del LBM se obtienen utilizando el LBM-MRT con un esquema de velocidades D3Q19 (ver sección C.3). Se realizaron verificaciones con el modelo D3Q15, no se encuentran diferencias apreciables en los resultados, pero se obtuvieron mejores características de estabilidad con el D3Q19 para valores pequeños de τ . Este es el motivo principal de su elección. El dominio computacional está formado por un paralelepípedo rectangular que contiene completamente la geometría de la figura 7.1. Por simplicidad, se evoluciona sobre todos los nodos de la grilla del dominio computacional, nodos que pertenecen a $\mathcal{N}_s \cup \mathcal{N}_F$.

Sobre los bordes del paralelepípedo rectangular se imponen condiciones de borde de periodicidad para evitar problemas de inconsistencia numérica. Éstos son bordes y condiciones de borde ficticias que permiten evolucionar en el problema. Sobre las fronteras de geometría arbitraria, definida en la figura 7.1, se utilizan condiciones de borde Dirichlet de velocidad. Mediante condiciones de borde bounce-back (sección 3.2.1), se impone la velocidad en la frontera según los requisitos detallados en la sección 7.1. Por sus características, el método de bounce-back define un borde segmentado, posicionado siempre entre dos nodos de grilla. Se utiliza este método para garantizar conservación de la masa. Inicialmente se realizaron pruebas con el método BFL de la sección 3.3.3, se descarta su aplicación por problemas de conservación de masa.

Para el problema con la distribución $\omega(t)$ definida en la configuración 1, se utiliza una discretización $\delta x = 1.58 \times 10^{-4}$ m, dando aproximadamente 40 nodos de grilla en la longitud entre los cilindros concéntricos. Se utiliza $\tau = 0.515$ con los demás parámetros detallados en la sección C.3. El paso temporal utilizado es $\delta t = 1,264 \times 10^{-4}$ s ($c = 1.25$). El fluido modelado es agua con $\nu = 1 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ y $\rho = 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$. Para el problema con la distribución $\omega(t)$ definida en la configuración 2, se modifica c y consecuentemente δt manteniendo la discretización δx y τ igual a la configuración 1 anterior. El fluido modelado es 2-propanol con $\nu = 3.76 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ y $\rho = 850 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$.

Los fluidos que se analizan son incompresibles, se los modela con el LBM cuasi—incompresible presentado en el Capítulo 2. Con motivos de reducir los efectos de compresibilidad del LBM, el valor de c está acotado para garantizar que el número de Mach de la grilla sea bajo, se adopta un valor < 0.1 en este problema. Es deseable poder utilizar τ lo más cercano a 0.5 sin encontrar problemas de estabilidad numérica. Esto permite incrementar c y reducir los efectos de compresibilidad sin incrementar el costo computacional; o reducir el número de nodos de la grilla (ver capítulo 2, párrafo sobre espaciado de grilla δx y paso temporal δt). Se utiliza una única grilla regular para resolver el problema. No se considera refinamiento de grilla, utilizarlo podría ser una estrategia correcta para

obtener una discretización más refinada en regiones cercanas a los bordes y reducir el costo computacional.

Es necesario hacer una aclaración sobre la elección de un modelo tridimensional para resolver el problema de interés principal, ya que los resultados encontrados muestran que es factible utilizar un modelo axisimétrico. Existen dos motivos principales para su elección. Uno de los motivos es que se dispone de un modelo tridimensional y no de uno axisimétrico; el otro es que para resolver el problema de verificación de la sección 7.2.4 es necesario considerar en principio modelos tridimensionales. Estos problemas presentan inestabilidades en el campo de velocidad [164], y no se tenían certeza iniciales de que el campo de velocidad fuese axisimétrico. Al momento de abordar el problema algunas variables como $\omega(t)$ no estaban completamente definidas.

7.2.2. Verificación de convergencia al régimen estacionario

El objetivo de este problema es verificar que $u_\theta(r)$ converge a la solución estacionaria de la ecuación de NS, una distribución lineal en r . En la figura 7.2, se muestra una evolución temporal de $u_\theta(r)$ en el plano $z = z_6$ junto con la solución de estado estacionario. Se puede observar que $u_\theta(r)$ tiende a la solución estacionaria como es esperable.

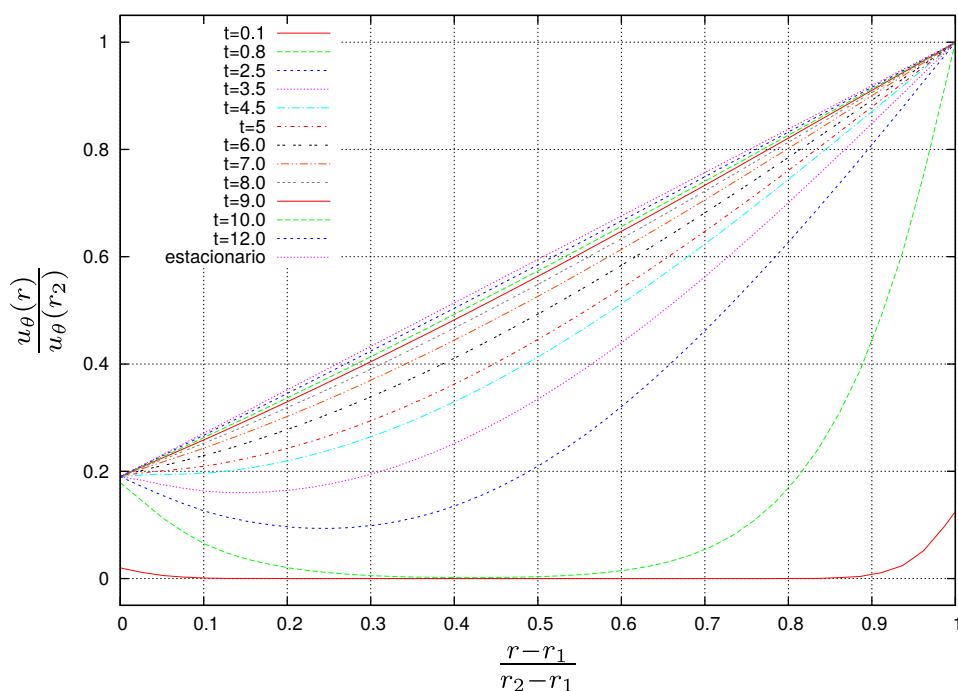


FIGURA 7.2: Evolución temporal de $u_\theta(r)$ en el plano $z = z_6$ de la figura 7.1. Se muestra también la solución estacionaria de u_θ . El tiempo t está expresado en segundos.

En las figuras 7.3 se muestra $u_\theta(r)$ para algunos planos z_1, \dots, z_6 detallados en la figura 7.1. Se presentan resultados para diferentes tiempos en el proceso de evolución. La posición en z de los planos z_1, \dots, z_6 se elige de manera arbitraria coincidentes con nodos de la grilla. Evaluar u_θ en los planos transversales al eje z permite verificar la existencia de una distribución de velocidad en la dirección longitudinal. Esta distribución existe por influencia e interacción del fluido con las tapas anulares que lo contienen entre los cilindros concéntricos del problema.

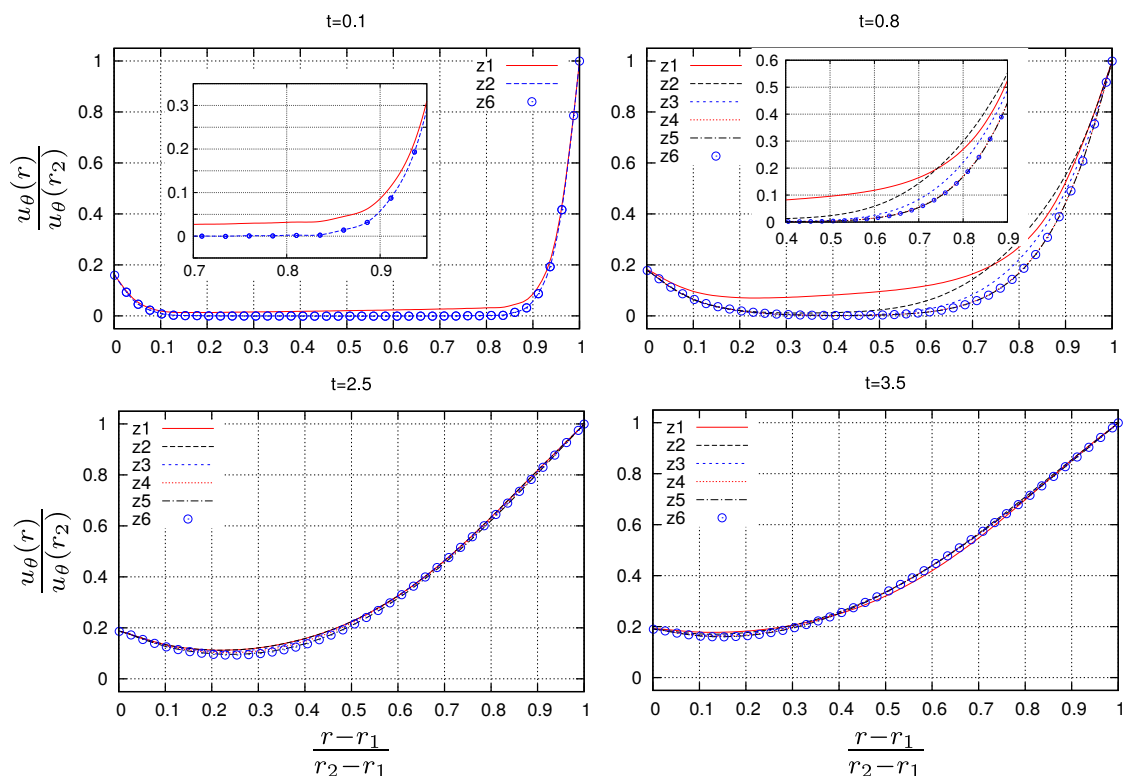


FIGURA 7.3: $u_\theta(r)$ para diferentes planos de corte, ver esquema del problema presentado en la figura 7.1. Se muestran resultados para diferentes tiempos en la evolución del problema. El tiempo t está expresado en segundos.

De los resultados de la figura 7.3 se puede apreciar una influencia de las tapas anulares en la distribución de velocidad. Cuando comienza la rotación, existe una distribución de velocidad en z , siendo los perfiles de velocidad en la zona central z_5 y z_6 los menos influenciados; luego u_θ converge asintótica a un único perfil de velocidad para todo z . Por motivos de claridad, en la figura 7.3 se muestra para $t = 0.1$ s el perfil de velocidades solo en algunos planos transversales.

7.2.3. Verificación con soluciones 1D

La distribución de velocidad $u_\theta(r)$ lejos de la influencia de los bordes anulares y para un rango acotado de tiempo, puede compararse con la solución de un problema de geometría equivalente con $L = \infty$. El plano z_6 es el más lejano de la influencia de los extremos, es esperable que la distribución de $u_\theta(r)$ no esté inicialmente influenciada por efectos tridimensionales.

La velocidad $u_\theta(r)$ para un problema de geometría equivalente con $L = \infty$ se obtiene de la ecuación de NS en coordenadas cilíndricas, (r, θ, z) :

$$\frac{\partial u_\theta}{\partial t} = \nu \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_\theta + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r^2} \right\} \quad (7.1)$$

$$u_\theta = u_\theta(r, t) \quad ; \quad u_\theta(r_1, t) = \omega(t)r_1 \quad ; \quad u_\theta(r_2, t) = \omega(t)r_2 \quad ; \quad u_\theta(r, 0) = 0$$

Soluciones de (7.1) se encuentran de manera numérica utilizando expresiones en diferencias, de segundo orden para las derivadas espaciales y Euler forward para la temporal [165], equivalente al LBM.

En la figura 7.4 se muestra comparativamente la evolución temporal de u_θ en el plano $z = z_6$ obtenida del LBM y la solución de la ecuación (7.1). Se puede observar de la figura que los resultados tridimensionales del LBM son comparables con los de la ecuación (7.1) para $t \leq 0.8$. Este comportamiento es esperable dada la distribución de u_θ presentada

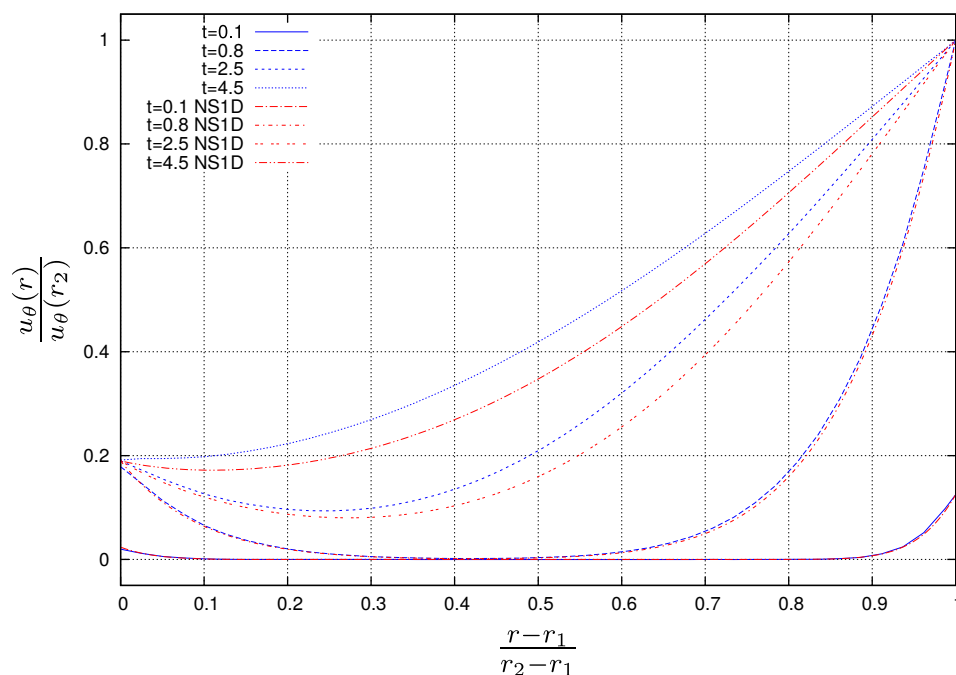


FIGURA 7.4: Evolución temporal de u_θ en el plano $z = z_6$. Se muestra u_θ obtenida del LBM y la solución de la ecuación (7.1) identificada como NS1D para $t \leq 4.5$ s. El tiempo t está expresado en segundos.

en la figura 7.3 para $t > 0.8$ s. La distribución de velocidad en los planos (z_1, \dots, z_6) más cercanos a los extremos anulares está fuertemente influenciada por la velocidad impuesta en la superficie. Para $t \leq 0.8$ s existe una variación longitudinal apreciable en la distribución de $u_\theta(r)$ para los diferentes planos (z_1, \dots, z_6) evaluados. Luego, $u_\theta(r)$ en el plano z_6 tiene una influencia despreciable de efectos tridimensionales para un intervalo de tiempo acotado desde la condición inicial. La solución del LBM es comparable con la obtenida de la ecuación 7.1 solo en este intervalo de tiempo. La distribución de $u_\theta(r)$ en los diferentes planos transversales de interés tienden asintóticamente a una distribución uniforme como se muestra en la figura 7.3. Este comportamiento brinda una distribución de velocidad diferente de la solución 1D, como se puede observar en los resultados presentados para $t = 2.5$ s y $t = 4.5$ s en la figura 7.4.

7.2.4. Simulación de modelos de celdas electroquímicas

Las celdas electroquímicas con una configuración de electrodo rotante (RDE), son ampliamente utilizadas para caracterizar e investigar el mecanismo y la cinética de la reacción electroquímicas [166]. En la figura 7.5 se muestra la geometría esquemática de

un modelo de celda electroquímica³. El fluido esta contenido en el volumen definido por

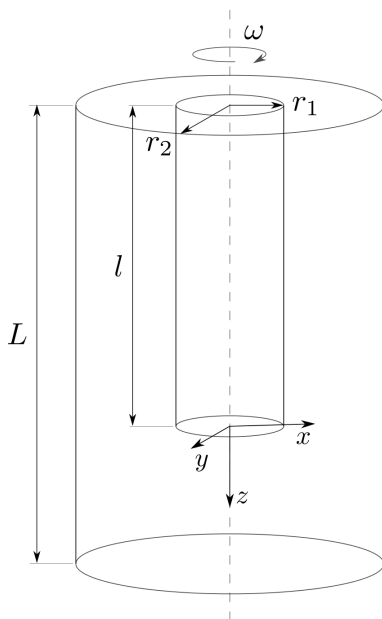


FIGURA 7.5: Diagrama esquemático de la geometría del problema que se analiza. Vista en perspectiva de la geometría.

los dos cilindros concéntricos, una tapa anular superior y una circular inferior. El cilindro central de radio r_1 y longitud l posee una velocidad angular $\omega(t)$ y modela el electrodo de la celda; mientras que el cilindro externo de radio r_2 y longitud L se mantiene estático en la configuración mostrada en la figura.

Para extraer información cuantitativa de los experimentos, es necesario conocer el flujo de fluido en la celda, en particular la velocidad en una región cercana a la parte inferior del cilindro central (electrodo). Cuando la distribución de velocidad es conocida es posible modelar el sistema y determinar las constantes cinéticas [167–169]. Existen caracterizaciones experimentales utilizando RMN [162] y numéricas [164, 170] del flujo de fluido en estas celdas electroquímicas. Una aproximación a la velocidad del fluido en la región de interés fue presentada por Cochran [171], quien analiza un modelo simplificado bajo la hipótesis de una celda infinita y un electrodo con $r_1 \rightarrow \infty$ [5].

Utilizando LBM se obtiene numéricamente el campo de velocidad del fluido en el modelo de celda electroquímica propuesto. Se tiene especial interés en encontrar la distribución de velocidad sobre el eje de simetría del problema. En una región acotada, cuando $\frac{z}{r_1} \rightarrow 0$, se utiliza la solución propuesta por Cochran para verificar la solución numérica del LBM.

Se analiza una geometría con dimensiones: $r_1 = 3.05$ mm, $r_2 = 6.7$ mm, $l = 34$ mm, y $L = 45.18$ mm. La velocidad de rotación del cilindro central es $\omega = 5$ rps. El número de Reynolds del problema es: $Re = \frac{\omega r_1^2}{\nu} \approx 96$. El fluido está inicialmente en reposo, sobre el cilindro central se impone una variación lineal de velocidad angular hasta alcanzar $\omega = 5$ rps para $t = 0.1$ s. Este criterio de arranque se impone para evitar perturbaciones indeseadas por problemas de discontinuidad en el campo de velocidad a tiempo $t = 0$.

En la figura 7.6 se muestra la evolución temporal de la distribución de velocidad $u_z(z)$ obtenida del LBM sobre el eje longitudinal, también se muestra la solución propuesta

³Se elige este problema de verificación ya que tiene una configuración similar al de la figura 7.1 y solución conocida en una región acotada del dominio fluido.

de Cochran [171]. De la figura se observa que la solución del LBM y la de Cochran se aproximan y son comparables cuando $\frac{z}{r_1} \rightarrow 0$. Apartado de esta condición, la solución no se parece a la de Cochran como es esperable, tiene un comportamiento de acuerdo a los resultados presentados en [164]. En la figura 7.7, se muestra para $t = 16$ s, la distribución de

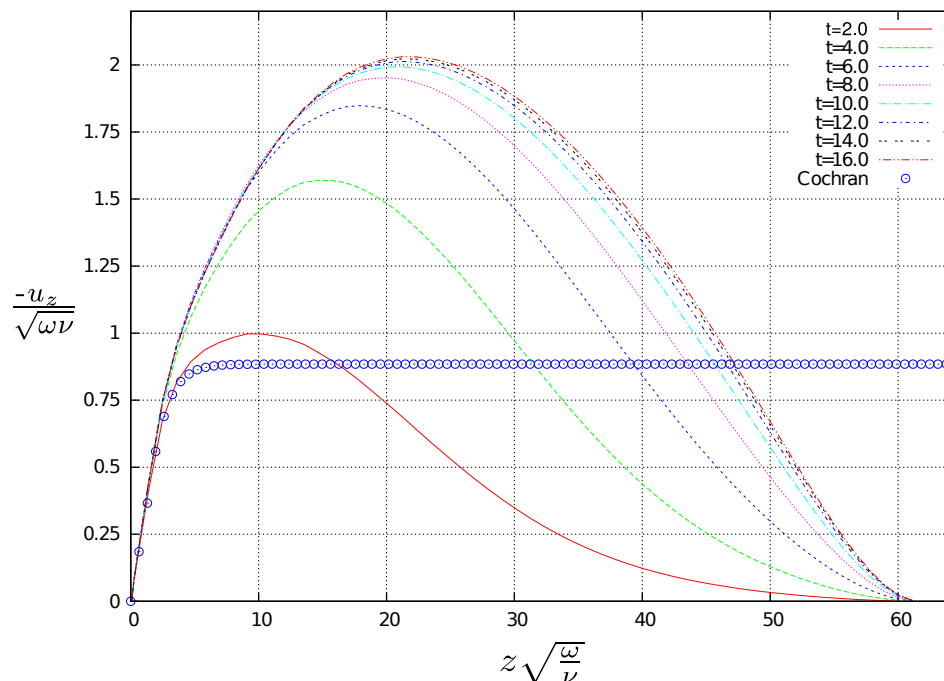


FIGURA 7.6: Evolución temporal de la velocidad $u_z(z)$ sobre el eje longitudinal de simetría de la configuración. La dirección positiva se detalla en el esquema de la figura 7.5. Los resultados del LBM se comparan con la solución de Cochran [5, 171], válida cuando $\frac{z}{r_1} \rightarrow 0$. El tiempo está expresado en segundos.

velocidad en un plano longitudinal que pasa por el eje de simetría. El patrón de vórtices en la región anular entre los cilindros, así como la distribución de velocidad entre el cilindro rotante y la tapa inferior, dependen de la configuración geométrica, de la velocidad de rotación, y del fluido que se analiza [164]. La solución encontrada se condice con la forma esquemática de la distribución de vórtices presentada en [164].

Detalles particulares de la implementación numérica Se adopta una configuración del dominio computacional y modelo LBM como la presentada en la sección 7.2.1. Se utiliza $\tau = 0.515$, con los demás parámetros detallados en la sección C.3 para el esquema D3Q19. El fluido modelado es agua con $\nu = 1 \times 10^{-6}$. Se utiliza una discretización con $\delta x = 1.973 \times 10^{-4} [m]$, resultando aproximadamente en 57 nodos lattice para discretizar la longitud que une la base del electrodo con la tapa circular inferior.

7.3. Comparación de resultados LBM vs RMN

Utilizando la geometría propuesta en la figura 7.1 se analiza el campo de velocidad para las dos configuraciones detalladas en la sección 7.1. Para la *configuración 1* y *2*, el fluido del problema es agua y 2-propanol respectivamente, con la distribución de velocidad angular ya detallada. Se analiza el problema utilizando el LBM y mediciones experimentales RMN.

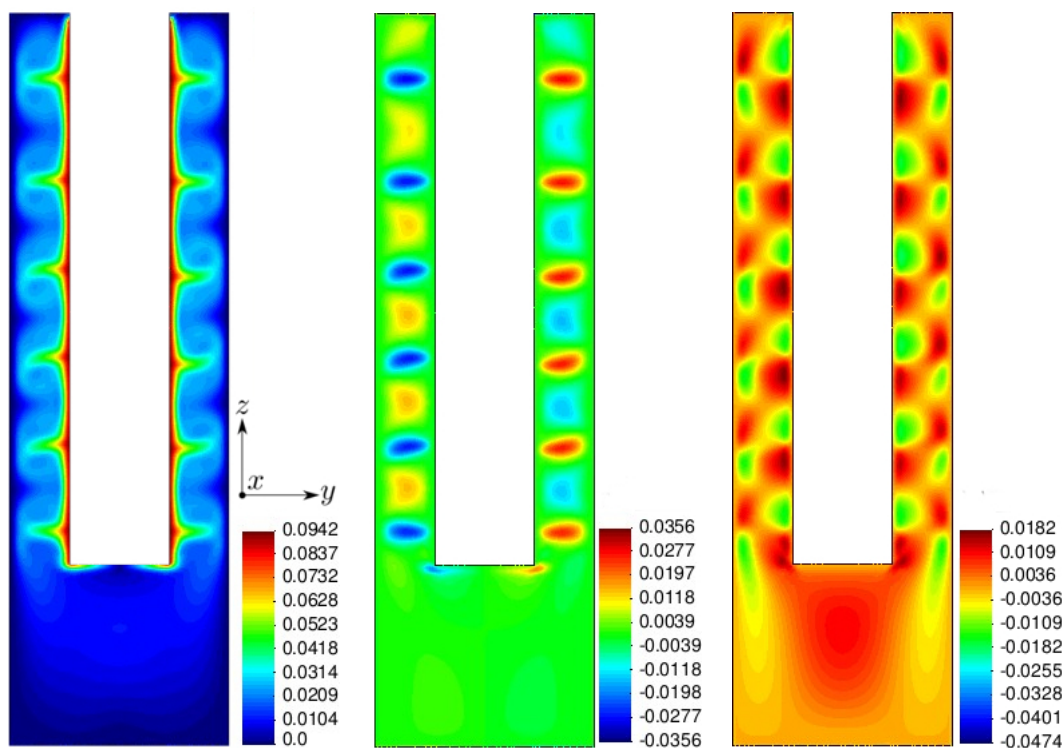


FIGURA 7.7: Distribución de velocidad del fluido sobre un plano longitudinal de simetría para $t = 16$ s. De izquierda a derecha se muestra $\|\mathbf{u}\|$, u_y , y u_z . La velocidad está expresada en $\frac{\text{m}}{\text{s}}$.

En las secciones 7.3.1 y 7.3.2 se muestran los resultados obtenidos de analizar ambas configuraciones, 1 y 2 respectivamente.

Generalidades sobre las mediciones experimentales Como se menciona en la introducción, no es la intención de este trabajo dar detalles del método de RMN utilizado. En [3], se brindan todos los detalles técnicos. Sin embargo, es necesario introducir algunas generalidades que justifican los criterios adoptados para comparar los resultados numéricos con los experimentales.

Las mediciones experimentales se realizan en una región del espacio (sección de análisis) de dimensiones 25×25 mm en el plano x, y y de dimensión 37 mm en la dirección z , con $z_{1RMN} = 9.1$ mm y $z_{2RMN} = 46.1$ mm. La geometría de la cavidad que contiene al fluido se posiciona centrada en el plano $x - y$ respecto de la región del espacio donde se realizan las mediciones. Los planos z_{1RMN} y z_{2RMN} se posicionan como se muestra en la figura 7.1. De las mediciones se obtienen datos en una serie de puntos discretos, 16 en la dirección y , y 32 en la dirección x .

El método propuesto en [3] permite relevar el campo de velocidad en la sección de ensayo cada intervalos de tiempo δt_{RMN} . Por cada δt_{RMN} se adquieren en serie 5 secuencias de datos; las dos primeras son de referencia y las tres restantes representan cada componente de la velocidad, u_x , u_y , y u_z . La velocidad u_y de interés es completamente relevada al finalizar la cuarta secuencia de adquisición en el intervalo δt_{RMN} . Como las primeras secuencias son de referencia y se utilizan para obtener datos en las últimas tres, la velocidad relevada u_y tiene influencia de todo el intervalo de tiempo $\frac{4\delta t_{RMN}}{5}$. Luego, cada valor experimental relevado en un intervalo de tiempo δt_{RMN} representa aproximadamente una

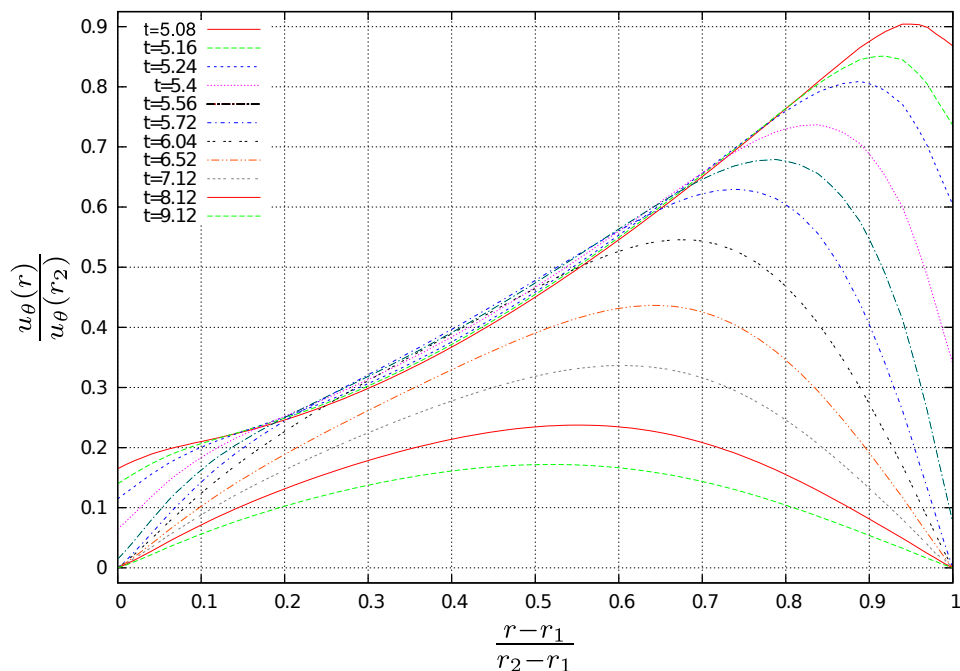


FIGURA 7.8: Evolución temporal de la distribución de velocidad $u_\theta(r)$ en el plano $z = z_6$. $t > 5$ s. El tiempo t está expresado en segundos.

media aritmética de la velocidad u_y en el espacio definido por un paralelepípedo regular de lados $\delta x_{RMN} \times \delta y_{RMN}$, entre los planos z_{1RMN} y z_{2RMN} . Con $\delta y_{RMN} = \frac{25}{16}$ mm, y $\delta x_{RMN} = \frac{25}{32}$ mm.

El intervalo de tiempo que toma una medición para la configuración 1 es de $\delta t_{RMN} = 80 \times 10^{-3}$ s, para la configuración 2 es de $\delta t_{RMN} = 90 \times 10^{-3}$ s. En el primer caso cada secuencia se releva en $\delta t = 16 \times 10^{-3}$ s, y en el segundo en $\delta t_{RMN} = 18 \times 10^{-3}$ s. Con estas consideraciones, es necesario encontrar una expresión equivalente para los resultados numéricos, tal que la comparación con los experimentales tenga validez.

7.3.1. Resultados de la configuración 1

Según la variación de velocidad angular definida en la configuración 1 (sección 7.1), para $t = 5$ s se aplica una aceleración angular de $\dot{\omega} = -3.3 \frac{\text{rps}}{\text{s}}$ hasta alcanzar $\omega = 0$ rps en $t = 5.606$ s.

En la figura 7.8 se muestra la evolución temporal⁴, para $t > 5$ s, de $u_\theta(r)$ obtenida del LBM en el plano z_6 . En las figuras 7.9 se presenta una evolución temporal de $u_\theta(r)$ en tiempos discretos para los planos transversales de la figura 7.1. Se puede apreciar que las condiciones de borde impuestas por las tapas anulares introducen una distribución longitudinal de velocidad, $u_\theta(r, z)$.

En los resultados de la figura 7.9 se observan variaciones en los perfiles de velocidad para los diferentes planos transversales. Para que la comparación de resultados numéricos y experimentales tenga sentido, es necesario encontrar valores numéricos siguiendo un procedimiento similar al experimental, como se menciona en la introducción de esta sección. De los resultados numéricos se obtiene la velocidad u_y en la sección de análisis. Luego los

⁴Observar de la figura 7.8 que se parte de una distribución no estacionaria

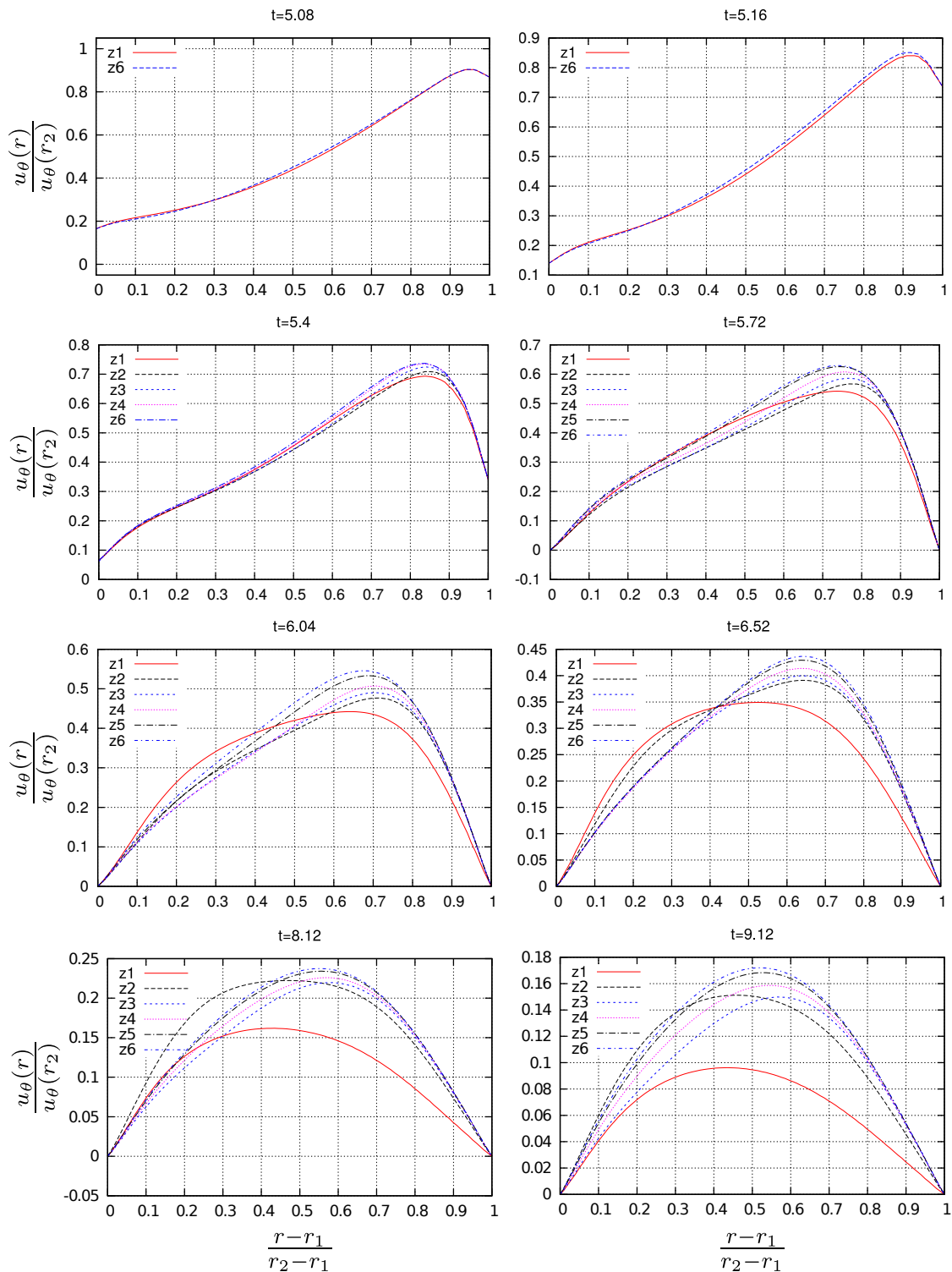


FIGURA 7.9: Distribución de velocidad $u_\theta(r)$ para diferentes planos de corte según el esquema del problema presentado en la figura 7.1. Se muestran resultados a diferentes tiempos en la evolución del problema. El tiempo t está expresado en segundos. Notar que existe una diferencia de escalas en las diferentes figuras.

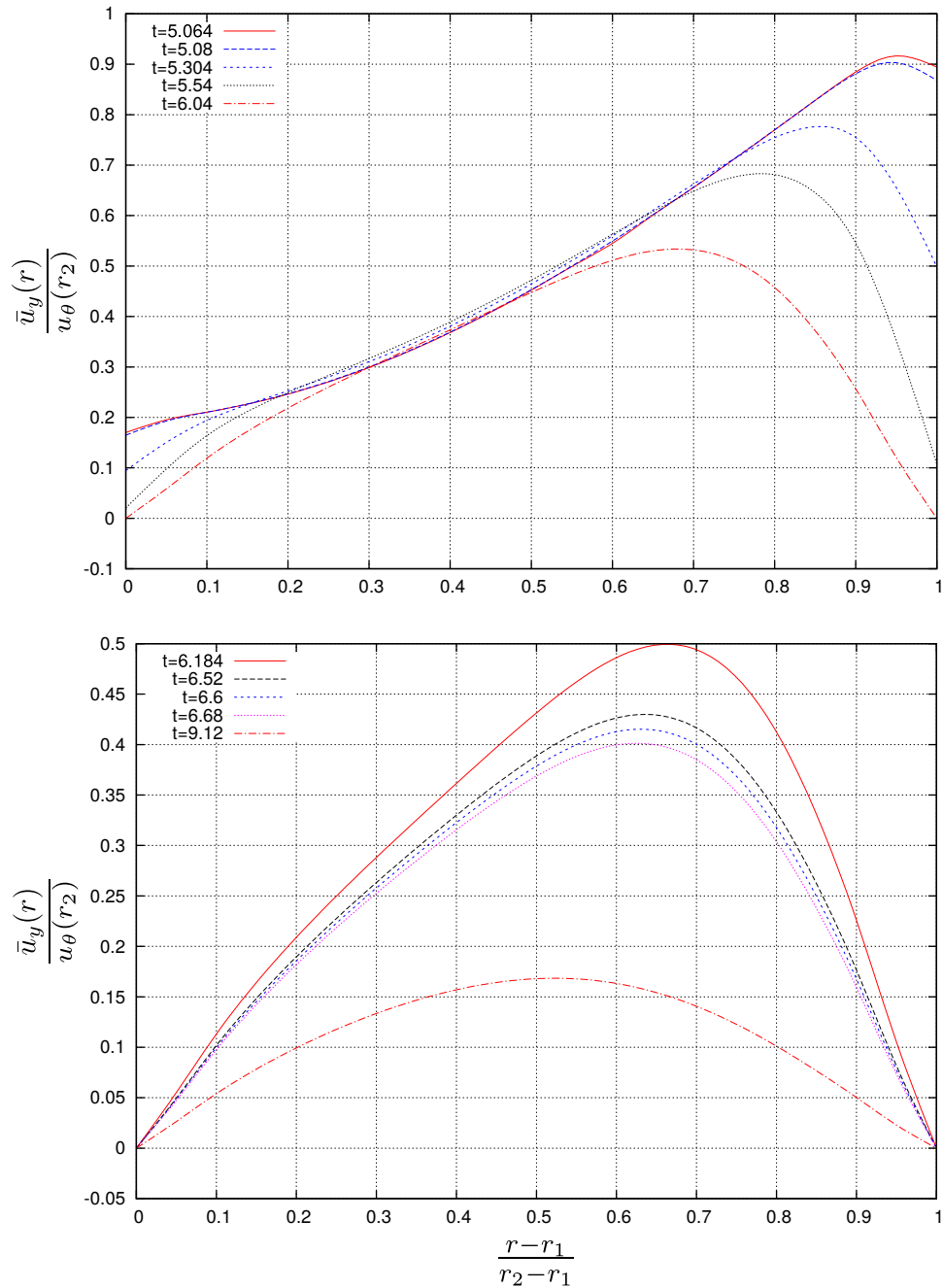


FIGURA 7.10: Evolución temporal de la media aritmética \bar{u}_y de la velocidad u_y en la sección de análisis experimental (ver figura 7.1). El tiempo t está expresado en segundos.

valores numéricos que se comparan con los experimentales son una media aritmética \bar{u}_y de u_y en la sección de análisis o espacio de medición experimental (ver figura 7.1 y definición en la introducción de la sección 7.3).

En la figura 7.10 se muestra la evolución temporal de \bar{u}_y . En la figura 7.11 se muestra la distribución de velocidad \bar{u}_y obtenida del LBM en comparación con los valores experimentales. Se puede ver de la figura 7.11 que existe una diferencia notable entre los resultados numéricos y experimentales. El método experimental tiene errores apreciables en las estimaciones de la velocidad. En especial se puede observar un error considerable en los

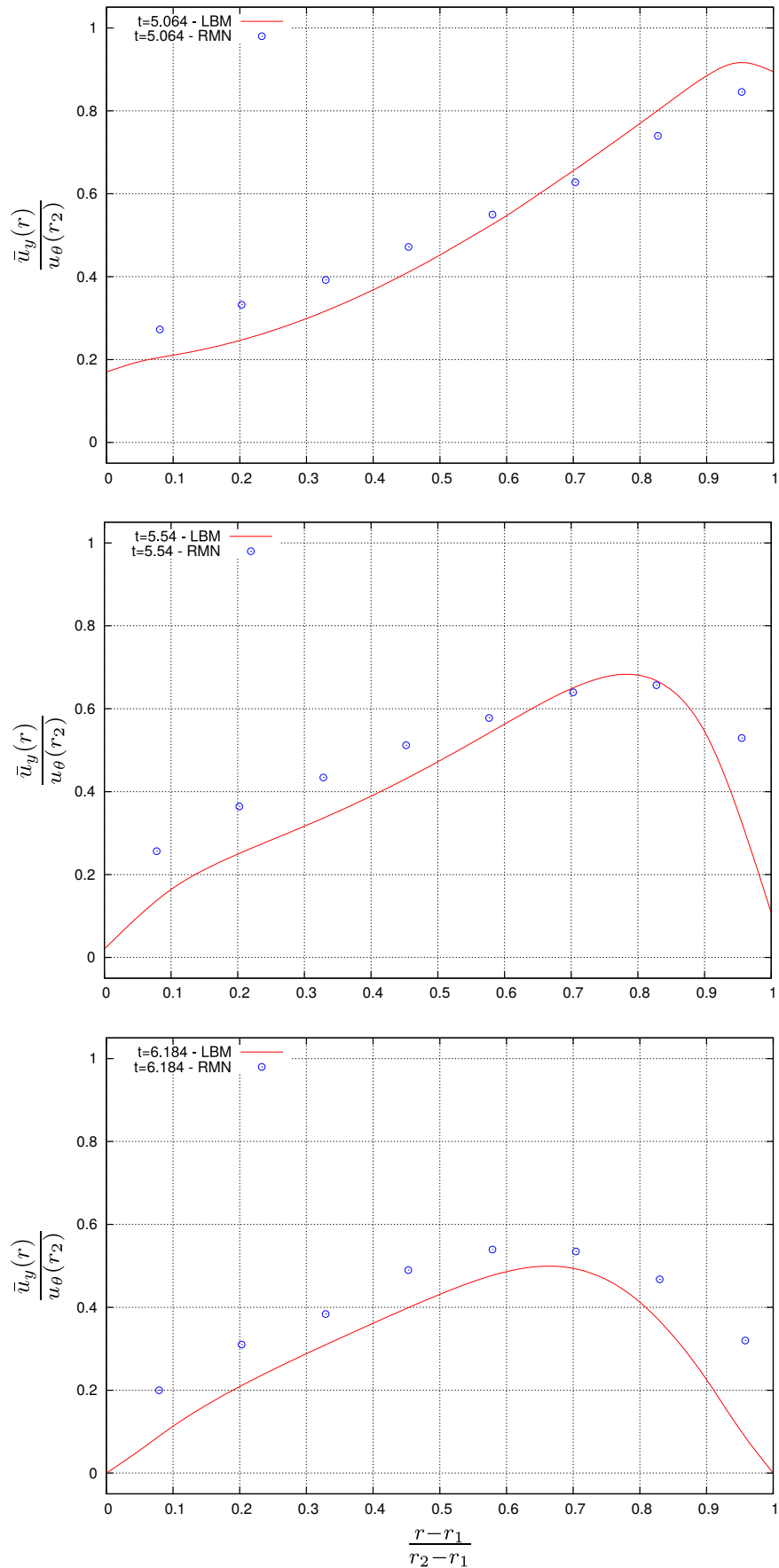


FIGURA 7.11: Comparación de la distribución de velocidad obtenida del LBM y de RMN. Los resultados LBM corresponden a una media aritmética \bar{u}_y de la velocidad u_y en la sección de análisis experimental como se explica en el texto. El tiempo t está expresado en segundos.

bordes donde la velocidad está impuesta⁵ También se encuentra una dispersión no menor en los resultados, esta se incrementa a medida que transcurre el tiempo de medición. El método experimental tiene la particularidad de acumular error en las mediciones cuando transcurre el tiempo desde t_0 (Ver detalles en [3]).

Luego no es posible utilizar el método experimental para verificar la precisión del LBM dados los errores y dispersión observada en las mediciones RMN con el método propuesto en [3]. Por el contrario, los resultados numéricos se utilizan como una referencia para verificar el método experimental.

7.3.2. Resultados de la configuración 2

Utilizando la velocidad angular de la *configuración 2* (sección 7.1) se analiza el campo de velocidad del 2-propanol (alcohol isopropílico) en el interior de la cavidad. A la temperatura del ensayo experimental las propiedades del fluido son: $\rho_{2-propanol} = 850 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$, $\nu_{2-propanol} = 3.76 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.

Según la *configuración 2*, para $t = 30$ s en el ensayo experimental se aplica una aceleración angular de $\dot{\omega} = -3.3 \frac{\text{rps}}{\text{s}}$ hasta alcanzar $\omega = 0$ rps en $t = 30.606$ s. Para $t = t_0 \geq 7$ s la distribución de velocidad en la sección de análisis es la solución estacionaria del problema. Luego, para minimizar tiempo de cálculo, la distribución $\omega(t)$ se ajusta a este valor de t_0 .

Se evalúa una velocidad media espacial como se detalla en la sección 7.3.1. En la figura 7.12 se muestra la evolución de la distribución de una media aritmética \bar{u}_y de la velocidad en la sección de análisis. Si bien existe una diferencia de tiempos entre los resultados experimentales y numéricos presentados en la figura, este desfase temporal está dentro del intervalo δt_{RMN} y se considera aceptable. Se puede observar de la figura 7.12 que, como en el caso anterior, existe una diferencia notable entre los resultados numéricos y experimentales. Si bien los errores son menores que los obtenidos para la configuración 1 en la sección 7.3.1, las conclusiones del final de la sección 7.3.1 son también aplicables a este caso.

7.3.3. Evolución de la velocidad máxima

Se comparan resultados experimentales y del LBM para el decaimiento de la velocidad máxima $\bar{u}_{y,\text{máx}}$ en la sección de análisis. En la figura 7.13 se muestran los resultados obtenidos de analizar agua y 2-propanol como se presenta en secciones anteriores. Se puede observar una dispersión significativa en la velocidad máxima obtenida del método experimental. La dispersión es mayor para el 2-propanol, y crece con el tiempo cuando disminuye la velocidad. Los resultados LBM se mantienen siempre dentro de la dispersión de los datos experimentales.

⁵Al comparar los resultados numéricos y experimentales, se debe tener especial cuidado con los valores experimentales de velocidad obtenidos en la región de los bordes, en particular para el borde r_2 , en la etapa de desaceleración. En la desaceleración ocurren cambios importantes de la velocidad en aproximadamente 600 ms, mientras que la determinación del campo de velocidad toma 80 ms (y 90 ms en la sección siguiente). El tiempo de medición es comparativamente significativo respecto al tiempo en que se producen variaciones de la velocidad, en especial cerca de los bordes. Luego, estas consideraciones se deben contemplar en las comparaciones de valores numéricos (que corresponden a un instante de tiempo) con resultados experimentales durante la desaceleración y cerca de los bordes.

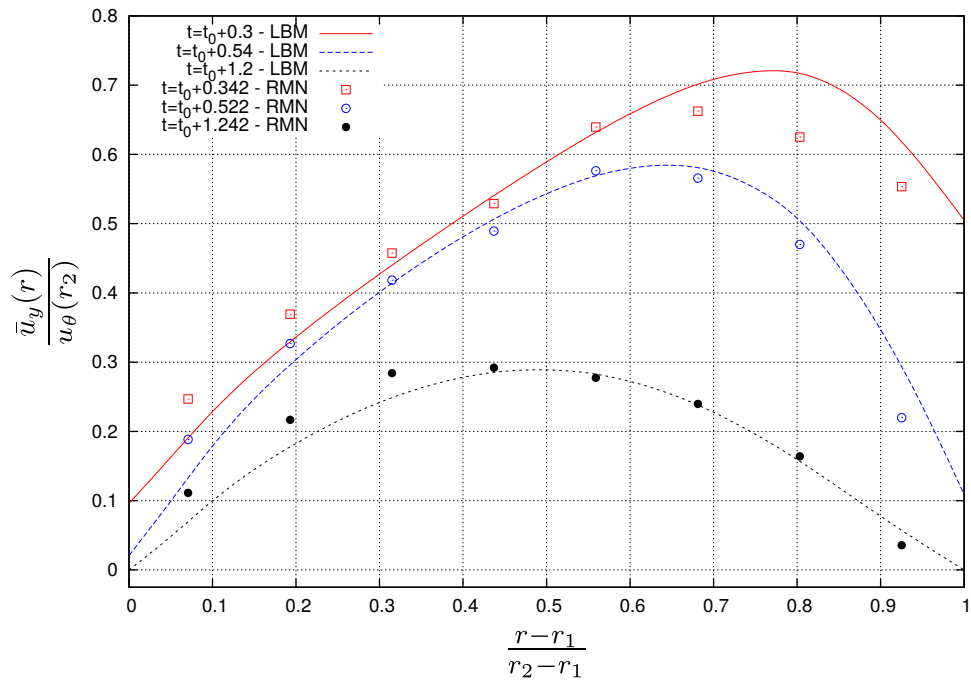


FIGURA 7.12: Evolución temporal de la media aritmética \bar{u}_y de la velocidad u_y en un plano que contiene al eje de simetría longitudinal entre z_{1RMN} y z_{2RMN} . Ver la figura 7.1. t_0 es el tiempo a partir del cual la distribución de velocidad en la sección de análisis es la estacionaria. Se muestran los resultados experimentales de RMN.

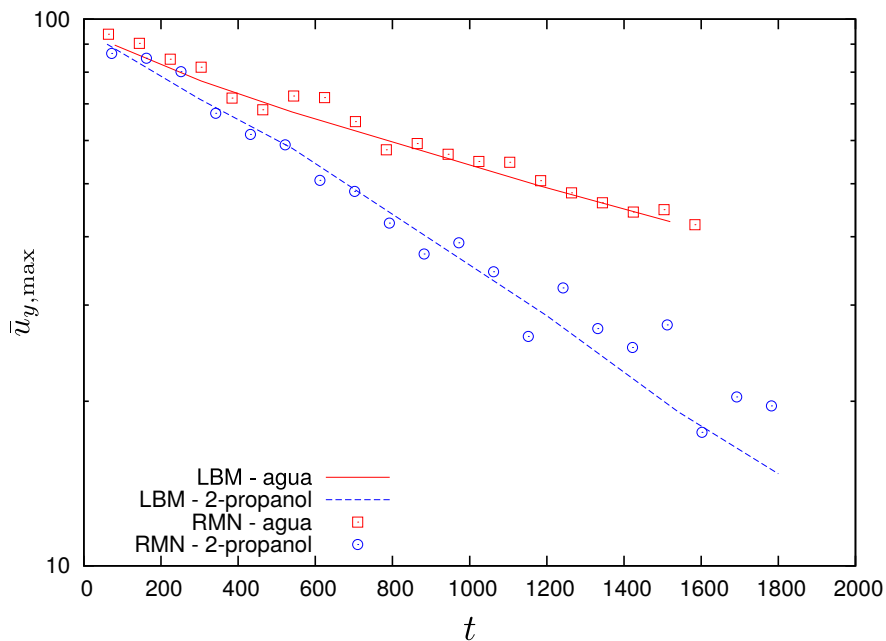


FIGURA 7.13: Evolución temporal de la velocidad media máxima en la sección de análisis. Se muestran resultados numéricos del LBM y mediciones experimentales de RMN. El tiempo t está expresado en ms y la velocidad en $\frac{mm}{s}$.

7.4. Comentarios y conclusiones

Se implementa el LBM para resolver el campo de velocidad transitorio en una cavidad con fronteras en movimiento. El algoritmo LBM implementado está probado en problemas similares al analizado, y brinda resultados con una precisión aceptable para los casos de verificación presentados en la sección 7.2. También lo hace en otros problemas con resultados conocidos, como los presentados en los sucesivos capítulos de este trabajo. Los problemas de verificación permiten asegurar cierta confiabilidad en los resultados numéricos obtenidos para el problema de interés principal.

Se puede apreciar que existen diferencias importantes entre los resultados experimentales y numéricos (figuras 7.10 y 7.12). El método experimental tiene errores en la estimación de la velocidad. En especial se pueden observar errores considerables en los bordes, donde la velocidad está impuesta. También se encuentra una notable dispersión en los resultados, esta se incrementa a medida que transcurre el tiempo de medición como se observa en la figura 7.13. Es una característica del método experimental la acumulación de errores en las mediciones a medida que transcurre el tiempo de ensayo (ver detalles en [3]). Luego no es posible utilizar el método experimental para verificar la precisión del LBM dados los errores y dispersión observada.

Como resultado secundario, se verifica que los métodos de condiciones de borde para fronteras de geometría arbitraria basados en bounce-back presentan problemas de conservación de la masa. Los mayores cambios en la masa contenida dentro de la geometría se observaron en los procesos inestacionarios de aceleración. El método de bounce-back estándar de la sección 3.2.1 conserva la masa; sin embargo, los métodos basados en bounce-back que utilizan alguna interpolación para posicionar el borde de forma arbitraria (sección 3.3.3), violan la conservación de la masa. Esto es especialmente notorio cuando se analizan y simulan tiempos largos, como ocurre con los problemas de este capítulo. Este es el motivo principal por el que se elige el método de bounce-back estándar de la sección 3.2.1 para representar las fronteras. Por sus características define un borde segmentado, posicionado siempre entre dos nodos de grilla. Una alternativa puede ser utilizar los métodos de bordes inmersos [89, 90] donde declaran conservación de la masa, o formulaciones volumétricas como las propuestas por Chen et al. [122, 123]. Estas propuestas no se consideraron en $\{LBM\}$.

Apéndice A

La ecuación de Boltzmann

En éste apéndice se introduce notación, generalidades y se muestra una derivación acotada de la ecuación de Boltzmann (BE). El objetivo es explicitar algunos resultados relevantes de la teoría de la BE. En especial, el problema que modela, los límites de aplicación y las hipótesis bajo las cuales se deriva la BE. Se obtiene la BE desde la ecuación de Liouville, siguiendo un procedimiento estándar como el propuesto por Grad [14]. Se dice que la derivación es acotada ya que algunos detalles fundamentales se muestran y utilizan dando las referencias correspondientes, sin una demostración formal y rigurosa.

Se presenta la conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de la dinámica de fluido, las ecuaciones macroscópicas fundamentales y las de conservación.

A.1. Generalidades sobre Mecánica Estadística - Descripción microscópica

Un volumen macroscópico de gas está compuesto por un gran número de moléculas moviéndose en forma aleatoria. Ignorando efectos cuánticos, las moléculas son representadas como partículas (masa puntual o con un número pequeño de grados de libertad) cuyo movimiento puede ser descrito por la mecánica clásica.

Se considera un sistema de N partículas¹ que viven en un espacio d -dimensional e interactúan entre sí, se asume conocida la ley de interacción. La posición de la i -ésima partícula y su cantidad de movimiento se distinguen con $\mathbf{x}_i = (x_{i,1}, \dots, x_{i,d})$, y $\mathbf{p}_i = (p_{i,1}, \dots, p_{i,d})$ respectivamente.

El estado del sistema de partículas está determinado por $2N \times d$ variables. En términos del Hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, es posible obtener las ecuaciones de movimiento de las partículas:

$$\dot{\mathbf{x}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}_i} \quad , \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}_i} \quad ; \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{A.1})$$

A tiempo t el estado del sistema puede ser especificado por un punto en el *espacio de fases* de dimensión $2N \times d$. Conociendo las fuerzas de interacción entre las partículas y especificado un punto en el espacio de fases es posible, utilizando las ec. (A.1), determinar el estado del sistema de partículas para todo tiempo.

Determinar la dinámica de un sistema de partículas en \mathbb{R}^3 implica resolver una gran cantidad de ecuaciones de movimiento, aproximadamente 6×10^{23} para 1 m^3 compuesto

¹Valores típicos de $N \propto 10^{23}$.

por un gas a presión y temperatura atmosférica estándar. Resolver este problema (conocer con precisión la posición y velocidad de las N partículas) carece de sentido práctico. Se obtiene información detallada que en principio no es necesaria si se quiere conocer una descripción macroscópica del fluido en términos de algún observable. Por otro lado es imposible dada la incapacidad de conocer con precisión el estado inicial del sistema. Como no es de interés determinar la evolución de las partículas, se aborda el problema mediante una descripción estadística. La mecánica estadística brinda una conexión entre estas dos escalas del problema.

Un postulado de la mecánica estadística establece que toda propiedad macroscópica intensiva de un sistema de partículas puede ser descrita en términos del estado microscópico del sistema. Si se considera un conjunto de observables constante en el tiempo, que caracterizan el estado termodinámico (macroscópico) del sistema, este se encuentra en un estado de equilibrio macroscópico. Existe un gran número de estados microscópicos compatibles con estos valores de observables que determinan el estado macroscópico o macro-estado; el sistema de partículas puede estar en cualquiera de los micro-estados compatibles, también denominados micro-estados factibles o permitidos.

Asignando alguna probabilidad a los estados microscópicos compatibles con un mismo estado macroscópico, se los identifica respecto de los no compatibles. Esto genera un conjunto de puntos en el espacio de fases que representan todos los estados microscópicos factibles/compatibles, cada uno con un valor estadístico o de probabilidad asignado. El estado microscópico del sistema es ahora una variable aleatoria, toma valores del conjunto de puntos factibles en el espacio de fases. Estos representan los diferentes estados microscópicos en los que el sistema se puede encontrar.

Esta colección de n_s copias del mismo sistema en micro estados diferentes se la denomina *ensamble estadístico* o *ensamble de Gibbs*. Si $n_s \rightarrow \infty$, estos puntos tienden a un continuo en el espacio de fases, pudiendo describir su distribución a través de una función densidad continua en \mathbf{x} y \mathbf{p} . Normalizando esta función densidad se obtiene una distribución de probabilidad en el espacio de fases, $\mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$. Esta es la densidad de probabilidad de una variable aleatoria (\mathbf{x}, \mathbf{p}) que toma valores de los infinitos ($n_s \rightarrow \infty$) micro estados factibles. Luego, $\mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{p}$ es la probabilidad de encontrar el estado microscópico en un elemento de volumen $d\mathbf{x} d\mathbf{p}$ centrado en (\mathbf{x}, \mathbf{p}) a tiempo t .

A.1.1. La ecuación de Liouville

La ecuación de *Liouville* es una ecuación de movimiento de $\mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$. Determina la dinámica de $\mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ como resultado de la evolución del sistema de partículas en sus diferentes micro-estados factibles, cada punto del ensamble en el espacio de fases. Conocido un estado inicial, la trayectoria en el ensamble se obtiene de las ecuaciones de movimiento (A.1). La evolución del sistema describirá trayectorias en el espacio de fases que son cerradas o bien nunca se cruzan [172].

De la variación temporal de $\mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ a lo largo de la trayectoria del sistema en el ensamble se obtiene (por simplicidad $\mathcal{F}_N = \mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$):

$$\frac{d\mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)}{dt} = \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} + \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} \right) \quad (\text{A.2})$$

Es frecuente escribir la ecuación de Liouville (A.4) utilizando $\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \frac{\mathbf{p}_i}{m}$, y $\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i$, con m la masa de la partícula, \mathbf{F}_i la fuerza actuante sobre la i -ésima partícula. Si por simplicidad

no se consideran fuerzas externas², \mathbf{F}_i es la fuerza ejercida sobre la i -ésima partícula por las $N - 1$ restantes en el sistema. La fuerza en la i -ésima partícula producida por la j -ésima se deriva del potencial $\phi_{i,j}$, función de $r_{i,j} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$.

$$\mathbf{F}_i = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\partial \phi_{i,j}}{\partial \mathbf{x}_i} \quad (\text{A.3})$$

El teorema de *Liouville* establece:

$$\frac{d \mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)}{dt} = 0 \quad (\text{A.4})$$

Luego a lo largo de una trayectoria en el espacio de fases la densidad de probabilidad permanece constante en el tiempo. Una demostración formal del resultado A.4 se puede encontrar en [8].

A.2. La ecuación de Boltzmann

En esta sección delineamos una deducción de la ecuación de Boltzmann (BE) siguiendo parcialmente el procedimiento presentado en [10, 11] y [13] basado en el propuesto por [14]. Se deriva la BE desde la ecuación de Liouville integrando en una serie de dominios particulares, excluyendo ciertas regiones del espacio donde ocurren interacciones entre partículas de interés. Se obtiene una serie de ecuaciones no cerradas, una versión particular de las ecuaciones de la jerarquía BBGKY³.

Con argumentos basados en el comportamiento de la función distribución de densidad y tomando límite cuando el número de partículas en el sistema considerado tiende a infinito (límite termodinámico), es posible obtener una ecuación cerrada para la evolución de la función distribución \mathcal{F}_1 de una partícula. Ludwig Boltzmann obtuvo en 1872 una ecuación cerrada para \mathcal{F}_1 , lleva su nombre y fue derivada siguiendo un procedimiento ad-hoc [11].

Presentamos y describimos algunos detalles mínimos para derivar la BE con intención de explicitar el problema que se resuelve, las variables involucradas y los límites de interés donde es aplicable la BE. Un procedimiento sistemático y detallado se puede encontrar en [10, 11, 13, 88].

A.2.1. Obtención de la ecuación de Boltzmann desde la ecuación de Liouville.

La ecuación para \mathcal{F}_1 derivada por Boltzmann es aplicable a un gas o sistemas de partículas en un límite denominado *Boltzmann gas limit* (BGL) o *Grad-Boltzmann limit* donde:

$$N \rightarrow \infty \quad , \quad m \rightarrow 0 \quad , \quad \sigma \rightarrow 0 \quad , \quad N\sigma^2 = cte \quad , \quad Nm = cte$$

σ es un parámetro que caracteriza el alcance de la fuerza interpartículas. El BGL describe un gas donde existen colisiones (el camino libre medio entre partículas es aproximadamente

²En la próxima sección se realiza una distinción sobre el término que se adiciona en la BE en caso de considerar fuerzas externas.

³Estas siglas hacen referencia a las iniciales de los apellidos (Bogoliubov, Born, H.S.Green, Kirkwood, y Yvon) en orden alfabético de las personas quienes independientemente las derivaron.

constante, $\propto 1/N\sigma^2$), a priori un gas imperfecto donde las fuerzas interpartículas tienen influencia en la evolución de \mathcal{F}_1 . Sin embargo, la descripción es la de un gas perfecto ya que las propiedades termodinámicas conservan el valor del gas ideal sin contribuciones apreciables del potencial interpartícula. Este resultado se debe a que en el BGL, el volumen total asociado al sistema $N\sigma^3 \rightarrow 0$.

Se define la densidad de probabilidad marginal de R partículas como:

$$\mathcal{F}_R(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_R, t) = \int \mathcal{F}_N(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_R, \dots, \mathbf{k}_N, t) \prod_{j=R+1}^N d\mathbf{k}_j \quad (\text{A.5})$$

por simplicidad en la notación se utiliza $\mathbf{k} = (\mathbf{x}, \mathbf{p})$ para denotar un punto en el espacio de fases de las N partículas, $\mathbf{k}_j = (\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_j)$ para la j -ésima partícula. De la definición A.5, $\mathcal{F}_1(\mathbf{k}_1, t) d\mathbf{k}_1$ es la probabilidad de encontrar una partícula dentro del volumen $d\mathbf{k}_1$ centrado en \mathbf{k}_1 a tiempo t .

Se introducen dos distribuciones marginales de interés, \mathcal{F}_1^σ y \mathcal{F}_2^σ :

$$\mathcal{F}_1^\sigma \equiv \int_{\Omega_1} \mathcal{F}_N \prod_{l=2}^N d\mathbf{k}_l \quad , \quad \mathcal{F}_2^\sigma \equiv \int_{\Omega_{1,2}} \mathcal{F}_N \prod_{l=3}^N d\mathbf{k}_l \quad (\text{A.6})$$

Ω_1 y $\Omega_{1,2}$ se definen teniendo en cuenta la distancia de interacción entre partículas. Considerando \mathbf{x}_1 fijo, se define el dominio D_1^r , $r = (2, 3, \dots, N)$ como: $D_1^r = \{\|\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_1\| \geq \sigma\}$. Luego la fuerza de interacción de la partícula 1 sobre la r (y viceversa) es nula en D_1^r . De esta definición, el dominio de integración en (A.6) es:

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= D_1^2 \times D_1^3 \times \dots \times D_1^N \\ \Omega_{1,2} &= D_1^3 \times D_1^4 \times \dots \times D_1^N \end{aligned}$$

Se define por conveniencia el complemento de D_1^r , una esfera $S_i^r = \{\|\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_i\| < \sigma\}$ centrada en \mathbf{x}_i , con normal $\mathbf{n}_i^r = \frac{\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_i\|}$ hacia el interior de D_1^r .

Como las partículas se asumen de igual masa, se puede considerar la velocidad de la partícula $\boldsymbol{\xi}$ como variable en lugar de la cantidad de movimiento \mathbf{p} . Luego $\mathcal{F}_R = \mathcal{F}_R(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, y un punto en el espacio de fases se representa como $\mathbf{k} = (\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$.

Es necesario definir algunas propiedades de $\mathcal{F}_N(\mathbf{k}, t)$ y realizar aclaraciones sobre su comportamiento en los límites de integración. $\mathcal{F}_N(\mathbf{k}, t)$ es simétrica, el valor de la función no se modifica ante permutaciones en los argumentos. Se asume $\mathcal{F}_N(\mathbf{k}, t) \rightarrow 0$ cuando $\mathbf{k} \rightarrow \pm\infty$. Esta hipótesis es intuitiva cuando se considera la cantidad de movimiento, encontrar partículas con velocidad $\boldsymbol{\xi} \rightarrow \infty$ tiene probabilidad cero. En la integración espacial, más allá de los límites de algún volumen conveniente, la probabilidad de encontrar una partícula es también cero. Si es de interés determinar el comportamiento de $\mathcal{F}_R(\mathbf{k}, t)$ en cercanías de las bordes del volumen que contiene las partículas, puede considerarse un término adicional en la ecuación (A.3) que contemple las fuerzas ejercidas por la pared sobre la i -ésima partícula. No se consideran estos casos de interacción.

La ecuación de Liouville determina la evolución temporal de $\mathcal{F}_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$. Integrando (A.2) sobre $\Omega_1, \Omega_{1,2}, \dots$ se obtiene la evolución de la densidad de probabilidad marginal $\mathcal{F}_1^\sigma, \mathcal{F}_2^\sigma, \dots$ para $1, 2, \dots, R$ partículas. Este procedimiento brinda un conjunto de ecuaciones no cerradas, es decir: \mathcal{F}_1^σ depende de \mathcal{F}_2^σ , \mathcal{F}_2^σ depende de \mathcal{F}_3^σ ; y así sucesivamente se obtiene un conjunto de ecuaciones recursivas. Estas se las denominada jerarquía de ecuaciones BBGKY. Siendo de interés las primeras dos, en particular se dan detalles sobre

la obtención de la primera. Se utilizan resultados de la segunda ecuación sin explicitarla, los detalles se pueden obtener de [10, 11, 88]. Estos resultados permiten eliminar la dependencia de \mathcal{F}_1^σ con \mathcal{F}_2^σ obteniendo la ecuación de Boltzmann.

Abordando los términos por separado al integrar la ecuación (A.2) sobre Ω_1 , se tiene para el primer término:

$$\int_{\Omega_1} \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial t} \prod_{l=2}^N d\mathbf{k}_l = \frac{\partial \mathcal{F}_1^\sigma}{\partial t} \quad (\text{A.7})$$

El segundo término de (A.2) se lo escribe por conveniencia como:

$$\int_{\Omega_1} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \boldsymbol{\xi}_i \prod_{l=2}^N d\mathbf{x}_l d\boldsymbol{\xi}_l = \int_{\Omega_1} \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot \boldsymbol{\xi}_1 \prod_{l=2}^N d\mathbf{x}_l d\boldsymbol{\xi}_l + \int_{\Omega_1} \sum_{i=2}^N \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \boldsymbol{\xi}_i \prod_{l=2}^N d\mathbf{x}_l d\boldsymbol{\xi}_l \quad (\text{A.8})$$

Ambos términos del lado derecho de (A.8) requieren un tratamiento particular, se los aborda de manera independiente. Para evaluar el primer término de (A.8) se debe tener en cuenta que los límites de integración dependen de \mathbf{x}_1 , variable sobre la cual se toma derivada de \mathcal{F}_N . Cada integral sobre $D_1^2, D_1^3, \dots, D_1^N$ da como resultado un término de borde⁴, donde por propiedad de simetría de \mathcal{F}_N se obtiene:

$$\int_{\Omega_1} \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot \boldsymbol{\xi}_1 \prod_{l=2}^N d\mathbf{x}_l d\boldsymbol{\xi}_l = \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial \mathcal{F}_1^\sigma}{\partial \mathbf{x}_1} + (N-1) \int_{\substack{\partial S_1^2 \\ \forall \boldsymbol{\xi}_2}} \mathcal{F}_2^\sigma \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \mathbf{n}_1^2 dS_1^2 d\boldsymbol{\xi}_2 \quad (\text{A.9})$$

\mathbf{n}_1^2 es la normal hacia afuera de la superficies S_1^2 de la esfera de radio σ centrada en \mathbf{x}_1 . El segundo término de lado derecho de (A.8) se reescribe utilizando el teorema de la divergencia de Gauss, obteniendo:

$$\int_{\Omega_1} \sum_{i=2}^N \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \boldsymbol{\xi}_i \prod_{l=2}^N d\mathbf{x}_l d\boldsymbol{\xi}_l = -(N-1) \int_{\substack{\partial S_1^2 \\ \forall \boldsymbol{\xi}_2}} \mathcal{F}_2^\sigma \boldsymbol{\xi}_2 \cdot \mathbf{n}_1^2 dS_1^2 d\boldsymbol{\xi}_2 \quad (\text{A.10})$$

El último término de (A.2) se anula ya que contiene contribuciones del potencial interpartículas $\phi_{1,2}$ en regiones del espacio tal que $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| \geq \sigma$, donde por hipótesis $\phi_{1,2} = 0$ ($\mathbf{F}_{i,j} = 0$). Luego el resultado de integrar la ecuación de Liouville en Ω_1 es:

$$\frac{\partial \mathcal{F}_1^\sigma}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial \mathcal{F}_1^\sigma}{\partial \mathbf{x}_1} = (N-1) \int_{\substack{\partial S_1^2 \\ \forall \boldsymbol{\xi}_2}} \mathcal{F}_2^\sigma (\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot d\mathbf{S}_1^2 d\boldsymbol{\xi}_2 \quad (\text{A.11})$$

con $d\mathbf{S}_1^2 = \mathbf{n}_1^2 dS_1^2$ y $\mathcal{F}_2^\sigma = \mathcal{F}_2^\sigma(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_2, t)$. La integral de superficie que aparece en la ecuación (A.11) tiene contribuciones de partículas que comienzan $(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot d\mathbf{S} < 0$, o culminan $(\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1) \cdot d\mathbf{S} > 0$ una colisión.

⁴Se utiliza el siguiente resultado:

$$\frac{d}{d\alpha} \int_{\mathcal{D}(\alpha)} g(\mathbf{x}, \alpha) d\mathbf{x} = \int_{\mathcal{D}(\alpha)} \frac{\partial g(\mathbf{x}, \alpha)}{\partial \alpha} d\mathbf{x} + \int_{\partial \mathcal{D}(\alpha)} g(\mathbf{x}, \alpha) \frac{\partial \mathbf{x}_w}{\partial \alpha} \cdot \mathbf{n}_w dS$$

$\mathcal{D}(\alpha)$ es un dominio deformable con α , \mathbf{x}_w un punto en el borde $\partial \mathcal{D}(\alpha)$ de $\mathcal{D}(\alpha)$, \mathbf{n}_w es la normal unitaria hacia afuera del dominio, con dS un elemento de superficie de $\partial \mathcal{D}(\alpha)$. Una demostración de este resultado puede encontrarse en [10].

Se reescribe el término del lado derecho de la ecuación (A.11). Se utiliza como variable la velocidad relativa entre dos partículas, $\mathbf{V} = \boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1$. La integral sobre la superficie de la esfera de radio σ centrada en \mathbf{x}_1 se divide en dos contribuciones: cuando $\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} < 0$ se integra sobre una superficie denotada ∂S^- , y cuando $\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} > 0$ sobre otra denotada ∂S^+ . Luego la integral puede realizarse sobre un disco de radio σ , perpendicular a \mathbf{V} . Un elemento de área del círculo es $da = r dr d\epsilon$, $r = [0, \sigma]$ y $\epsilon = [0, 2\pi]$, y se denota con $\mathbf{x}^\pm = \mathbf{x}^\pm(r, \epsilon)$ para indicar que la partícula está en ∂S^+ o ∂S^- . En el BGL $(\mathcal{F}_1^\sigma, \mathcal{F}_2^\sigma) \rightarrow (\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2)$ ya que $\sigma \rightarrow 0$:

$$\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \mathbf{x}_1} = N \int (\mathcal{F}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2^+, t) - \mathcal{F}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2^-, t)) V da d\boldsymbol{\xi}_2 \quad (\text{A.12})$$

con $V = \|\mathbf{V}\|$, y $\mathbf{k}_2^\pm = (\mathbf{x}_2^\pm, \boldsymbol{\xi}_2)$. El término del lado derecho de (A.12) se integra sobre una superficie da , si \mathcal{F}_2 no diverge, este término tiene una cota finita de orden $N\sigma^2$.

Boltzmann introdujo una hipótesis fundamental (que denominó *stosszahlansatz*) sobre la distribución de probabilidad conjunta de dos partículas. En la literatura también se suele denominar esta hipótesis como *caos molecular*. Si \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 son fases de dos partículas que no colisionaron, se asume que no están correlacionadas y su distribución conjunta, por independencia es:

$$\mathcal{F}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2^-, t) = \mathcal{F}_1(\mathbf{k}_1, t) \mathcal{F}_1(\mathbf{k}_2^-, t) \quad (\text{A.13})$$

Luego se busca expresar \mathcal{F}_2 en ∂S^+ en términos de \mathcal{F}_2 en ∂S^- , esto permite aplicar la hipótesis de distribución no correlacionada previa a la colisión y obtener el lado derecho de (A.12) en término de la función distribución de una partícula evaluada en argumentos particulares.

Considerando dos partículas en ∂S^+ a tiempo t con posición y velocidad $(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1)$, $(\mathbf{x}_2^+, \boldsymbol{\xi}_2)$; estuvieron en ∂S^- con $(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\boldsymbol{\xi}}_1)$, $(\hat{\mathbf{x}}_2^-, \hat{\boldsymbol{\xi}}_2)$ a tiempo $t - \delta t$, con $\delta t \sim \mathcal{O}\left(\frac{\sigma}{\|\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1\|}\right)$. Si se consideran colisiones binarias, por conservación de la cantidad de movimiento y energía se pueden encontrar expresiones de $\hat{\boldsymbol{\xi}}_1$ y $\hat{\boldsymbol{\xi}}_2$ en términos $\boldsymbol{\xi}_1$, $\boldsymbol{\xi}_2$ y un vector unitario $\boldsymbol{\alpha}$ [13, 172].

Integrando la ecuación de Liouville sobre $\Omega_{1,2}$ se obtiene una expresión en términos de \mathcal{F}_2 , \mathcal{F}_3 y la fuerza de interacción entre partículas. No se presentan los detalles de esta ecuación (ver [10]), el procedimiento es similar al realizado para integrar la ecuación de Liouville sobre Ω_1 . Considerando el BGL se obtiene el resultado más relevante de esta expresión, una cota en el error de orden σ al considerar que \mathcal{F}_2 permanece constante para colisiones binarias en toda la trayectoria del espacio de fases durante la colisión [10, 11]. Luego se puede considerar:

$$\mathcal{F}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2^+, t) = \mathcal{F}_2(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\boldsymbol{\xi}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2^-, \hat{\boldsymbol{\xi}}_2, t - \delta t) = \mathcal{F}_1(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\boldsymbol{\xi}}_1, t - \delta t) \mathcal{F}_1(\hat{\mathbf{x}}_2^-, \hat{\boldsymbol{\xi}}_2, t - \delta t)$$

donde se aplica la hipótesis de no correlación en \mathcal{F}_2 previo a la colisión. Si sobre una distancia de orden σ , \mathcal{F}_1 no presenta variaciones apreciables, en el BGL se puede considerar: $(\hat{\mathbf{x}}_2^-, \hat{\mathbf{x}}_1, \mathbf{x}_2^-) \rightarrow \mathbf{x}_1$, y $t - \delta t \rightarrow t$. Luego se tiene:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_1} = \frac{1}{m} \int \left(f(\mathbf{x}_1, \hat{\boldsymbol{\xi}}_1, t) f(\mathbf{x}_1, \hat{\boldsymbol{\xi}}_2, t) - f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) \right) V da d\boldsymbol{\xi}_2 \quad (\text{A.14})$$

donde se define una nueva variable $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = Nm\mathcal{F}_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$. f es una densidad de masa (esperada) en el espacio de fases de una partícula, denominada frecuentemente como función distribución de densidad de una partícula. En forma simplificada, obviando en la

notación la dependencia de f con \mathbf{x}_1 y t :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_1} = \frac{1}{m} \int \left(f(\hat{\boldsymbol{\xi}}_1) f(\hat{\boldsymbol{\xi}}_2) - f(\boldsymbol{\xi}_1) f(\boldsymbol{\xi}_2) \right) V da d\boldsymbol{\xi}_2 \quad (\text{A.15})$$

$\hat{\boldsymbol{\xi}}_1, \hat{\boldsymbol{\xi}}_2, \boldsymbol{\xi}_1$ y $\boldsymbol{\xi}_2$ son todas velocidades de pre-colisiones.

La ecuación (A.14), es una versión de la ecuación de Boltzmann. Como se puede observar, (A.14) es una ecuación no lineal integro-diferencial, el lado izquierdo es una expresión diferencial en t y \mathbf{x} , con $\boldsymbol{\xi}$ como parámetro. El lado derecho, denominado *integral u operador de colisiones* $\mathcal{Q}(f, f)$, es un operador integral en $\boldsymbol{\xi}$, con \mathbf{x} y t como parámetros. Si existe una fuerza externa por unidad de masa \mathcal{G} actuando sobre las partículas, se puede mostrar que se adiciona un término $\mathcal{G} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}$ del lado izquierdo de la ecuación (A.14).

En la literatura, generalmente se escribe el término de colisiones en otras variables. No es la intención de este apéndice dar los detalles para encontrar otras versiones del término de colisiones. El objetivo es mostrar la relación funcional con las variables del problema para resaltar su complejidad. En [11, 13, 88] se puede encontrar una descripción detallada de las hipótesis y procedimientos a seguir para obtener otras versiones del término de colisiones.

En forma reducida la ecuación de Boltzmann se puede escribir como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \mathcal{Q}(f, f) \quad (\text{A.16})$$

donde por simplicidad en la notación se utiliza $\boldsymbol{\xi}$ y \mathbf{x} en lugar de $\boldsymbol{\xi}_1$ y \mathbf{x}_1 .

A.2.2. Función distribución de Maxwell-Boltzmann

La función distribución de Maxwell-Boltzmann f_M es una solución de equilibrio que satisface $\mathcal{Q}(f_M, f_M) = 0$:

$$f_M \equiv \frac{\rho}{(2\pi RT)^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right) \quad (\text{A.17})$$

donde R es la constante del gas ideal, d la dimensión del espacio, y la cantidades macroscópicas ρ , \mathbf{u} , y T son la densidad de masa, velocidad y temperatura respectivamente.

f_M es una función local, depende de variables que pueden ser función del espacio y el tiempo.

A.3. Conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de la dinámica del fluido.

Conocida la función distribución de una partícula, es posible evaluar cantidades macroscópicas. De la definición de f , $f d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi}$ es la masa esperada en un elemento de volumen $d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi}$ centrado en el espacio de fases de una partícula, $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$. Integrando $f d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi}$ en las velocidades se obtiene la masa esperada en un elemento de volumen $d\mathbf{x}$ centrado en \mathbf{x} . Luego la densidad de masa $\rho(\mathbf{x}, t)$ del fluido es:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (\text{A.18})$$

es decir, el momento de orden cero de f . La cantidad de movimiento de un elemento de fluido de volumen $d\mathbf{x}$ se obtiene del momento de primer orden de f como:

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (\text{A.19})$$

o bien

$$(\rho u_i)(\mathbf{x}, t) = \int \xi_i f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad i = 1, \dots, d$$

ρu_i se puede interpretar como flujo de masa en la dirección i .

De la ecuación (A.17) se puede probar:

$$\rho = \int f d\boldsymbol{\xi} = \int f_M d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.20})$$

$$\rho\mathbf{u} = \int \boldsymbol{\xi} f d\boldsymbol{\xi} = \int \boldsymbol{\xi} f_M d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.21})$$

Remplazando (A.17) en (A.20) e integrando se obtiene la igualdad buscada:

$$\int \frac{\rho}{(2\pi RT)^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right) d\boldsymbol{\xi} = \rho \quad (\text{A.22})$$

resultado de la normalización de la función distribución de Maxwell-Boltzmann, con $\frac{1}{(2\pi RT)^{d/2}}$ factor de normalización. Lo mismo se aplica a (A.21), siendo \mathbf{u} la ponderación de $\boldsymbol{\xi}$ con la función distribución. (A.20) y (A.21) se puede considerar una restricción obtenida de satisfacer los invariantes de colisiones en modelos de colisiones del tipo relajación al equilibrio como el BGK (1.2).

Se introduce una velocidad de interés, denominada *peculiar velocity*, que representa la velocidad de una partícula relativa a la macroscópica \mathbf{u} :

$$\boldsymbol{\xi}_r = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u} \quad (\text{A.23})$$

Se considera el flujo de cantidad de movimiento. El flujo en la dirección i de la componente j de la cantidad de movimiento es:

$$\int \xi_i (\xi_j f) d\boldsymbol{\xi} = \int \xi_i \xi_j f d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.24})$$

Se puede observar que el flujo de cantidad de movimiento es un tensor simétrico de segundo orden. Utilizando la velocidad definida en (A.23), se obtiene de (A.24):

$$\int \xi_i \xi_j f d\boldsymbol{\xi} = \int (\xi_{r_i} + u_i)(\xi_{r_j} + u_j) f d\boldsymbol{\xi} = \rho u_i u_j + \int \xi_{r_i} \xi_{r_j} f d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.25})$$

donde se utiliza el resultado (A.18), y $\int \xi_{r_i} f d\boldsymbol{\xi} = 0$. Existe la contribución de dos términos en (A.25): el flujo macroscópico de cantidad de movimiento y un flujo de momento debido al movimiento aleatorio de las partículas. El último término se relaciona al tensor de tensiones, esto se deriva de manera directa por comparación con las ecuaciones de conservación cuando éstas son obtenidas desde la ecuación de Boltzmann. Luego, la componente i, j del tensor de tensiones es:

$$\mathcal{T}_{i,j} = \int \xi_{r_i} \xi_{r_j} f d\boldsymbol{\xi}, \quad i, j = 1, \dots, d \quad (\text{A.26})$$

Se realiza un procedimiento análogo para la densidad y flujo de energía. La densidad de energía es:

$$\frac{1}{2} \int \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi} f \, d\boldsymbol{\xi} = \frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{2} \int \boldsymbol{\xi}_r \cdot \boldsymbol{\xi}_r f \, d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.27})$$

El primer término de (A.27) tiene el sentido macroscópico de densidad de energía cinética, mientras que el segundo término se lo identifica como la energía interna del gas. Se denota con e a la energía interna por unidad de masa, luego la densidad de energía interna ρe es:

$$\rho e = \frac{1}{2} \int \boldsymbol{\xi}_r \cdot \boldsymbol{\xi}_r f \, d\boldsymbol{\xi} \quad (\text{A.28})$$

El flujo de energía en la dirección i es:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int \xi_i \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi} f \, d\boldsymbol{\xi} &= \frac{1}{2} \int \xi_{r_i} \boldsymbol{\xi}_r \cdot \boldsymbol{\xi}_r f \, d\boldsymbol{\xi} + \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \int \xi_{r_i} f \, d\boldsymbol{\xi} + \frac{1}{2} u_i \int \boldsymbol{\xi}_r \cdot \boldsymbol{\xi}_r f \, d\boldsymbol{\xi} + \\ &\quad \frac{1}{2} u_i \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \int f \, d\boldsymbol{\xi} + \int \xi_{r_i} \boldsymbol{\xi}_r \cdot \mathbf{u} f \, d\boldsymbol{\xi} + u_i \int \boldsymbol{\xi}_r \cdot \mathbf{u} f \, d\boldsymbol{\xi} \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Los términos segundo y último del lado derecho de (A.29) son cero, luego utilizando (A.28), (A.26) y (A.18) se tiene:

$$\frac{1}{2} \int \xi_i \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi} f \, d\boldsymbol{\xi} = u_i \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \rho e \right) + u_j \mathcal{T}_{i,j} + \frac{1}{2} \int \xi_{r_i} \boldsymbol{\xi}_r \cdot \boldsymbol{\xi}_r f \, d\boldsymbol{\xi}, \quad i, j = 1, \dots, d \quad (\text{A.30})$$

El primer término de (A.30) es el flujo de energía por convección macroscópica, el segundo se puede interpretar macroscópicamente como el trabajo realizado por las tensiones de corte por unidad de tiempo. El tercer término representa otro tipo de flujo de energía denominado frecuentemente como flujo de calor, y se denota como:

$$\mathbf{q}_i = \frac{1}{2} \int \xi_{r_i} \boldsymbol{\xi}_r \cdot \boldsymbol{\xi}_r f \, d\boldsymbol{\xi}, \quad i = 1, \dots, d \quad (\text{A.31})$$

Igual que en el caso del tensor de tensiones, la identificación de (A.31) con un flujo de calor es por comparación directa con la ecuación macroscópica de conservación.

A.3.1. Ecuaciones de conservación.

Utilizando resultados de la sección A.3 anterior y propiedades del término de colisiones, es posible obtener las ecuaciones de conservación macroscópicas de la masa, cantidad de movimiento y energía desde la ecuación de Boltzmann.

El operador de colisiones tiene la siguiente propiedad [11, 13, 88]:

$$\int \mathcal{Q}(f, f) \psi_j(\boldsymbol{\xi}) \, d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad j = 1, \dots, 5 \quad (\text{A.32})$$

con $\psi_j(\boldsymbol{\xi})$ polinomios en $\boldsymbol{\xi}$ denominados invariantes de colisiones, en particular $\psi_1(\boldsymbol{\xi}) = 1$, $\psi_{2,3,4}(\boldsymbol{\xi}) = \xi_{1,2,3}$, y $\psi_5(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}$.

Considerando la ecuación de Boltzmann (A.14) con fuerzas externas por unidad de masa \mathcal{G} (independientes de $\boldsymbol{\xi}$) actuando sobre las partículas, junto con el resultado (A.32) se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi_j f \, d\boldsymbol{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int \xi_i \psi_j f \, d\boldsymbol{\xi} + \mathcal{G}_i \int \psi_j \frac{\partial f}{\partial \xi_i} \, d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad j = 1, \dots, 5 \quad (\text{A.33})$$

Tomando de manera sucesiva las funciones $\psi_j(\boldsymbol{\xi})$, $j = 1, \dots, 5$ se obtienen las siguientes ecuaciones de conservación.

Conservación de la masa: $\psi_1(\boldsymbol{\xi}) = 1$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j = 0 \quad (\text{A.34})$$

con $\int \frac{\partial f}{\partial \xi_i} d\boldsymbol{\xi} = 0$ por propiedad de f .

Conservación de cantidad de movimiento: $\psi_{2,3,4}(\boldsymbol{\xi}) = \xi_{1,2,3}$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j + \mathcal{T}_{i,j}) - \mathcal{G}_i \rho = 0 \quad (\text{A.35})$$

con $\int \xi_j \frac{\partial f}{\partial \xi_i} d\boldsymbol{\xi} = - \int \delta_{i,j} f d\boldsymbol{\xi}$, y $\delta_{i,j}$ es la función delta de Kronecker.

Conservación de la energía: $\psi_5(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{1}{2} u_j u_j + e \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho u_i \left(\frac{1}{2} u_j u_j + e \right) + u_j \mathcal{T}_{i,j} + q_i \right] - \mathcal{G}_j \rho u_j = 0 \quad (\text{A.36})$$

con $\int \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi} \frac{\partial f}{\partial \xi_i} d\boldsymbol{\xi} = -2 \int \xi_i f d\boldsymbol{\xi}$.

Las ecuaciones macroscópicas de conservación (A.34), (A.35), y (A.36) pueden derivarse también utilizando argumentos de la mecánica del continuo [4–6]. Estas ecuaciones no determinan completamente todas las variables, en \mathbb{R}^3 se dispone de 5 ecuaciones y 14 incógnitas: ρ , \mathbf{u} , $\mathcal{T}_{i,j}$, e , y \mathbf{q} . Para resolverlas es necesario disponer de relaciones constitutivas adicionales para $\mathcal{T}_{i,j}$ y q_i en términos de ρ , \mathbf{u} y e . Existen dos modelos extensamente utilizados en mecánica de fluidos que derivan en conjuntos de ecuaciones denominados: *ecuaciones de Euler* y *ecuaciones de Navier-Stokes* (NS) o *Navier-Stokes-Fourier*. Las ecuaciones de Euler modelan un fluido ideal, se obtienen de las ecuaciones de conservación considerando las siguientes relaciones constitutivas:

$$\mathcal{T}_{i,j} = P \delta_{i,j} \quad , \quad \mathbf{q}_i = 0 \quad (\text{A.37})$$

con P la presión termodinámica del fluido. En este modelo, solo la parte isotrópica del tensor de tensiones es desigual a cero.

Las ecuaciones de Navier-Stokes modelan un fluido viscoso con conducción térmica, se obtienen de las ecuaciones de conservación con las siguientes relaciones constitutivas:

$$\mathcal{T}_{i,j} = P \delta_{i,j} - \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{i,j} \quad (\text{A.38})$$

$$\mathbf{q}_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (\text{A.39})$$

μ y λ son el primer y segundo coeficiente de viscosidad, κ el coeficiente de conductividad térmica. μ , λ , y κ pueden ser funciones de la densidad y la temperatura. μ recibe también el nombre de viscosidad dinámica. No existe una definición uniforme para denominar a λ .

White [5] lo denomina viscosidad volumétrica (o bulk viscosity), mientras que Malvern [7] segundo coeficientes de viscosidad, nomenclatura que se adopta en este trabajo. Malvern [7] denomina a $\mu_B = \lambda + \frac{2\mu}{3}$ como coeficiente de viscosidad volumétrica (o bulk viscosity). Si se adopta la condición de Stokes [5, 7]: $\mu_B = 0$.

Cabe destacar que en la descripción microscópica las relaciones constitutivas no son necesarias. De acuerdo a lo presentado en la sección A.3, $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ contienen la información suficiente para determinar las cantidades macroscópicas: densidad, velocidad, temperatura, tensor de tensiones y flujo de calor.

Apéndice B

Análisis multi-escala de la LBE

Para resolver la ecuación de Boltzmann (BE) en problemas donde son esperables soluciones diferentes a la de equilibrio se utilizan métodos de aproximación. En particular, se utilizan métodos de perturbación con un parámetro que pueda considerarse pequeño en algún límite de interés.

Cuando se trabaja con modelos cinéticos como el método de lattice Boltzmann (LBM) es deseable disponer de un método sistemático que permita verificar consistencia con las ecuaciones de Navier-Stokes (NS). En este trabajo se tiene especial interés en modelos que representan un comportamiento macroscópico equivalente a las ecuaciones de NS. Es decir, el comportamiento (macroscópico) en algún límite particular del LBM es comparable con las ecuaciones de NS. Se dice comparable ya que no es exacto, como se muestra en secciones siguientes.

En este apéndice se presenta un método de análisis multi-escala basado en el de expansión de Chapman-Enskog (ChE) [11–13] para evaluar la consistencia de los modelos cinéticos con las ecuaciones de NS. El análisis asintótico de ChE es un método de perturbación (multi-escala) donde se analizan las diferentes escalas del problema representadas mediante algún parámetro característico. Se utiliza un parámetro proporcional al número de Knudsen Kn ; una relación entre el camino libre medio entre sucesivas colisiones y una escala espacial característica.

B.1. Definición de parámetros, escalas temporales y espaciales.

La ecuación de NS típicamente modela advección y difusión en un medio fluido. Los fenómenos macroscópicos advectivos se caracterizan por efectos no lineales y de presión tales como propagaciones acústicas; los de difusión por efectos difusivos lineales tales como amortiguamiento viscoso. Ambos están contenidos en la descripción microscópica del problema y tienen origen en dos escalas temporales diferentes.

Se introduce un parámetro ϵ para cuantificar las escalas del problema. ϵ se define como la relación entre una escala microscópica y una macroscópica características del problema. Por definición, ϵ puede considerarse proporcional a Kn . $\epsilon \ll 1$ es el límite de interés donde se considera válida la descripción hidrodinámica del movimiento colectivo de partículas microscópicas.

Para diferenciar las escalas temporales es útil analizar el problema como se presenta en [18, 173, 174]. [18] consideran tres fenómenos que pueden distinguirse respecto a las

escalas de tiempo en que ocurren: relajación hacia el equilibrio local en escalas temporales de orden ϵ ; procesos de advección y ondas de sonido en escalas temporales de orden ϵ^{-1} ; y procesos de difusión en escalas temporales de orden ϵ^{-2} .

Se introducen variables auxiliares tal que las escalas de interés en estas nuevas variables sean $\mathcal{O}(1)$. Estos métodos se denominan de análisis o expansión multi-escala y es una herramienta de aproximación sistemática para analizar el comportamiento del problema en escalas dispares. Utilizando tres variables auxiliares:

$$t_1 = \epsilon t \quad , \quad t_2 = \epsilon^2 t \quad ; \quad \mathbf{x}_1 = \epsilon \mathbf{x} \quad (\text{B.1})$$

t_1 y \mathbf{x}_1 son $\mathcal{O}(1)$ cuando t y \mathbf{x} son aproximadamente ϵ^{-1} , mientras que t_2 es $\mathcal{O}(1)$ cuando $t \sim \epsilon^{-2}$. Con estas variables auxiliares es posible escribir $f(\mathbf{x}, t) \rightarrow f(\mathbf{x}_1, t_1, t_2)$. Las variables dinámicas del fluido también dependen de \mathbf{x}_1, t_1 y t_2 . t_1 y t_2 no son variables independientes ya que están relacionadas a través de t , son dos expresiones de la misma variable t en diferentes escalas.

Con estas relaciones funcionales, la derivada espacial y temporal de las variables dinámicas del fluido y de $f(\mathbf{x}_1, t_1, t_2)$ se expresa de manera general como:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \epsilon \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} \quad (\text{B.2})$$

Las expresiones (B.2) se pueden obtener utilizando métodos estándar de problemas dinámicos [174, 175].

La introducción de las dos escalas temporales permite la recuperación de las ecuaciones de NS compresibles. Si se considera solo la primer escala se obtiene la ecuación de Euler compresible. Considerando únicamente la segunda escala temporal, escalas difusivas, se recupera la ecuación de NS incompresible [40, 57, 59].

El método de ChE [11–13, 88] propone soluciones de la forma:

$$f(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon^i f^i(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t) \quad (\text{B.3})$$

expansiones de la función distribución alrededor de la distribución de equilibrio, con

$$\int f^i(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t) \psi_j(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = 0 \quad , \quad i = 1, \dots, \infty \quad , \quad j = 1, \dots, 5 \quad (\text{B.4})$$

donde $\psi_j(\boldsymbol{\xi})$ se define en la sección A.3.1 (ecuación (A.32)); $f^0(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t) = f_M(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t)$. Esta expresión es válida también para el caso discreto reemplazando $f^i(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t)$ por $f_j^i(\mathbf{x}, t)$, $i = 0, 1, 2, \dots$, $j \in \mathcal{N}_q$, y $f_j^0(\mathbf{x}, t) = f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)$. Es frecuente escribir (B.3) como:

$$f(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t) = f^{eq}(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t) + f^{neq}(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t) \quad (\text{B.5})$$

con $f^{neq}(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \epsilon^i f^i(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, t)$ denominada *función distribución de no-equilibrio*.

B.1.1. Diferentes escalas en la ecuación de lattice Boltzmann.

Por simplicidad se reescribe la ecuación de lattice Boltzmann (LBE), de la expresión (2.27) en forma escalar se tiene:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\mathcal{C}_{ij}(f_j(\mathbf{x}, t) - f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad ; \quad i, j = 0, \dots, q-1. \quad (\text{B.6})$$

Expandiendo en Taylor el término del lado izquierdo de (B.6), despreciando términos $\mathcal{O}(\delta\mathbf{x}^3, \delta t^3)$ se obtiene (Notar que $f_i : (\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$):

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \delta t [\partial_t f_i(\mathbf{x}, t) + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} f_i(\mathbf{x}, t)] + \frac{\delta t^2}{2} [\partial_t \partial_t f_i(\mathbf{x}, t) + 2c_{i\alpha} \partial_t \partial_{x_\alpha} f_i(\mathbf{x}, t) + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta} f_i(\mathbf{x}, t)] + \mathcal{O}(\delta\mathbf{x}^3, \delta t^3) \quad (\text{B.7})$$

con $\alpha, \beta = 1, \dots, d$, y c_{ij} la j -ésima componente de la velocidad discreta \mathbf{c}_i . Por simplicidad se utiliza la notación:

$$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}, \quad \partial_{x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \quad (\text{B.8})$$

Introduciendo en (B.7) la expansión (B.3) para $f_i(\mathbf{x}, t) = f_i$, se obtiene:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) = (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + \delta t [\partial_t (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2)] + \frac{\delta t^2}{2} [\partial_t \partial_t (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + 2c_{i\alpha} \partial_t \partial_{x_\alpha} (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta} (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2)] + \mathcal{O}(\delta\mathbf{x}^3, \delta t^3) \quad (\text{B.9})$$

aplicando (B.3) para f_i en el término del lado derecho de (B.6) se tiene:

$$C_{ij}(\epsilon f_j^1(\mathbf{x}, t) + \epsilon^2 f_j^2(\mathbf{x}, t) + \dots) \quad (\text{B.10})$$

Utilizando el modelo BGK en (B.10), reemplazando (B.9) y (B.3) para f_i y despreciando términos $\mathcal{O}(\delta\mathbf{x}^3, \delta t^3)$ se tiene de (B.6):

$$\delta t [\partial_t (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2)] + \frac{\delta t^2}{2} [\partial_t \partial_t (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + 2c_{i\alpha} \partial_t \partial_{x_\alpha} (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta} (f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2)] + \frac{1}{\tau} (\epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) = 0 \quad (\text{B.11})$$

En la expresión (B.11) existen términos donde es necesario evaluar $\partial_t f_i^j, j = 0, 1, \dots$. Utilizando la expresión de la derivada temporal introducida en (B.2), y conservando términos de hasta orden ϵ^2 se tiene:

$$\delta t (\epsilon (\partial_{t_1} f_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} f_i^0) + \epsilon^2 (\partial_{t_1} f_i^1 + \partial_{t_2} f_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} f_i^1) + \dots) + \frac{\delta t^2}{2} [\epsilon^2 (\partial_{t_1} \partial_{t_1} f_i^0 + 2c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} \partial_{t_1} f_i^0 + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta} f_i^0) + \dots] + \frac{1}{\tau} (\epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) = 0 \quad (\text{B.12})$$

Luego para cada orden de magnitud se debe satisfacer la ecuación (B.12), a orden ϵ se tiene:

$$\partial_{t_1} f_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} f_i^0 + \frac{1}{\tau \delta t} f_i^1 = 0 \quad (\text{B.13})$$

a orden ϵ^2 :

$$\partial_{t_1} f_i^1 + \partial_{t_2} f_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} f_i^1 + \frac{\delta t}{2} [\partial_{t_1} \partial_{t_1} f_i^0 + 2c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} \partial_{t_1} f_i^0 + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta} f_i^0] + \frac{1}{\tau \delta t} f_i^2 = 0 \quad (\text{B.14})$$

De (B.13) se obtiene un resultado utilizado en los capítulos 3 y 5 que determina el valor de f_i^1 en función de f_i^0 :

$$f_i^1 = -\tau \delta t (\partial_{t_1} f_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} f_i^0) \quad (\text{B.15})$$

Especial cuidado se debe tener al comparar o utilizar esta expresión respecto a las presentadas en la literatura. Al derivar (B.15) surgen naturalmente factores δt ya que se asume un parámetro del problema sin valor particular asignado. Es frecuente no encontrar este factor en la literatura ya que usualmente $\delta t = 1$.

B.1.2. Algunas propiedades de simetría del LBM.

Por simetría en los esquemas de velocidades utilizados en el LBM es posible obtener las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} w_i &= 1 \quad , \quad \sum_{i \in \mathcal{N}_q} w_i c_{i\alpha} = 0 \\ \sum_{i \in \mathcal{N}_q} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \quad , \quad \sum_{i \in \mathcal{N}_q} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = 0 \\ \sum_{i \in \mathcal{N}_q} w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\psi} &= c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\psi} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\psi} + \delta_{\alpha\psi} \delta_{\beta\gamma}) \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

con $c_s^2 = \frac{c}{\sqrt{3}}$ la velocidad del sonido del modelo.

B.2. Ecuaciones de Navier-Stokes desde LBM-BGK

Se obtienen algunos resultados intermedios que se utilizarán luego para encontrar una aproximación a las ecuaciones de NS. Se toman momentos de orden cero y primer orden sobre las expresiones (B.13) y (B.14) a diferentes escalas en ϵ .

Momento de orden cero sobre (B.13)

$$\partial_{t_1} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} f_i^0 + \partial_{x_\alpha} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i\alpha} f_i^0 = -\frac{1}{\tau \delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} f_i^1 \quad (\text{B.17})$$

Utilizando (B.4) y las ecuaciones de conservación (2.22) se tiene:

$$\partial_{t_1} \rho + \partial_{x_\alpha} \rho u_\alpha = 0 \quad (\text{B.18})$$

una ecuación macroscópica de continuidad para la escala temporal t_1 .

Momento de orden cero sobre (B.14) Tomando momento de orden cero sobre (B.14), utilizando (B.4) y las ecuaciones de conservación (2.22):

$$\partial_{t_2} \rho + \frac{\delta t}{2} \partial_{x_\alpha} \left[\partial_{t_1} \rho u_\alpha + \partial_{x_\beta} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^0 \right] = 0 \quad (\text{B.19})$$

donde se utiliza el resultado de (B.18):

$$\partial_{t_1} \partial_{t_1} \rho = -\partial_{t_1} \partial_{x_\alpha} \rho u_\alpha \quad (\text{B.20})$$

Momento de primer orden sobre (B.13)

$$\partial_{t_1} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} f_i^0 + \partial_{x_\alpha} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\alpha} c_{i_\gamma} f_i^0 + \frac{1}{\tau \delta t} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} f_i^1 = 0 \quad (\text{B.21})$$

Luego:

$$\partial_{t_1} \rho u_\gamma + \partial_{x_\alpha} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\alpha} c_{i_\gamma} f_i^0 = 0 \quad (\text{B.22})$$

Momento de primer orden sobre (B.14) Tomando momento de primer orden sobre (B.14), utilizando (B.4) y las ecuaciones de conservación (2.22) se tiene:

$$\begin{aligned} \partial_{t_2} \rho u_\gamma + \partial_{x_\alpha} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} f_i^1 + \frac{\delta t}{2} \left[\partial_{t_1} \partial_{t_1} \rho u_\gamma + \right. \\ \left. + 2 \partial_{x_\alpha} \partial_{t_1} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} f_i^0 + \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} c_{i_\beta} f_i^0 \right] = 0 \quad (\text{B.23}) \end{aligned}$$

B.2.1. Conservación macroscópica de la masa

Se utilizan los resultados parciales obtenidos en la sección anterior para encontrar una expresión a diferentes ordenes en ϵ sobre la conservación de la masa. Se observa de (B.19) que el término entre $[\cdot]$ es igual a (B.22), obteniendo:

$$\partial_{t_2} \rho = 0 \quad (\text{B.24})$$

Resultado esperable ya que las variaciones temporales en la densidad ocurren en la escala temporal advectiva. La variación temporal de la densidad en escalas temporales difusivas es cero. De (B.2) y el resultado (B.24) se obtiene la ecuación de conservación macroscópica de la masa:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha \rho u_\alpha = 0 \quad (\text{B.25})$$

La expresión (B.25) es una ecuación de conservación a primer orden en ϵ , en la escala temporal convectiva. Esto implica que en la escala t_1 existe un movimiento y transporte de partículas a nivel microscópico tal que se satisface a nivel macroscópico la ecuación de conservación (B.25). En los procesos difusivos existe un movimiento de partículas sin un aporte neto al transporte de masa macroscópico que genere cambios temporales en la densidad, como se obtiene del resultado (B.24).

B.2.2. Conservación macroscópica de cantidad de movimiento

Para recuperar la ecuación de conservación de cantidad de movimiento se utilizan algunos resultados parciales obtenidos en secciones anteriores. Sumando las expresiones

(B.23) y (B.22) considerando ordenes ϵ adecuados se obtiene:

$$\partial_t \rho u_\gamma + \partial_{x_\alpha} \left[\sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\alpha} c_{i_\gamma} f_i^0 + \epsilon \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} f_i^1 + \frac{\delta t}{2} \epsilon \left(\partial_{t_1} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\alpha} c_{i_\gamma} f_i^0 + \partial_{x_\beta} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} c_{i_\beta} f_i^0 \right) \right] = 0 \quad (\text{B.26})$$

donde se reescribe (B.23) utilizando (B.22):

$$\partial_{t_1} \partial_{t_1} \rho u_\gamma = -\partial_{t_1} \partial_{x_\alpha} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\alpha} c_{i_\gamma} f_i^0$$

y se utiliza la expansión multi-escala (B.2).

Para evaluar cada uno de los sumandos dentro de $[\cdot]$ en (B.26) se debe explicitar f_i^0 (de (2.6)) y encontrar una expresión para f_i^1 . Para el primer término de $[\cdot]$ en (B.26) se tiene:

$$\sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\alpha} c_{i_\gamma} f_i^0 = c_s^2 \rho \delta_{\gamma\alpha} + \rho u_\gamma u_\alpha \quad (\text{B.27})$$

La variación temporal de éste término en (B.26) es:

$$\partial_{t_1} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\alpha} c_{i_\gamma} f_i^0 = c_s^2 \partial_{t_1} \rho \delta_{\alpha\gamma} - c_s^2 (u_\alpha \partial_{x_\alpha} \rho \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \partial_{x_\gamma} \rho \delta_{\gamma\alpha}) \quad (\text{B.28})$$

donde se utiliza (B.22) con (B.27) y se descartan términos de $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$. El último término es:

$$\begin{aligned} \partial_{x_\beta} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} c_{i_\beta} f_i^0 &= \partial_{x_\beta} \frac{1}{3} c^2 \rho u_\psi (\delta_{\gamma\alpha} \delta_{\beta\psi} + \delta_{\gamma\beta} \delta_{\alpha\psi} + \delta_{\gamma\psi} \delta_{\alpha\beta}) = \\ &= c_s^2 (\partial_{x_\beta} (\rho u_\beta) \delta_{\gamma\alpha} + \partial_{x_\gamma} (\rho u_\alpha) + \partial_{x_\alpha} (\rho u_\gamma)) \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

donde, por simetría del esquema de velocidades en el LBM, el único término que sobrevive en la sumatoria es el correspondiente al segundo sumando en la expresión discreta para f_i^0 ($\frac{3}{c^2} c_{i_\psi} u_\psi$).

Para el segundo sumando en $[\cdot]$ en (B.26), utilizando el resultado (B.15), se tiene:

$$\sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} f_i^1 = -\delta t \tau c_s^2 \rho (\partial_{x_\alpha} u_\gamma + \partial_{x_\gamma} u_\alpha) \quad (\text{B.30})$$

Para llegar al resultado (B.30) es necesario realizar varias hipótesis sobre las diferentes expresiones intermedias encontradas al remplazar f^1 por la ecuación (B.15) y evaluar la expresión del lado izquierdo de (B.30). De (B.15) y la expresión discreta para la función de equilibrio se tiene:

$$\sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} f_i^1 = -\tau \delta t \left(\partial_{t_1} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} f_i^0 + \partial_{x_\beta} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} c_{i_\beta} f_i^0 \right) \quad (\text{B.31})$$

El segundo término del lado derecho de (B.31) ya fue evaluado en (B.29). Para el primer

término, reemplazando f_i^0 y utilizando propiedades de simetría se tiene:

$$\partial_{t_1} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} f_i^0 = \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} w_i \left(\partial_{t_1} \rho + \frac{9}{2c_s^4} c_{i_\beta} c_{i_\psi} \partial_{t_1} (\rho u_\beta u_\psi) - \frac{3}{2c_s^2} \partial_{t_1} (\rho u_\beta u_\beta) \right) \quad (\text{B.32})$$

Se buscan expresiones para reemplazar los términos que contienen derivadas temporales en la ecuación (B.32). Se utiliza (B.18) para reescribir el primer sumando del lado derecho de (B.32). El segundo término de (B.32) se reescribe:

$$\partial_{t_1} (\rho u_\beta u_\psi) \cong u_\psi \partial_{t_1} (\rho u_\beta) + u_\beta \partial_{t_1} (\rho u_\psi) \quad (\text{B.33})$$

donde se considera $\partial_{t_1} \rho \sim \mathcal{O}(\text{Ma})$ y se desprecia el término $u_\beta u_\psi \partial_{t_1} \rho \sim \mathcal{O}(\text{Ma}^3)$. Luego utilizando (B.27) en (B.22) y reemplazando en la anterior se tiene (despreciando nuevamente términos $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$):

$$c_{i_\beta} c_{i_\psi} \partial_{t_1} (\rho u_\beta u_\psi) \cong -2c_{i_\alpha} c_{i_\psi} u_\psi \partial_{x_\alpha} c_s^2 \rho \quad (\text{B.34})$$

El tercer término de (B.32) se reescribe como:

$$\partial_{t_1} \rho u_\beta u_\beta \cong 2u_\beta \partial_{t_1} (\rho u_\beta) \quad (\text{B.35})$$

donde no se considera $u_\beta u_\beta \partial_{t_1} \rho \sim \mathcal{O}(\text{Ma}^3)$. Utilizando el resultado (B.22) en la anterior y despreciando términos $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$ se tiene:

$$\partial_{t_1} \rho u_\beta u_\beta \cong -2u_\beta \partial_{x_\alpha} c_s^2 \rho \delta_{\beta\alpha} \quad (\text{B.36})$$

Luego (B.32) es:

$$\begin{aligned} \partial_{t_1} \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} f_i^0 &= - \sum_{i \in \mathcal{N}_q} c_{i_\gamma} c_{i_\alpha} w_i \left(\rho \partial_{x_\psi} u_\psi + \frac{1}{c_s^2} c_{i_\beta} c_{i_\psi} u_\psi \partial_{x_\beta} \rho \right) = \\ &= - \rho c_s^2 \delta_{\alpha\gamma} \partial_{x_\psi} u_\psi - c_s^2 \left(u_\psi \partial_{x_\psi} \rho \delta_{\gamma\alpha} + u_\alpha \partial_{x_\gamma} \rho + u_\gamma \partial_{x_\alpha} \rho \right) \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

Combinando (B.37) y (B.29) en (B.31) se obtiene el resultado presentado en (B.30).

Reemplazando en (B.26) los resultados parciales obtenidos, utilizando (B.2) y reordenando la expresión resultante se obtiene la ecuación de Navier-Stokes buscada:

$$\partial_t (\rho u_\gamma) + \partial_{x_\alpha} \left[\rho u_\gamma u_\alpha + c_s^2 \rho \delta_{\gamma\alpha} - \delta t c_s^2 \rho \left(\tau - \frac{1}{2} \right) (\partial_{x_\alpha} u_\gamma + \partial_{x_\gamma} u_\alpha) \right] \quad (\text{B.38})$$

Se puede apreciar de (B.38), por comparación con la ecuación presentada en (A.35) con (A.38) que la viscosidad cinemática es:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} = c_s^2 \delta t \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{B.39})$$

y la presión:

$$P = \rho c_s^2 \quad (\text{B.40})$$

Como resultado adicional, se observa que en el modelo LBM-BGK el segundo coeficiente de viscosidad no es un parámetro libre del problema ya que $\lambda = 0$.

El resultado encontrado muestra que el LBM-BGK resuelve asintóticamente la ecuación macroscópica de NS a bajos números de Ma. Las ecuaciones de conservación encontradas no son exactas, no se consideran términos de orden iguales o superiores a: $\mathcal{O}(\delta \mathbf{x}^3)$ y $\mathcal{O}(\delta t^3)$ desde la expansión (B.7), $\mathcal{O}(\epsilon^3)$ ya que se conservan hasta ϵ^2 , y $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$.

La validez del análisis multi-escala de ChE es cuestionada [31]. Este método se basa en que existen dos escalas espaciales diferentes en el fluido: escalas cinéticas (del orden del camino libre entre colisiones) y escalas hidrodinámicas, donde la relación entre ambas es el número de Knudsen. En el LBM, las escalas cinéticas son típicamente del orden del espaciamiento de grilla. Luego al modelar el fluido utilizando unos pocos puntos de grilla, no existe esta separación entre las escalas requerida por el análisis multi-escala de ChE.

B.3. Ecuaciones de Navier-Stokes desde LBM-MRT

En esta sección¹ se busca recuperar la ecuación de Navier-Stokes utilizando el modelo LBM-MRT. El resultado más relevante obtenido mediante la expansión multi-escala con este modelo del operador de colisiones es la recuperación de un término adicional vinculado al segundo coeficiente de viscosidad. Luego en el LBM-MRT, a diferencia del LBM-SRT, el segundo coeficiente de viscosidad es un parámetro libre.

Utilizando el modelo MRT de la sección 2.2 en (B.10), reemplazando (B.9) y (B.3) para f_i y despreciando términos $\mathcal{O}(\delta\mathbf{x}^3, \delta t^3)$ se tiene de (B.6):

$$\begin{aligned} \delta t [\partial_t(f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha}(f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2)] + \\ + \frac{\delta t^2}{2} [\partial_t \partial_t(f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + 2c_{i\alpha} \partial_t \partial_{x_\alpha}(f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2) + \\ + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta}(f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2)] = - \sum_{j \in \mathcal{N}_q} \mathcal{C}_{ij} (\epsilon f_j^1 + \epsilon^2 f_j^2) \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

con \mathcal{C}_{ij} el operador de colisiones del modelo LBM-MRT. Utilizando la expresión (B.2) de la derivada temporal se obtiene a orden ϵ :

$$\partial_{t_1} f_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} f_i^0 = - \frac{1}{\delta t} \sum_{j \in \mathcal{N}_q} \mathcal{C}_{ij} f_i^1 \quad (\text{B.42})$$

en el espacio de los momentos:

$$(\partial_{t_1} + \mathbf{M} \hat{\mathbf{c}}_\alpha \mathbf{M}^{-1} \partial_{x_\alpha}) \mathbf{m}^0 = - \frac{1}{\delta t} \mathbf{S} \mathbf{m}^1 \quad (\text{B.43})$$

con $\mathbf{m}^i = \mathbf{M} \mathbf{f}^i$, y $\hat{\mathbf{c}}_\alpha$ matrices diagonales de la forma: $\hat{\mathbf{c}}_\alpha = \text{diag}(c_{0\alpha}, c_{1\alpha}, \dots, c_{(Q-1)\alpha})$. A orden ϵ^2 :

$$\begin{aligned} \partial_{t_1} f_i^1 + \partial_{t_2} f_i^0 + c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} f_i^1 + \frac{\delta t}{2} [\partial_{t_1} \partial_{t_1} f_i^0 + \\ + 2c_{i\alpha} \partial_{x_\alpha} \partial_{t_1} f_i^0 + c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta} f_i^0] = \frac{1}{\delta t} \sum_{j \in \mathcal{N}_q} \mathcal{C}_{ij} f_i^2 \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

en el espacio de los momentos:

$$\partial_{t_2} \mathbf{m}^0 + (\partial_{t_1} + \mathbf{M} \hat{\mathbf{c}}_\alpha \mathbf{M}^{-1} \partial_{x_\alpha}) \left(\mathbf{m}^1 - \frac{1}{2} \mathbf{S} \mathbf{m}^1 \right) = - \frac{1}{\delta t} \mathbf{S} \mathbf{m}^2 \quad (\text{B.45})$$

Por claridad y simplicidad se utiliza el modelo D2Q9 con coordenadas espaciales x e y .

¹Las variables y parámetros que se utilizan y no se redefinen en esta sección, fueron presentados en el capítulo 2.

Los otros modelos D3Q15, D3Q19 y D3Q27 no se explicitan pero siguen procedimientos similares.

Expandiendo (B.43) en componentes se obtiene:

$$\partial_{t_1}\rho + \partial_x(\rho u_x) + \partial_y(\rho u_y) = 0 \quad (\text{B.46})$$

$$-2c^2\partial_{t_1}\rho - 3\partial_{t_1}(\rho u_x^2 + \rho u_y^2) = -\frac{s_2}{\delta t}m_2^1 \quad (\text{B.47})$$

$$c^4\partial_{t_1}\rho - 3\partial_{t_1}c^2\rho(u_x^2 + u_y^2) - c^4\partial_x\rho u_x - c^4\partial_y\rho u_y = -\frac{s_3}{\delta t}m_3^1 \quad (\text{B.48})$$

$$\partial_{t_1}(\rho u_x) + \partial_x\left(\rho u_x^2 + \frac{c^2}{3}\rho\right) + \partial_y(\rho u_x u_y) = 0 \quad (\text{B.49})$$

$$-c^2\partial_{t_1}(\rho u_x) - \frac{c^2}{3}\partial_x\rho(3u_x^2 - 3u_y^2 + c^2) + c^2\partial_y(\rho u_x u_y) = -\frac{s_5}{\delta t}m_5^1 \quad (\text{B.50})$$

$$\partial_{t_1}(\rho u_y) + \partial_y\left(\rho u_y^2 + \frac{c^2}{3}\rho\right) + \partial_x(\rho u_x u_y) = 0 \quad (\text{B.51})$$

$$-c^2\partial_{t_1}(\rho u_y) + c^2\partial_x(\rho u_x u_y) - \frac{c^2}{3}\partial_y\rho(-3u_x^2 + 3u_y^2 + c^2) = -\frac{s_7}{\delta t}m_7^1 \quad (\text{B.52})$$

$$\partial_{t_1}(\rho(u_x^2 - u_y^2)) + \frac{2}{3}c^2\partial_x(\rho u_x) - \frac{2}{3}c^2\partial_y(\rho u_y) = -\frac{s_8}{\delta t}m_8^1 \quad (\text{B.53})$$

$$\partial_{t_1}(\rho u_x u_y) + \frac{1}{3}c^2\partial_x(\rho u_y) + \frac{1}{3}c^2\partial_y(\rho u_x) = -\frac{s_9}{\delta t}m_9^1 \quad (\text{B.54})$$

Expandiendo (B.45) se obtienen las siguientes expresiones de interés:

$$\partial_{t_2}\rho = 0 \quad (\text{B.55})$$

$$\partial_{t_2}(\rho u_1) + \frac{1}{6}\partial_x(m_2^1 + 3m_8^1) + \partial_y m_9^1 - \frac{1}{12}\partial_x(s_2 m_2^1 + 3s_8 m_8^1) - \frac{1}{2}\partial_y(s_9 m_9^1) = 0 \quad (\text{B.56})$$

$$\partial_{t_2}(\rho u_2) + \frac{1}{6}\partial_y(m_2^1 - 3m_8^1) + \partial_x m_9^1 - \frac{1}{12}\partial_y(s_2 m_2^1 - 3s_8 m_8^1) - \frac{1}{2}\partial_x(s_9 m_9^1) = 0 \quad (\text{B.57})$$

B.3.1. Conservación macroscópica de la masa

Análogamente al resultado obtenido en (B.24) para el modelo SRT, la ecuación (B.55) implica variación temporal cero de la densidad en la escala temporal difusiva. Luego combinando la ecuación (B.46), (B.55) y (B.2) se obtiene una expresión de conservación macroscópica de la masa:

$$\partial_t\rho + \partial_\alpha\rho u_\alpha = 0 \quad (\text{B.58})$$

La expresión (B.58) es una ecuación de conservación a primer orden en ϵ , en la escala temporal convectiva. Los mismos comentarios de la sección B.2.1 son aplicables en este caso.

B.3.2. Conservación macroscópica de cantidad de movimiento

Para encontrar las ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento se combinan con el orden ϵ adecuado las ecuaciones: (B.49) y (B.56) para la conservación de cantidad de movimiento en la dirección x ; y las (B.51) y (B.57) para la conservación de

cantidad de movimiento en la dirección y .

$$\begin{aligned} \epsilon \partial_{t_1}(\rho u_x) + \epsilon^2 \partial_{t_2}(\rho u_x) + \epsilon \partial_x(\rho u_x u_x) + \epsilon c_s^2 \partial_x \rho + \epsilon \partial_y(\rho u_x u_y) + \\ + \epsilon^2 \frac{1}{6} \partial_x \left(1 - \frac{s_2}{2}\right) m_2^1 + \epsilon^2 \frac{1}{2} \partial_x \left(1 - \frac{s_8}{2}\right) m_8^1 + \epsilon^2 \partial_y \left(1 - \frac{s_9}{2}\right) m_9^1 = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.59})$$

$$\begin{aligned} \epsilon \partial_{t_1}(\rho u_y) + \epsilon^2 \partial_{t_2}(\rho u_y) + \epsilon \partial_y(\rho u_y u_y) + \epsilon c_s^2 \partial_y \rho + \epsilon \partial_x(\rho u_x u_y) + \\ + \epsilon^2 \frac{1}{6} \partial_y \left(1 - \frac{s_2}{2}\right) m_2^1 - \epsilon^2 \frac{1}{2} \partial_y \left(1 - \frac{s_8}{2}\right) m_8^1 + \epsilon^2 \partial_x \left(1 - \frac{s_9}{2}\right) m_9^1 = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

De las ecuaciones anteriores son necesarias expresiones para m_2^1 , m_8^1 , y m_9^1 . De (B.47), (B.53), y (B.54) se tiene:

$$m_2^1 = \frac{\delta t}{s_2} (2c_s^2 \partial_{t_1} \rho - 3\partial_{t_1}(\rho u_x u_x) - 3\partial_{t_1}(\rho u_y u_y)) \quad (\text{B.61})$$

$$m_8^1 = -\frac{\delta t}{s_8} (\partial_{t_1}(\rho u_x u_x) - \partial_{t_1}(\rho u_y u_y) + 2c_s^2 \partial_x(\rho u_x) - 2c_s^2 \partial_y(\rho u_y)) \quad (\text{B.62})$$

$$m_9^1 = -\frac{\delta t}{s_9} (\partial_{t_1}(\rho u_x u_y) + c_s^2 \partial_x(\rho u_y) + c_s^2 \partial_y(\rho u_x)) \quad (\text{B.63})$$

Buscando expresiones alternativas para $\partial_{t_1}(\rho u_x u_x)$, $\partial_{t_1}(\rho u_x u_y)$, y $\partial_{t_1}(\rho u_y u_y)$, se encuentran las siguientes aproximaciones:

$$\partial_{t_1}(\rho u_x u_x) \cong -2u_x c_s^2 \partial_x \rho \quad (\text{B.64})$$

$$\partial_{t_1}(\rho u_y u_y) \cong -2u_y c_s^2 \partial_y \rho \quad (\text{B.65})$$

$$\partial_{t_1}(\rho u_x u_y) \cong -c_s^2 (u_x \partial_y \rho + u_y \partial_x \rho) \quad (\text{B.66})$$

donde se utilizan resultados de los momentos conservados a primer orden en ϵ , y se desprecian términos $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$ y de alto orden de la forma $u_x \partial_x(\rho u_x u_x)$. Reemplazando en (B.61) y operando se obtiene:

$$m_2^1 \cong -\frac{\delta t}{s_2} 2c_s^2 \rho (\partial_x u_x + \partial_y u_y) \quad (\text{B.67})$$

$$m_8^1 \cong -\frac{\delta t}{s_8} 2c_s^2 \rho (\partial_x u_x - \partial_y u_y) \quad (\text{B.68})$$

$$m_9^1 \cong -\frac{\delta t}{s_9} c_s^2 \rho (\partial_x u_y + \partial_y u_x) \quad (\text{B.69})$$

Luego reemplazando estas aproximaciones en (B.59) y (B.60), reordenando y considerando (B.2) se tiene:

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u_x) + \partial_x(\rho u_x u_x) + \partial_y(\rho u_x u_y) + \partial_x c_s^2 \rho - \partial_x \left[\delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_2} - \frac{1}{2} \right) \rho (\partial_x u_x + \partial_y u_y) \right] + \\ - \partial_x \left[\delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \rho (\partial_x u_x - \partial_y u_y) \right] - \partial_y \left[\delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_9} - \frac{1}{2} \right) \rho (\partial_x u_y + \partial_y u_x) \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.70})$$

$$\begin{aligned}
 & \partial_t(\rho u_y) + \partial_x(\rho u_x u_y) + \partial_y(\rho u_y u_y) + \partial_y c_s^2 \rho - \partial_y \left[\delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_2} - \frac{1}{2} \right) \rho (\partial_x u_x + \partial_y u_y) \right] + \\
 & - \partial_y \left[\delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \rho (\partial_y u_y - \partial_x u_x) \right] - \partial_x \left[\delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_9} - \frac{1}{2} \right) \rho (\partial_x u_y + \partial_y u_x) \right] = 0
 \end{aligned} \tag{B.71}$$

De las ecuaciones anteriores se puede observar que $s_8 = s_9$ es necesario para identificarlas con las de NS. Con esta restricción los coeficientes de viscosidad cinemática y volumétrica son:

$$\nu = \delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) = \delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_9} - \frac{1}{2} \right) \tag{B.72}$$

$$\nu_B = \frac{\mu_B}{\rho} = \delta t c_s^2 \left(\frac{1}{s_2} - \frac{1}{2} \right) - \frac{\nu}{3} \tag{B.73}$$

Luego las ecuaciones (B.74) y (B.75) de NS se pueden expresar en la forma clásica como:

$$\begin{aligned}
 & \partial_t(\rho u_x) + \partial_x(\rho u_x u_x) + \partial_y(\rho u_x u_y) + \partial_x c_s^2 \rho \\
 & - \partial_x \left[\mu \left(2\partial_x u_x - \frac{2}{3}(\partial_x u_x + \partial_y u_y) \right) + \mu_B(\partial_x u_x + \partial_y u_y) \right] \\
 & - \partial_y \mu (\partial_x u_y + \partial_y u_x) = 0
 \end{aligned} \tag{B.74}$$

$$\begin{aligned}
 & \partial_t(\rho u_y) + \partial_x(\rho u_x u_y) + \partial_y(\rho u_y u_y) + \partial_y c_s^2 \rho \\
 & - \partial_x \mu (\partial_x u_y + \partial_y u_x) \\
 & - \partial_y \left[\mu \left(2\partial_y u_y - \frac{2}{3}(\partial_x u_x + \partial_y u_y) \right) + \mu_B(\partial_x u_x + \partial_y u_y) \right] = 0
 \end{aligned} \tag{B.75}$$

La presión es igual a la de la ecuación (B.40).

Apéndice C

Detalles varios del LBM y su implementación en $\{LBM\}$

En este apéndice se muestran algunos detalles del LBM y de la implementación en $\{LBM\}$ que por motivos de claridad y simplicidad no se introducen en los capítulos principales. En la sección C.1 se muestran los esquemas de velocidad utilizados en $\{LBM\}$. En la sección C.2 y C.3 se presentan detalles del modelo LBM-MRT para los esquemas de velocidad D3Q15 y D3Q19 respectivamente. En la sección C.4 se dan detalles sobre las condiciones de borde Dirichlet de presión y velocidad en fronteras de geometría regular, una extensión particular del método presentado en la sección 3.2.3.

C.1. Esquemas de velocidad utilizados en $\{LBM\}$

El conjunto de velocidades discretas utilizados en el LBM debe tener la cantidad de velocidades y simetría suficiente para garantizar consistencia con las ecuaciones de NS. Los esquemas de velocidades D1Q3, D2Q9, y D3Q27 son bien entendidos desde la derivación presentada en el capítulo 2 [16], mientras que los esquemas D3Q15 y D3Q19 son introducidos considerando requisitos de simetría [18].

No existe un criterio unificado en la literatura para enumerar las velocidades de los esquemas. En este trabajo se utiliza, para algunos esquemas, una numeración particular que se detalla a continuación. En la figura C.1 se muestra el esquema de velocidad D2Q9 implementado en $\{LBM\}$. Notar que a diferencia de la nomenclatura clásica de la literatura, en este caso se utiliza una numeración antihoraria para las velocidades discretas. En (C.1) se explicitan las direcciones de velocidad discretas, su nomenclatura y los coeficientes o pesos de la cuadratura utilizada en el esquema.

$$\mathbf{e}_i = \frac{\mathbf{c}_i}{c} = \begin{cases} (0, 0) & i = 0 \\ (\pm 1, 0), (0, \pm 1) & i = 1, 5, 3, 7 \\ (\pm 1, \pm 1), (\mp 1, \pm 1) & i = 2, 6, 4, 8 \end{cases} ; \quad w_i = \begin{cases} \frac{4}{9} & i = 0 \\ \frac{1}{9} & i = 1, 5, 3, 7 \\ \frac{1}{36} & i = 2, 6, 4, 8 \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

En la figura C.2 se muestra el esquema de velocidad D3Q15. En (C.2) se presentan las direcciones de velocidad discretas, su nomenclatura y los coeficientes o pesos del esquema.

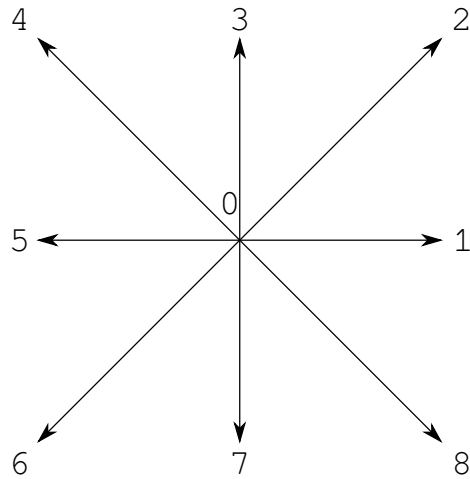


FIGURA C.1: Esquema de velocidad D2Q9 utilizado en $\{LBM\}$.

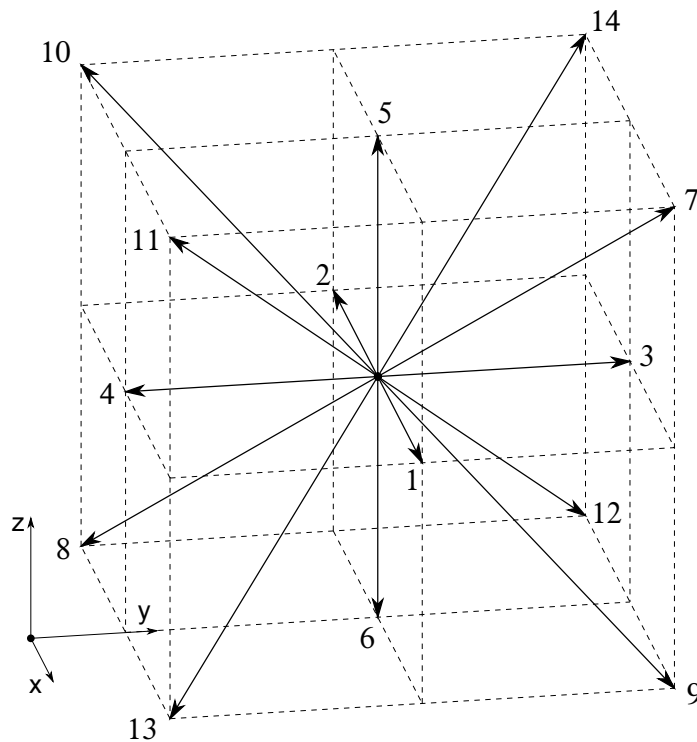
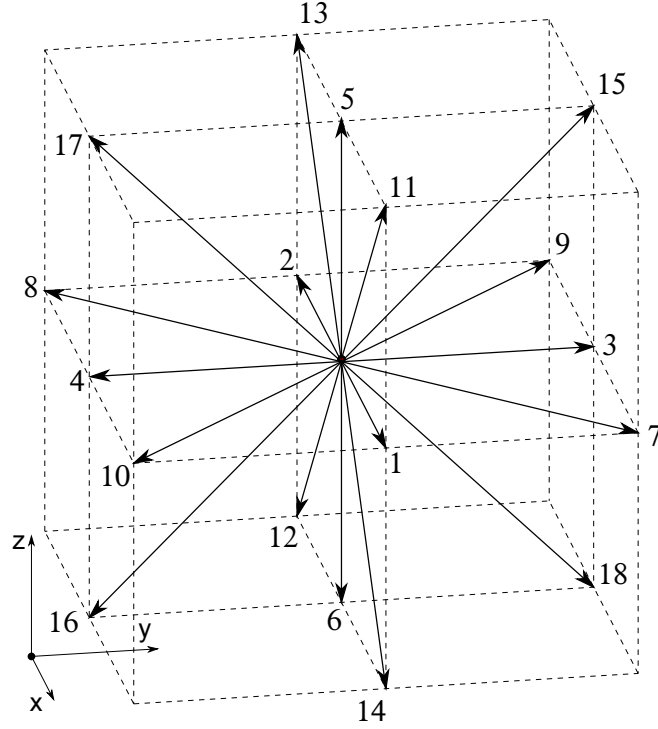


FIGURA C.2: Esquema de velocidad D3Q15 utilizado en $\{LBM\}$.

$$e_i = \frac{\mathbf{c}_i}{c} = \begin{cases} (0, 0, 0) & i = 0 \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1) & i = 1 - 6 \\ (\pm 1, \pm 1, \pm 1), (\pm 1, \pm 1, \mp 1), \\ (\pm 1, \mp 1, \pm 1), (\mp 1, \pm 1, \pm 1) & i = 7 - 14 \end{cases} ; w_i = \begin{cases} \frac{2}{9} & i = 0 \\ \frac{1}{9} & i = 1 - 6 \\ \frac{1}{72} & i = 7 - 14 \end{cases} \quad (C.2)$$

En las Figuras C.3 y C.4 se muestran los esquemas de velocidad D3Q19 y D3Q27. En (C.3) y (C.4) se explicitan las direcciones de velocidad discreta, su nomenclatura y los coeficientes de cada esquema respectivamente.

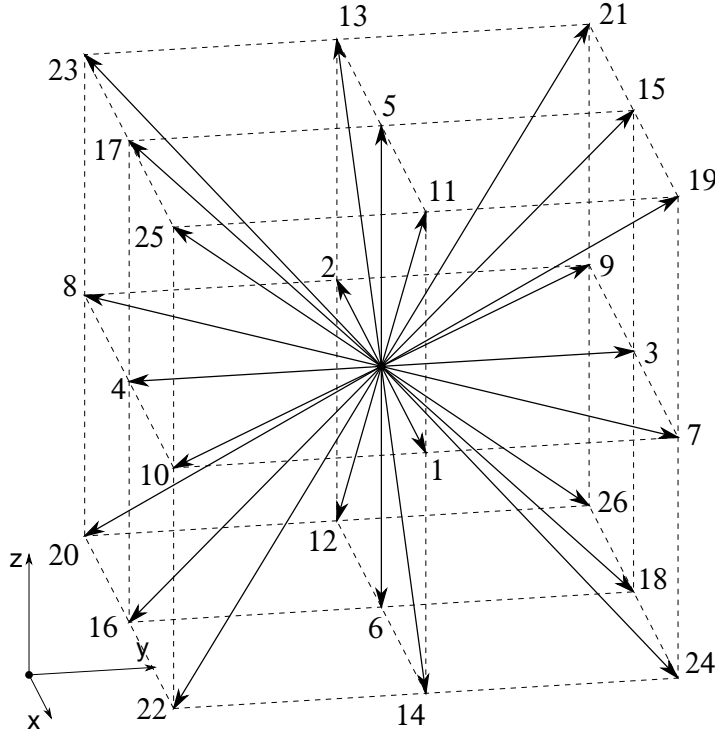

 FIGURA C.3: Esquema de velocidad D3Q19 utilizado en $\{LBM\}$.

$$e_i = \frac{\mathbf{c}_i}{c} = \begin{cases} (0, 0, 0) & i = 0 \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1) & i = 1 - 6 \\ (\pm 1, \pm 1, 0), (\mp 1, \pm 1, 0) & i = 7 - 10, \\ (\pm 1, 0, \pm 1), (\mp 1, 0, \pm 1) & i = 11 - 14, \\ (0, \pm 1, \pm 1), (0, \mp 1, \pm 1) & i = 15 - 18 \end{cases} ; w_i = \begin{cases} \frac{1}{3} & i = 0 \\ \frac{1}{18} & i = 1 - 6 \\ \frac{1}{36} & i = 7 - 18 \end{cases} \quad (C.3)$$

$$e_i = \frac{\mathbf{c}_i}{c} = \begin{cases} (0, 0, 0) & i = 0 \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1) & i = 1 - 6 \\ (\pm 1, \pm 1, 0), (\mp 1, \pm 1, 0) & i = 7 - 10 \\ (\pm 1, 0, \pm 1), (\mp 1, 0, \pm 1) & i = 11 - 14 \\ (0, \pm 1, \pm 1), (0, \mp 1, \pm 1) & i = 15 - 18 \\ (\pm 1, \mp 1, \pm 1), (\mp 1, \pm 1, \pm 1), \\ (\mp 1, \mp 1, \pm 1), (\pm 1, \mp 1, \pm 1) & i = 19 - 26 \end{cases} ; w_i = \begin{cases} \frac{8}{27} & i = 0 \\ \frac{2}{27} & i = 1 - 6 \\ \frac{1}{54} & i = 7 - 18 \\ \frac{1}{216} & i = 19 - 26 \end{cases} \quad (C.4)$$

C.2. LBM-MRT esquema de velocidad D3Q15

Siguiendo el procedimiento propuesto en [30], de igual manera a lo realizado en la sección 2.2.1, se obtienen los autovectores de la matriz de colisiones. \mathbf{M} se determina utilizando el método de ortogonalización de Gram-Schmidt. Los vectores propuestos, que forman los momentos conservados y no conservados, para la base de la matriz de colisiones son:


 FIGURA C.4: Esquema de velocidad D3Q27 utilizado en $\{LBM\}$.

$$\begin{aligned}
 \phi_{1_i} &= 1, \phi_1 = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \\
 \hat{\phi}_{4_i} &= c_{i,1}, \hat{\phi}_4 = (0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1) c \\
 \hat{\phi}_{6_i} &= c_{i,2}, \hat{\phi}_6 = (0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, 1) c \\
 \hat{\phi}_{8_i} &= c_{i,3}, \hat{\phi}_8 = (0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1) c \\
 \hat{\phi}_{2_i} &= c_{i,1}^2 + c_{i,2}^2 + c_{i,3}^2, \hat{\phi}_2 = (0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3) c^2 \\
 \hat{\phi}_{5_i} &= c_{i,1} (c_{i,1}^2 + c_{i,2}^2 + c_{i,3}^2), \hat{\phi}_5 = (0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 3, -3, 3, -3, 3, -3, 3, -3) c^3 \\
 \hat{\phi}_{7_i} &= c_{i,2} (c_{i,1}^2 + c_{i,2}^2 + c_{i,3}^2), \hat{\phi}_7 = (0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 3, -3, 3, -3, -3, 3, -3, 3) c^3 \\
 \hat{\phi}_{9_i} &= c_{i,3} (c_{i,1}^2 + c_{i,2}^2 + c_{i,3}^2), \hat{\phi}_9 = (0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 3, -3, -3, 3, 3, -3, -3, 3) c^3 \\
 \hat{\phi}_{3_i} &= (c_{i,1}^2 + c_{i,2}^2 + c_{i,3}^2)^2, \hat{\phi}_3 = (0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 9, 9, 9, 9, 9, 9, 9, 9) c^4 \\
 \hat{\phi}_{10_i} &= c_{i,1}^2, \hat{\phi}_{10} = (0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) c^2 \\
 \hat{\phi}_{11_i} &= c_{i,2}^2 - c_{i,3}^2, \hat{\phi}_{11} = (0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
 \hat{\phi}_{12_i} &= c_{i,1} c_{i,2}, \hat{\phi}_{12} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1) c^2 \\
 \bar{\phi}_{13_i} &= c_{i,2} c_{i,3}, \bar{\phi}_{13} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, -1, -1, 1, 1) c^2 \\
 \bar{\phi}_{14_i} &= c_{i,1} c_{i,3}, \bar{\phi}_{14} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1) c^2 \\
 \hat{\phi}_{15_i} &= c_{i,1} c_{i,2} c_{i,3}, \hat{\phi}_{15} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1, -1, 1, 1, -1) c^3
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

Se obtiene una base ortogonal del procedimiento de Gram-Schmidt, se introducen los vectores en el orden presentado en (C.5), encontrando:

$$\begin{aligned}
 \phi_1 &= (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \\
 \tilde{\phi}_4 &= (0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1) c \\
 \tilde{\phi}_6 &= (0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, 1) c \\
 \tilde{\phi}_8 &= (0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1) c \\
 \tilde{\phi}_2 &= (-2, -1, -1, -1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) c^2 \\
 \tilde{\phi}_5 &= (0, -4, 4, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1) \frac{5}{2} c^3 \\
 \tilde{\phi}_7 &= (0, 0, 0, -4, 4, 0, 0, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, 1) \frac{5}{2} c^3 \\
 \tilde{\phi}_9 &= (0, 0, 0, 0, 0, -4, 4, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1) \frac{5}{2} c^3 \\
 \tilde{\phi}_3 &= (16, -4, -4, -4, -4, -4, -4, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \frac{15}{2} c^4 \\
 \tilde{\phi}_{10} &= (0, 2, 2, -1, -1, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) 3c^4 \\
 \tilde{\phi}_{11} &= (0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
 \tilde{\phi}_{12} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1) c^2 \\
 \tilde{\phi}_{13} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, -1, -1, 1, 1) c^2 \\
 \tilde{\phi}_{14} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1) c^2 \\
 \tilde{\phi}_{15} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1, -1, 1, 1, -1) c^3
 \end{aligned} \tag{C.6}$$

Multiplicando cada uno de los vectores en (C.6) por una constante escalar, se obtiene \mathbf{M} como se presenta frecuentemente en la literatura [37]:

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \\ \phi_7 \\ \phi_8 \\ \phi_9 \\ \phi_{10} \\ \phi_{11} \\ \phi_{12} \\ \phi_{13} \\ \phi_{14} \\ \phi_{15} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 16 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Notar que el orden de las columnas de \mathbf{M} en (C.2) no se corresponde con las expresiones presentadas en [37]. Las diferencias se deben a que el esquema de velocidades D3Q15, presentado en la sección C.1, no sigue el orden de las velocidades comúnmente utilizado. La disposición de las filas en \mathbf{M} se realiza de acuerdo al criterio seguido en [37].

Los momentos de equilibrio se proponen como una transformación al espacio de momentos de la función distribución de equilibrio, similar a lo presentado en la sección 2.2.1. Se consideran algunos parámetros de ajuste, que luego se establecen siguiendo los criterios presentados en [31, 37]. Los momentos de equilibrio son:

$$\begin{aligned}
 \phi_2^{eq} &= -\rho c^2 + \frac{1}{\rho_0} (j_x^2 + j_y^2 + j_z^2) \\
 \phi_3^{eq} &= w_e \rho c^4 + \frac{w_{ej}}{\rho_0} (j_x^2 + j_y^2 + j_z^2) c^2 \\
 \phi_5^{eq} &= -\frac{7}{3} j_x \\
 \phi_7^{eq} &= -\frac{7}{3} j_y \\
 \phi_9^{eq} &= -\frac{7}{3} j_z \\
 \phi_{10}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} (2j_x^2 - j_y^2 - j_z^2) \\
 \phi_{11}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} (j_y^2 - j_z^2) \\
 \phi_{12}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} j_x j_y \\
 \phi_{13}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} j_y j_z \\
 \phi_{14}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} j_x j_z \\
 \phi_{15}^{eq} &= 0
 \end{aligned} \tag{C.7}$$

donde $j_i = \rho u_i$, $i = x, y, z$ son las componentes de la cantidad de movimiento en la dirección x, y, z respectivamente. Para recuperar el LBM-BGK, $w_e = 1$ y $w_{ej} = -5$. En [37] adoptan $w_e = -1$ y $w_{ej} = 0$ para optimizar la isotropía e invariancia Galileana del modelo. En (C.7) se utiliza ρ_0 para reducir los efectos de compresibilidad, el modelo es cuasi-incompresible. Los valores típicos adoptados y las relaciones que cumplen los diferentes parámetros de relajación del modelo son: $s_2 = 1.6$, $s_3 = 1.2$, $s_5 = 1.6$, $s_{10} = \frac{1}{\tau}$, y $s_{15} = 1.2$; con las relaciones: $s_7 = s_5$, $s_9 = s_5$, $s_{11} = s_{10}$, $s_{12} = s_{10}$, $s_{13} = s_{12}$, y $s_{14} = s_{12}$

C.3. LBM-MRT esquema de velocidad D3Q19

Siguiendo el procedimiento propuesto en [30], de igual manera a lo realizado en la sección C.2, se obtiene la matriz de colisiones **M**. Los vectores propuestos son:

$$\begin{aligned}
 \phi_{1_i} &= 1, \phi_1 = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \\
 \hat{\phi}_{4_i} &= c_{i,x}, \hat{\phi}_4 = (0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 0, 0, 0, 0) c \\
 \hat{\phi}_{6_i} &= c_{i,y}, \hat{\phi}_6 = (0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1) c \\
 \hat{\phi}_{8_i} &= c_{i,z}, \hat{\phi}_8 = (0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1) c \\
 \hat{\phi}_{2_i} &= \|\mathbf{c}_i\|^2, \hat{\phi}_2 = (0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2) c^2 \\
 \hat{\phi}_{5_i} &= c_{i,x} \|\mathbf{c}_i\|^2, \hat{\phi}_5 = (0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 2, -2, -2, 2, 2, -2, -2, 2, 0, 0, 0, 0) c^3 \\
 \hat{\phi}_{7_i} &= c_{i,y} \|\mathbf{c}_i\|^2, \hat{\phi}_7 = (0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 2, -2, 2, -2, 0, 0, 0, 0, 2, -2, -2, 2) c^3 \\
 \hat{\phi}_{9_i} &= c_{i,z} \|\mathbf{c}_i\|^2, \hat{\phi}_9 = (0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 2, -2, 2, -2, 2, -2, 2, -2) c^3 \\
 \hat{\phi}_{3_i} &= \|\mathbf{c}_i\|^4, \hat{\phi}_3 = (0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 4, 4, 4, 4, 4, 4, 4, 4, 4, 4, 4, 4) c^4 \\
 \hat{\phi}_{10_i} &= c_{i,x}^2, \hat{\phi}_{10} = (0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
 \hat{\phi}_{11_i} &= c_{i,x}^2 \|\mathbf{c}_i\|^2, \hat{\phi}_{11} = (0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 0, 0, 0, 0) c^4 \\
 \hat{\phi}_{12_i} &= c_{i,y}^2 - c_{i,z}^2, \hat{\phi}_{12} = (0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
 \hat{\phi}_{13_i} &= (c_{i,y}^2 - c_{i,z}^2) \|\mathbf{c}_i\|^2, \hat{\phi}_{13} = (0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 2, 2, 2, 2, -2, -2, -2, -2, 0, 0, 0, 0) c^4 \\
 \hat{\phi}_{14_i} &= c_{i,x} c_{i,y}, \hat{\phi}_{14} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
 \hat{\phi}_{15_i} &= c_{i,y} c_{i,z}, \hat{\phi}_{15} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1) c^2 \\
 \hat{\phi}_{16_i} &= c_{i,x} c_{i,z}, \hat{\phi}_{16} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
 \hat{\phi}_{17_i} &= c_{i,x} (c_{i,y}^2 - c_{i,z}^2), \hat{\phi}_{17} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1, -1, 1, 1, -1, 0, 0, 0, 0) c^3 \\
 \hat{\phi}_{18_i} &= c_{i,y} (c_{i,z}^2 - c_{i,x}^2), \hat{\phi}_{18} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 1, -1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1) c^3 \\
 \hat{\phi}_{19_i} &= c_{i,z} (c_{i,x}^2 - c_{i,y}^2), \hat{\phi}_{19} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, 1) c^3
 \end{aligned} \tag{C.8}$$

donde:

$$\|\mathbf{c}_i\|^2 = (c_{i,x}^2 + c_{i,y}^2 + c_{i,z}^2) \tag{C.9}$$

Del procedimiento de Gram-Schmidt, y utilizando los vectores (C.8) en el orden presentado, se obtiene la base ortogonal:

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \\
\tilde{\phi}_4 &= (0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 0, 0, 0, 0) c \\
\tilde{\phi}_6 &= (0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1) c \\
\tilde{\phi}_8 &= (0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1) c \\
\tilde{\phi}_2 &= (-30, -11, -11, -11, -11, -11, -11, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 8) 19c^2 \\
\tilde{\phi}_5 &= (0, -4, 4, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 0, 0, 0, 0) 5c^3 \\
\tilde{\phi}_7 &= (0, 0, 0, -4, 4, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1) 5c^3 \\
\tilde{\phi}_9 &= (0, 0, 0, 0, 0, -4, 4, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1) 5c^3 \\
\tilde{\phi}_3 &= (12, -4, -4, -4, -4, -4, -4, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \frac{21}{2}c^4 \\
\tilde{\phi}_{10} &= (0, 2, 2, -1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, -2, -2, -2, -2) 3c^2 \\
\tilde{\phi}_{11} &= (0, -4, -4, 2, 2, 2, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, -2, -2, -2, -2) 9c^4 \\
\tilde{\phi}_{12} &= (0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
\tilde{\phi}_{13} &= (0, 0, 0, -2, -2, 2, 2, 1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1, 0, 0, 0, 0) c^4 \\
\tilde{\phi}_{14} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
\tilde{\phi}_{15} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1) c^2 \\
\tilde{\phi}_{16} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, -1, -1, 0, 0, 0, 0) c^2 \\
\tilde{\phi}_{17} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1, -1, 1, 1, -1, 0, 0, 0, 0) c^3 \\
\tilde{\phi}_{18} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 1, -1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, -1, -1, 1) c^3 \\
\tilde{\phi}_{19} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, 1) c^3
\end{aligned} \tag{C.10}$$

Multiplicando los vectores en (C.10) por una constante escalar, se encuentra \mathbf{M} como se presenta frecuentemente en la literatura [37]:

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \\ \phi_7 \\ \phi_8 \\ \phi_9 \\ \phi_{10} \\ \phi_{11} \\ \phi_{12} \\ \phi_{13} \\ \phi_{14} \\ \phi_{15} \\ \phi_{16} \\ \phi_{17} \\ \phi_{18} \\ \phi_{19} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -30 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 \\ 12 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ 0 & -4 & -4 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & -2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Notar que el orden de las columnas de \mathbf{M} en (C.3) no se corresponde con las expresiones presentadas en [37], y las de la literatura en general. El motivo es el orden y numeración de las velocidades en el esquema D3Q19 que se utiliza (ver sección C.1), difiere del estándar y altera las columnas de \mathbf{M} . La disposición de las filas en \mathbf{M} se realiza de acuerdo al criterio seguido en [37]. Los momentos de equilibrio se proponen como una transformación al espacio de momentos de la función distribución de equilibrio. Adicionalmente se consideran parámetros de ajuste que luego se establecen siguiendo los criterios presentados en [31, 37]. Los momentos de equilibrio son:

$$\begin{aligned}
 \phi_2^{eq} &= -11\rho c^2 + \frac{19}{\rho_0} (j_x^2 + j_y^2 + j_z^2) \\
 \phi_3^{eq} &= w_e c^4 \rho + \frac{w_{ej}}{\rho_0} c^2 (j_x^2 + j_y^2 + j_z^2) \\
 \phi_5^{eq} &= -\frac{2}{3} c^2 j_x \\
 \phi_7^{eq} &= -\frac{2}{3} c^2 j_y \\
 \phi_9^{eq} &= -\frac{2}{3} c^2 j_z \\
 \phi_{10}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} (2j_x^2 - j_y^2 - j_z^2) \\
 \phi_{11}^{eq} &= w_{xx} \frac{c^2}{\rho_0} (2j_x^2 - j_y^2 - j_z^2) \\
 \phi_{12}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} (j_y^2 - j_z^2) \\
 \phi_{13}^{eq} &= w_{xx} \frac{c^2}{\rho_0} (j_y^2 - j_z^2) \\
 \phi_{14}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} j_x j_y \\
 \phi_{15}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} j_y j_z \\
 \phi_{16}^{eq} &= \frac{1}{\rho_0} j_x j_z \\
 \phi_{17}^{eq} &= 0 \\
 \phi_{18}^{eq} &= 0 \\
 \phi_{19}^{eq} &= 0
 \end{aligned} \tag{C.11}$$

Para recuperar el LBM-BGK, $w_e = 3$, $w_{ej} = -\frac{11}{2}$ y $w_{xx} = -\frac{1}{2}$; en [37] proponen $w_e = 0$, $w_{ej} = -\frac{475}{63}$ y $w_{xx} = 0$ para optimizar la isotropía e invariancia Galileana del esquema. En los momentos de equilibrio de (C.7) se utiliza ρ_0 para reducir los efectos de compresibilidad, el modelo es cuasi-incompresible. Los valores típicos adoptados y las relaciones que cumplen los diferentes parámetros de relajación del modelo son: $s_2 = 1.19$, $s_3 = 1.4$, $s_5 = 1.2$, $s_{10} = \frac{1}{\tau}$, y $s_{17} = 1.98$; con las relaciones: $s_{11} = s_3$, $s_7 = s_5$, $s_9 = s_5$, $s_{13} = s_{11}$, $s_{14} = s_{10}$, $s_{15} = s_{10}$, $s_{16} = s_{10}$, $s_{18} = s_{17}$, y $s_{19} = s_{17}$,

C.4. Detalles sobre condiciones de borde Dirichlet de presión y velocidad en fronteras de geometría regular

En esta sección se muestran algunos detalles particulares sobre las condiciones de borde presentadas en la sección 3.2.3. Se considera un problema de fluido tridimensional, la geometría del dominio computacional es una grilla simple definida por un paralelepípedo regular. Se quiere encontrar las expresiones para imponer condiciones de borde de presión o velocidad sobre las fronteras del dominio. Cada superficie plana de la frontera se debe tratar como un caso particular. Lo mismo sobre los 12 bordes convexos y las 8 esquinas convexas formadas de la intersección de dos y tres fronteras regulares (superficies planas) respectivamente.

Se utiliza una combinación de los métodos presentados en [47, 101, 102] para encontrar de forma sistemática restricciones adicionales sobre las variables del problema en la frontera. Por simplicidad se explicitan, utilizando el esquema de velocidad D3Q15 para un modelo LBM cuasi-incompresible, el problema de condiciones de borde Dirichlet en las fronteras del problema de interés (superficies planas, bordes y esquinas convexas). Es posible generalizar a todos los esquemas de velocidad utilizados: D2Q9, D3Q19 y D3Q27.

En la figura C.2 se muestra el esquema de velocidad D3Q15. En (C.2) se muestran las direcciones de velocidad discretas, su nomenclatura y los coeficientes de peso del modelo LBM que se analiza. Por simplicidad en la presentación, se introducen los siguientes conjuntos de índices de velocidades:

$$I_j^+ = \{i : \mathbf{c}_{i,j} > 0\} , \quad I_j^- = \{i : \mathbf{c}_{i,j} < 0\} , \quad I_j^0 = \{i : \mathbf{c}_{i,j} = 0\} ; \quad j = x, y, z \quad (\text{C.12})$$

El tamaño de los conjuntos varia de acuerdo al esquema de velocidad, para el D3Q15 se tiene:

$$\begin{aligned} I_x^+ &= [1, 7, 9, 11, 13] & ; & \quad I_x^- = [2, 8, 10, 12, 14] & \quad ; & \quad I_x^0 = [3, 4, 5, 6] \\ I_y^+ &= [3, 7, 9, 12, 14] & ; & \quad I_y^- = [4, 8, 10, 11, 13] & ; & \quad I_y^0 = [1, 2, 5, 6] \\ I_z^+ &= [5, 7, 10, 11, 14] & ; & \quad I_z^- = [6, 8, 9, 12, 13] & ; & \quad I_z^0 = [1, 2, 3, 4] \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Las fronteras regulares, bordes y esquinas convexas se identifican con un vector normal particular con dirección hacia el interior del dominio. Para ordenar y facilitar la implementación en $\{LBM\}$ estos vectores se numeran según lo presentado en la sección C.5.

Por claridad, en las secciones siguientes se determinan de manera independiente las condiciones de borde en superficies planas, bordes convexas y esquinas convexas.

C.4.1. Fronteras superficies planas

Se considera una superficie con normal en la dirección \mathbf{c}_1 en el esquema D3Q15. Para el resto de las superficies el procedimiento es análogo. En la figura C.5 se muestra de manera esquemática la superficie plana que se analiza junto con el esquema de velocidades D3Q15.

Como se explica en la sección 3.2.3, la determinación de las f_i 's que satisfagan las ecuaciones macroscópicas (2.22) en la frontera es un problema indeterminado. En la literatura se utilizan ecuaciones adicionales, una combinación de cantidades locales conocidas más algún término de corrección. Para cada $f_i \in I_x^+$ se propone una ecuación (3.5) y se adopta $f_i^*(\mathbf{x}, t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t)$. Como se muestra en la sección C.4.4 para un caso simple, esta elección permite recuperar las condiciones de borde propuestas en [46].

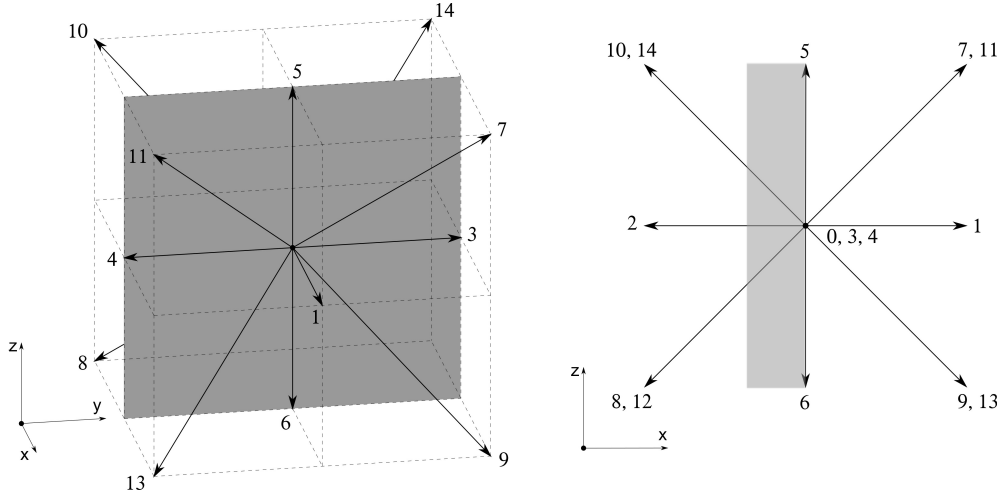


FIGURA C.5: Esquema de una frontera plana con normal en la dirección \mathbf{c}_1 hacia el interior del dominio. A izquierda: esquema D3Q15 en un plano representando la superficie. A derecha: vista en el plano $x-z$ del esquema de velocidad con la superficie de la frontera representada en escala de grises.

C.4.1.1. Frontera de velocidad

De las consideraciones anteriores para una superficie de velocidad, el modelo de fluido cuasi-incompresible y la configuración presentada en la figura C.5, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 f_1 &= f_2 + \frac{q_x}{9c} \quad ; \quad f_7 = f_8 + \frac{1}{72c}(q_x + q_y + q_z) \quad ; \quad f_9 = f_{10} - \frac{1}{72c}(q_x + q_y - q_z) \\
 f_{11} &= f_{12} + \frac{1}{72c}(q_x - q_y + q_z) \quad ; \quad f_{13} = f_{14} + \frac{1}{72c}(q_x - q_y - q_z) \\
 \frac{\rho_0}{c}u_x &= f_1 - f_{10} + f_{11} - f_{12} + f_{13} - f_{14} - f_2 + f_7 - f_8 + f_9 \\
 \frac{\rho_0}{c}u_y &= -f_{10} - f_{11} + f_{12} - f_{13} + f_{14} + f_3 - f_4 + f_7 - f_8 + f_9 \\
 \frac{\rho_0}{c}u_z &= f_{10} + f_{11} - f_{12} - f_{13} + f_{14} + f_5 - f_6 + f_7 - f_8 - f_9
 \end{aligned} \tag{C.14}$$

Del sistema de ecuaciones (C.14) se pueden determinar las variables $f_1, f_7, f_9, f_{11}, f_{13}, q_x, q_y, q_z, \rho$. Las ecuaciones (C.14) se simplifican notablemente al trabajar con un modelo de fluido cuasi-incompresible. Las variables buscadas son:

$$\begin{aligned}
 q_x &= 6\rho_0 u_x \quad ; \quad q_y = 18c(f_4 - f_3) + 18\rho_0 u_y \quad ; \quad q_z = 18c(f_6 - f_5) + 18\rho_0 u_z \\
 f_1 &= f_2 + \frac{2}{3c}\rho_0 u_x \quad ; \quad f_7 = \frac{1}{4}(-f_3 + f_4 - f_5 + f_6) + f_8 + \frac{\rho_0}{12c}(u_x + 3u_y + 3u_z) \\
 f_{13} &= \frac{1}{4}(f_3 - f_4 + f_5 - f_6) + f_{14} + \frac{\rho_0}{12c}(u_x - 3u_y - 3u_z) \\
 f_9 &= \frac{1}{4}(-f_3 + f_4 + f_5 - f_6) + f_{10} + \frac{\rho_0}{12c}(u_x + 3u_y - 3u_z) \\
 f_{11} &= \frac{1}{4}(f_3 - f_4 - f_5 + f_6) + f_{12} + \frac{\rho_0}{12c}(u_x - 3u_y + 3u_z) \tag{C.15}
 \end{aligned}$$

La densidad en la frontera se obtiene de la ecuación 2.22.

C.4.1.2. Frontera de presión

Si la superficie es de presión, la densidad se relaciona con la presión a través de la ecuación de estado, al menos dos componentes de la velocidad deben especificarse (una componente en problemas 2D). Para la superficie con normal en la dirección de \mathbf{c}_1 , las variables a determinar son: $f_1, f_7, f_9, f_{11}, f_{13}, q_x, q_y, q_z, u_x$, y las ecuaciones disponibles:

$$\begin{aligned}
 f_1 &= f_2 + \frac{q_x}{9c} \quad ; \quad f_7 = f_8 + \frac{1}{72c}(q_x + q_y + q_z) \quad ; \quad f_{10} = f_9 - \frac{1}{72c}(q_x + q_y - q_z) \\
 f_{11} &= f_{12} + \frac{1}{72c}(q_x - q_y + q_z) \quad ; \quad f_{13} = f_{14} + \frac{1}{72c}(q_x - q_y - q_z) \\
 \rho &= f_0 + f_1 + f_{10} + f_{11} + f_{12} + f_{13} + f_{14} + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_9 \\
 \frac{\rho_0}{c} u_y &= -f_{10} - f_{11} + f_{12} - f_{13} + f_{14} + f_3 - f_4 + f_7 - f_8 + f_9 \\
 \frac{\rho_0}{c} u_z &= f_{10} + f_{11} - f_{12} - f_{13} + f_{14} + f_5 - f_6 + f_7 - f_8 - f_9 \quad (C.16)
 \end{aligned}$$

Las variables en la frontera que satisfacen la condición de presión son:

$$\begin{aligned}
 q_x &= 6c(-f_0 - 2f_{10} - 2f_{12} - 2f_{14} - 2f_2 - f_3 - f_4 - f_5 - f_6 - 2f_8 + \rho) \\
 q_y &= 18c(f_4 - f_3) + 18\rho_0 u_y \quad ; \quad q_z = 18c(f_6 - f_5) + 18\rho_0 u_z \\
 f_1 &= -\frac{4}{3}(f_{10} + f_{12} + f_{14} + f_8) - \frac{2}{3}(f_0 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 - \rho) - \frac{1}{3}f_2 \\
 f_{13} &= \frac{1}{6}(-f_{10} - f_{12} - f_2 + f_3 + f_5 - f_8) - \frac{1}{3}(f_4 + f_6) + \\
 &\quad \frac{1}{12}(-f_0 + 10f_{14} + \rho) + \frac{1}{4c}(\rho_0 u_y - \rho_0 u_z) \\
 f_7 &= \frac{1}{6}(-f_{10} - f_{12} - f_{14} - f_2 + f_4 + f_6) - \frac{1}{3}(f_3 + f_5) + \\
 &\quad \frac{1}{12}(-f_0 + 10f_8 + \rho) + \frac{1}{4c}(\rho_0 u_y + \rho_0 u_z) \\
 f_9 &= \frac{1}{6}(f_4 + f_5 - f_8 - f_{12} - f_{14} - f_2) - \frac{1}{3}(f_3 + f_6) + \\
 &\quad \frac{1}{12}(10f_{10} - f_0 + \rho) + \frac{1}{4c}(\rho_0 u_y - \rho_0 u_z) \\
 f_{11} &= \frac{1}{6}(f_3 + f_6 - f_8 - f_{10} - f_{14} - f_2) - \frac{1}{3}(f_4 + f_5) + \\
 &\quad \frac{1}{12}(10f_{12} - f_0 + \rho) + \frac{1}{4c}(-\rho_0 u_y + \rho_0 u_z)
 \end{aligned}$$

La velocidad u_x en la frontera se obtiene de la ecuación 2.22. La velocidad desconocida en la frontera puede ser otra diferente de u_x , si este es el caso el sistema de ecuaciones debe reescribirse.

El procedimiento es análogo para una pared plana posicionada según la normal en la dirección de velocidad $\mathbf{c}_i, i = 2, 3, 4, 5, 6$.

C.4.2. Frontera bordes convexos - unión de dos superficies planas

En la figura C.6 se muestra un diagrama del problema junto con el esquema D3Q15 posicionado en la frontera. Existen al menos dos tipos de bordes convexos de interés,

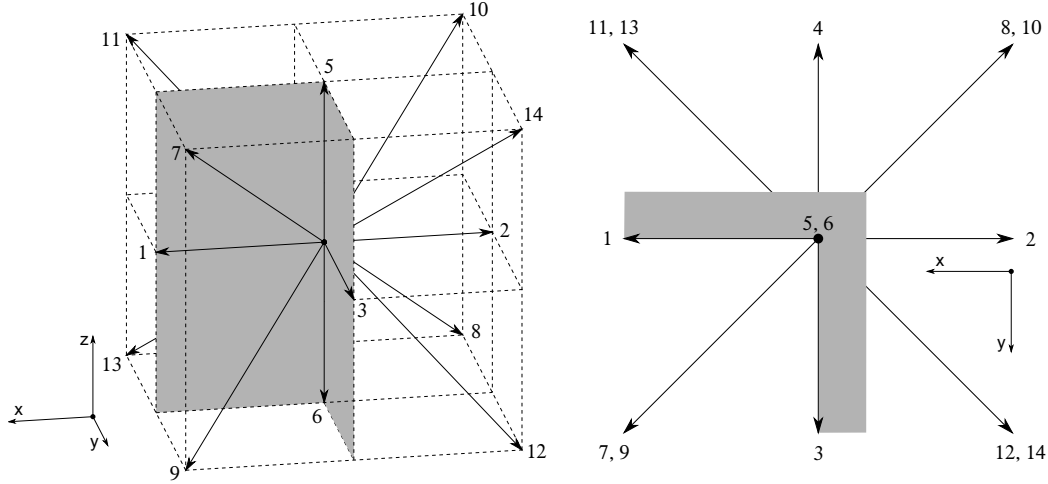


FIGURA C.6: Esquema de un borde convexo con normal $(1, 1, 0)$ hacia el interior del dominio computacional. Se muestra el esquema D3Q15 posicionado de manera conveniente. A izquierda: Diagrama del borde convexo representando por la unión de dos superficies planas perpendiculares junto con el esquema D3Q15. A derecha: vista del borde en el plano $x - y$ en escala de grises.

aquellos donde convergen dos superficies planas con condiciones de velocidad-velocidad y velocidad-presión. Se identifica cada borde con un vector normal hacia el interior del dominio, ver numeración y dirección de las normales en la sección C.5. En la figura C.6 se muestra un borde con normal en la dirección $(1, 1, 0)$.

Luego del proceso de distribución en el LBM, las $f_i, i \in (I_x^+ \cap I_y^+) \cup (I_x^0 \cap I_y^+) \cup (I_x^+ \cap I_y^0)$ deben especificarse en el borde tal que satisfagan las ecuaciones macroscópicas requeridas.

Existen direcciones de velocidad que deben especificarse, en particular las que no contribuyen en la evaluación de cantidad de movimiento ($\mathbf{c}_i, i = 11, 12, 13, 14$ en la figura C.6). Estas direcciones de velocidad son denominadas direcciones *buried* en la literatura, se determinan como se presenta en la sección 3.2.3.2.

Utilizando (3.5) en las direcciones $\mathbf{c}_i | i \in (I_x^+ \cap I_y^+) \cup (I_x^0 \cap I_y^+) \cup (I_x^+ \cap I_y^0)$, la expresión (3.8) (u otras de las alternativas presentadas) para las direcciones *buried*, y las ecuaciones macroscópicas es posible determinar las variables en el borde para imponer condiciones de velocidad y/o presión. Por simplicidad se muestran el caso de bordes de velocidad.

Condiciones de borde velocidad-velocidad en bordes convexos Considerando un borde con normal $(1, 1, 0)$, se deben determinar las variables: $q_x, q_y, q_z, f_1, f_3, f_7, f_9, f_{11}, f_{12}, f_{13}, f_{14}, \rho$. Resolviendo el sistema de ecuaciones propuesto se obtiene:

$$\begin{aligned}
 q_x &= 6\rho_0 u_x \quad ; \quad q_y = 6\rho_0 u_y \quad ; \quad q_z = 36c(f_6 - f_5) + 30\rho_0 u_z \\
 f_1 &= f_2 + \frac{2}{3c}\rho_0 u_x \quad ; \quad f_3 = f_4 + \frac{2}{3c}\rho_0 u_y \\
 f_7 &= \frac{1}{2}(f_6 - f_5) + f_8 + \frac{\rho_0}{12c}(u_x + u_y + 5u_z) \quad ; \quad f_9 = f_{10} + \frac{1}{2}(f_5 - f_6) + \frac{\rho_0}{12c}(u_x + u_y - 5u_z) \\
 f_{11} &= \frac{1}{2}(f_{11}^{old} + f_{12}^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(u_x - u_y + u_z) \quad ; \quad f_{12} = \frac{1}{2}(f_{11}^{old} + f_{12}^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(-u_x + u_y - u_z) \\
 f_{13} &= \frac{1}{2}(f_{13}^{old} + f_{14}^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(u_x - u_y - u_z) \quad ; \quad f_{14} = \frac{1}{2}(f_{13}^{old} + f_{14}^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(-u_x + u_y + u_z)
 \end{aligned} \tag{C.17}$$

con $f_i^{old} = f_i(\mathbf{x}, t - \delta t)$.

C.4.3. Frontera esquinas convexas - unión de tres superficies planas

En la figura C.7 se muestra un diagrama del problema junto con el esquema D3Q15 posicionado en una frontera de interés. Como se observa, cada esquina se forma por la in-

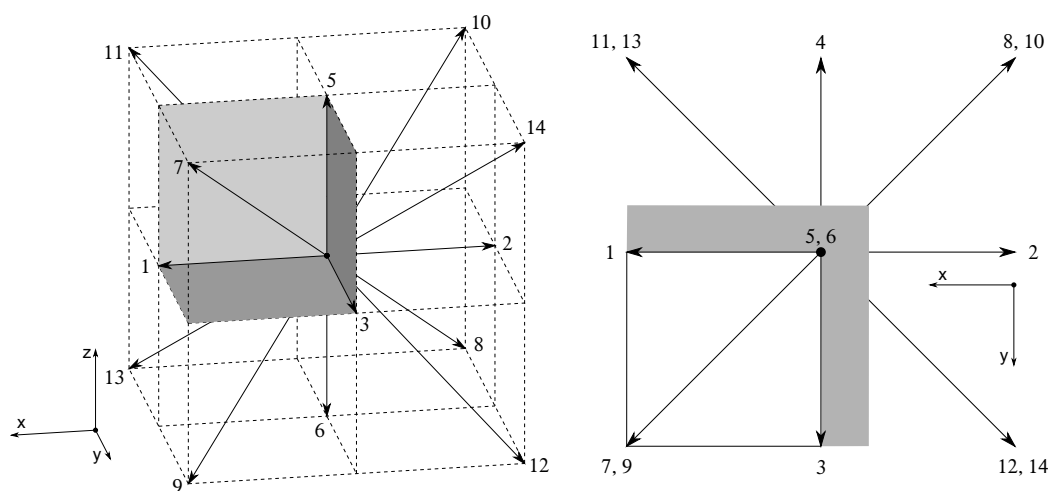


FIGURA C.7: Diagrama de una esquina convexa típica con normal $(1, 1, 1)$ hacia el interior del dominio computacional. Se muestra el esquema de velocidad D3Q15 posicionado de manera conveniente. A izquierda: Diagrama de la esquina convexa representada por la unión de tres superficies planas perpendiculares junto con el esquema de velocidad D3Q15. A derecha: vista de la frontera en el plano $x - y$ representado en escala de grises.

tersección de tres planos, es necesario considerar las posibles combinaciones de condiciones de borde para cada una de las superficies.

En la figura C.7 se muestra un borde esquina con vector normal en la dirección $(1, 1, 1)$. Luego del proceso de distribución en el LBM, las $f_i, i \in (I_x^+ \cap I_y^+ \cap I_z^+) \cup (I_x^+ \cap I_y^0 \cap I_z^0) \cup (I_x^0 \cap I_y^+ \cap I_z^0) \cup (I_x^0 \cap I_y^0 \cap I_z^+)$ deben especificarse tal que satisfagan las condiciones de borde macroscópicas de presión y/o velocidad. Por simplicidad se muestran el caso de bordes de velocidad.

Condiciones de borde de velocidad Cuando las superficies planas que definen una esquina convexa tienen todas condiciones de borde de velocidad, se tiene una esquina de velocidad. Las variables a determinar son: $q_x, q_y, q_z, f_1, f_3, f_5, f_7, f_9, f_{10}, f_{11}, f_{12}, f_{13}, f_{14}, \rho$.

Resolviendo el sistema de ecuaciones que define el problema se obtiene:

$$\begin{aligned}
 q_x &= 6\rho_0 u_x \quad ; \quad q_y = 6\rho_0 u_y \quad ; \quad q_z = 6\rho_0 u_z \\
 f_1 &= f_2 + \frac{2}{3c}\rho_0 u_x \quad ; \quad f_3 = f_4 + \frac{2}{3c}\rho_0 u_y \quad ; \quad f_5 = f_6 + \frac{2}{3c}\rho_0 u_z \\
 f_7 &= f_8 + \frac{1}{12c}\rho_0(u_x + u_y + u_z) \\
 f_9 &= \frac{1}{2}(f_{10}^{old} + f_9^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(u_x + u_y - u_z) \quad ; \quad f_{10} = \frac{1}{2}(f_{10}^{old} + f_9^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(-u_x - u_y + u_z) \\
 f_{11} &= \frac{1}{2}(f_{11}^{old} + f_{12}^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(u_x - u_y + u_z) \quad ; \quad f_{12} = \frac{1}{2}(f_{11}^{old} + f_{12}^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(-u_x + u_y - u_z) \\
 f_{13} &= \frac{1}{2}(f_{13}^{old} + f_{14}^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(u_x - u_y - u_z) \quad ; \quad f_{14} = \frac{1}{2}(f_{13}^{old} + f_{14}^{old}) + \frac{\rho_0}{24c}(-u_x + u_y + u_z)
 \end{aligned} \tag{C.18}$$

C.4.4. Comparación con el método de Zou et al. [46]

Se comparan condiciones de borde utilizando el método de Zou et al. [46] y el presentado en la sección 3.2.3. El objetivo es mostrar que se obtienen las mismas condiciones con ambos métodos. Por simplicidad se analiza una frontera horizontal en un problema bidimensional. Se utiliza un esquema D2Q9, y se encuentran las condiciones de borde sobre la frontera horizontal inferior del dominio. En la figura C.8 se muestra un esquema del problema en la frontera inferior:

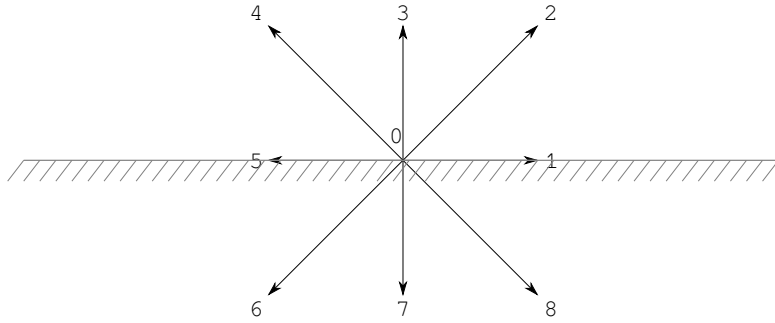


FIGURA C.8: Esquema de una frontera horizontal inferior en un problema bidimensional. Se muestra el modelo de velocidad D2Q9 utilizado.

Luego de aplicar la distribución (streaming, ecuación (2.21)) de variables en el LBM, las variables f_0 , f_1 , f_5 , f_6 , f_7 y f_8 están determinadas. Se asume que la velocidad en la frontera u_x y u_y es conocida, se tiene una superficie de velocidad. Para resolver el problema en la frontera es necesario determinar f_2 , f_3 , f_4 y ρ . Se dispone de 3 ecuaciones macroscópicas en 2D (ecuaciones (2.22)), el problema está indeterminado. En [46] proponen ecuaciones adicionales asumiendo que la regla de bounce-back es aplicable a la función distribución de no equilibrio (f^{neq}) en la dirección normal a la superficie de la frontera. Para el caso que se considera y en el LBM-BGK se tiene:

$$f_3 - f_3^{eq} = f_7 - f_7^{eq} \tag{C.19}$$

Combinando las dos ecuaciones de cantidad de movimiento (2.22) y la expresión (C.19) se

obtienen las siguientes relaciones en la frontera:

$$\begin{aligned} f_2 &= \frac{1}{6c}\rho_0 u_y + \frac{1}{2}\left(f_5 - f_1 + \frac{\rho_0}{c}u_x\right) + f_6 \\ f_3 &= f_7 + \frac{2}{3c}\rho_0 u_y \\ f_4 &= \frac{1}{6c}\rho_0 u_y + \frac{1}{2}\left(f_1 - f_5 - \frac{\rho_0}{c}u_x\right) + f_8 \end{aligned} \quad (C.20)$$

Utilizando $f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t)$ en el método propuesto en la sección 3.2.3.1 se obtiene:

$$\begin{aligned} f_2 &= f_6 + \frac{1}{36c}(q_x + q_y) \\ f_3 &= f_7 + \frac{1}{9c}q_y \\ f_4 &= f_8 + \frac{1}{36c}(q_y - q_x) \end{aligned} \quad (C.21)$$

Combinando con las dos ecuaciones de cantidad de movimiento de (2.22) y las expresiones (C.21) se obtiene:

$$\begin{aligned} q_x &= 18c(f_5 - f_1) + 18\rho_0 u_x \\ q_y &= 6\rho_0 u_y \\ f_2 &= \frac{1}{6c}\rho_0 u_y + \frac{1}{2}\left(f_5 - f_1 + \frac{\rho_0}{c}u_x\right) + f_6 \\ f_3 &= f_7 + \frac{2}{3c}\rho_0 u_y \\ f_4 &= \frac{1}{6c}\rho_0 u_y + \frac{1}{2}\left(f_1 - f_5 - \frac{\rho_0}{c}u_x\right) + f_8 \end{aligned} \quad (C.22)$$

Se puede observar que las expresiones obtenidas son equivalente a las presentadas en (C.20) utilizando el método de Zou et al. [46].

C.5. Numeración de superficies, bordes y esquinas del dominio en $\{LBM\}$

Por conveniencia y simplicidad en la implementación, las superficies, bordes y esquinas que forman un dominio paralelepípedo regular se numeran según se muestra en la figura C.9.

La numeración es también utilizada para identificar vectores normales en la dirección hacia el interior del dominio. La dirección de las normales, numeradas según la figura C.9, se muestra a continuación:

Vectores normales en superficies:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_0 &= (1, 0, 0) \quad , \quad \mathbf{n}_1 = (-1, 0, 0) \quad , \quad \mathbf{n}_2 = (0, 1, 0) \\ \mathbf{n}_3 &= (0, -1, 0) \quad , \quad \mathbf{n}_4 = (0, 0, 1) \quad , \quad \mathbf{n}_5 = (0, 0, -1) \end{aligned} \quad (C.23)$$

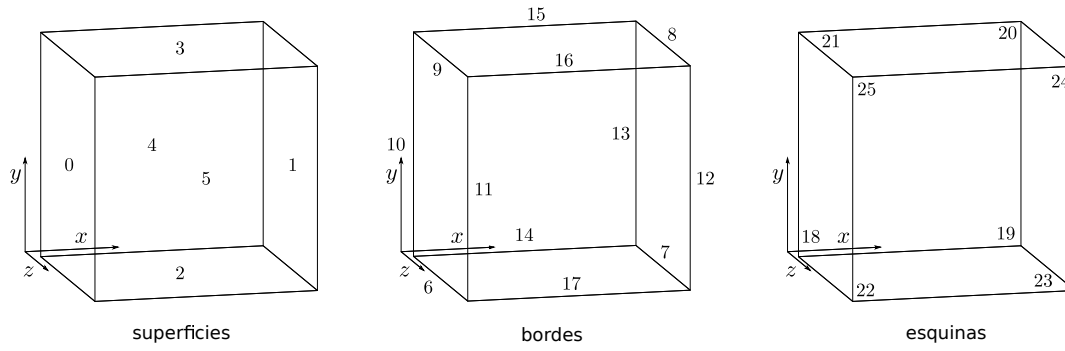


FIGURA C.9: Numeración de superficies, bordes y esquinas en un dominio típico con geometría de paralelepípedo regular. De izquierda a derecha se muestran la numeración de superficies, bordes convexos y esquinas convexas.

Vectores normales en bordes convexos:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{n}_6 &= (1, 1, 0) \quad , \quad \mathbf{n}_7 = (-1, 1, 0) \quad , \quad \mathbf{n}_8 = (-1, -1, 0) \\
 \mathbf{n}_9 &= (1, -1, 0) \quad , \quad \mathbf{n}_{10} = (1, 0, 1) \quad , \quad \mathbf{n}_{11} = (1, 0, -1) \\
 \mathbf{n}_{12} &= (-1, 0, -1) \quad , \quad \mathbf{n}_{13} = (-1, 0, 1) \quad , \quad \mathbf{n}_{14} = (0, 1, 1) \\
 \mathbf{n}_{15} &= (0, -1, 1) \quad , \quad \mathbf{n}_{16} = (0, -1, -1) \quad , \quad \mathbf{n}_{17} = (0, 1, -1)
 \end{aligned}
 \tag{C.24}$$

Vectores normales en esquinas convexas:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{n}_{18} &= (1, 1, 1) \quad , \quad \mathbf{n}_{19} = (-1, 1, 1) \quad , \quad \mathbf{n}_{20} = (-1, -1, 1) \\
 \mathbf{n}_{21} &= (1, -1, 1) \quad , \quad \mathbf{n}_{22} = (1, 1, -1) \quad , \quad \mathbf{n}_{23} = (-1, 1, -1) \\
 \mathbf{n}_{24} &= (-1, -1, -1) \quad , \quad \mathbf{n}_{25} = (1, -1, -1)
 \end{aligned}
 \tag{C.25}$$

Apéndice D

Problemas adicionales de verificación del algoritmo $\{LBM\}$

Por simplicidad y claridad en la presentación, se introducen en este Apéndice una variedad de problemas adicionales de verificación utilizados para comprobar el funcionamiento de $\{LBM\}$. En la sección D.1 se muestran resultados de un problema de Poiseuille 2D utilizando tres niveles de refinamiento. En la sección D.2 se resuelven problemas de rotación de una elipse y un elipsoide en un flujo de Couette. La utilidad de estos casos de verificación es comprobar el algoritmo $\{LBM\}$ en problemas de rotación sin traslación, permitiendo evaluar la correcta implementación de las ecuaciones de movimiento y su acoplamiento con el problema de fluidos.

D.1. Problema de Poiseuille 2D - 3 niveles de refinamiento

Se analiza el problema de Poiseuille 2D utilizando tres niveles de refinamiento para representar el dominio computacional. Las dimensiones del dominio son $L = 0.3 m$, con tres subdominios de $l = 0.1 m$, y $H = 2a = 0.1 m$.

El perfil de velocidad del fluido en la sección transversal del canal es una solución analítica exacta de la ecuación de Navier-Stokes dada por:

$$u(y) = \frac{1}{2\mu} \frac{dP}{dx} (y^2 - a^2) \quad , \quad \mu = \frac{\nu}{\rho} \quad (D.1)$$

Se utiliza una viscosidad cinemática $\nu = 0.09 \frac{m^2}{s}$, con una densidad $\rho = 1.225 \frac{kg}{m^3}$. Se impone sobre los bordes verticales derecho e izquierdo una presión P_{out} y P_{in} tal que de (D.1) se obtiene una velocidad máxima de $u_{max} = 1.19583$ en el centro de la sección.

En la figura D.1 se presenta un desglose de los subdominios utilizados para resolver el problema. Como se observa se utilizan tres grillas con diferente nivel de refinamiento, y dos grillas de interfase para la transferencia de datos. En colores se distingue la distribución de velocidad en el dominio del problema. Por claridad, los subdominios se muestran desplazados de su posición global. Los resultados se obtienen del LBM-SRT cuasi-incompresible con esquema de velocidad D2Q9.

En la figura D.2 se muestran los resultados obtenidos de distribución de velocidad en la sección, y distribución de presión en la longitudinal del ducto 2D. Se muestra la distribución de velocidad en tres secciones del problema definidas por el borde vertical izquierdo de cada subdominio. La velocidad se presenta adimensionalizada con la velocidad máxima

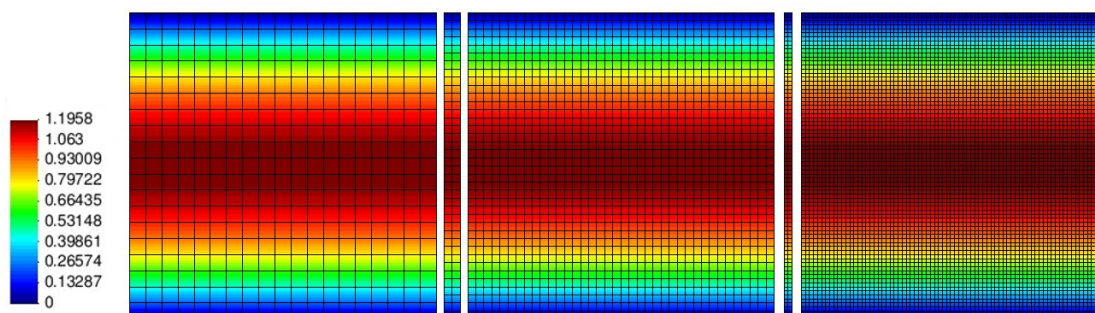


FIGURA D.1: Dominios utilizados en el problema de Poiseuille con tres niveles de refinamiento. Por claridad, los subdominios se muestran desplazados de su posición global. A izq.: dominio con la grilla más gruesa de 20×20 nodos; al centro: dominio con refinamiento de grilla intermedio de 39×39 ; a der.: el dominio con grilla más fina de 77×77 nodos. A der. e izq. del refinamiento intermedio central se tienen subdominios de interfase utilizados para la transferencia de datos entre grillas con discretización 3×39 y 3×77 respectivamente.

del problema de la ecuación (D.1). Se puede observar que la distribución de velocidad está de acuerdo con la solución exacta del problema. Lo mismo ocurre con la distribución de presión cuya solución exacta es una distribución lineal, como la obtenida en la figura D.2. Se puede apreciar de los resultados, que la interfase de las regiones de refinamiento no introducen perturbaciones en la velocidad ni en la presión. Los resultados de distribución de velocidad en la figura D.2 se muestran sobre las regiones de refinamiento.

D.2. Rotación de una elipse y un elipsoide en un flujo de Couette

Se analiza la rotación de dos cuerpos rígidos, una elipse y un elipsoide, inmersos en un flujo de Couette. El objetivo es verificar el algoritmo $\{LBM\}$, en particular la interacción cuerpo rígido - fluido en problemas de rotación pura. Se analizan problemas conocidos, con resultados numéricos presentados en [62] y [176], y solución analítica propuesta por [177], válida en el límite $Re \rightarrow 0$.

La configuración y geometría del problema se muestran de manera esquemática en la figura D.3, se presentan dos configuraciones: un elipsoide en D.3a y una elipse en D.3b.

La geometría del cuerpo rígido está definida por:

$$\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{c^2} = 1 \quad (\text{D.2})$$

con a , b y c la longitud de los tres semi-ejes principales, y x' , y' , z' los ejes coordenados fijos al cuerpo rígido. La geometría de la configuración de elipse en la figura D.3b es una sección de la geometría dada en (D.2) cuando $c \rightarrow \infty$.

El dominio en la configuración de la figura D.3a es un prisma rectangular de lados L , H y W , en la figura D.3b es una sección del anterior con lados L y H . El centroide del cuerpo rígido se ubica coincidente con el del dominio fluido, con la orientación inicial requerida según los ángulos de Euler ϕ_0 , θ_0 y ψ_0 .

Sobre dos caras o lados paralelos - planos o rectas perpendiculares al eje x - se asigna una velocidad uniforme U_w . La velocidad impuesta tiene la orientación que se muestra en

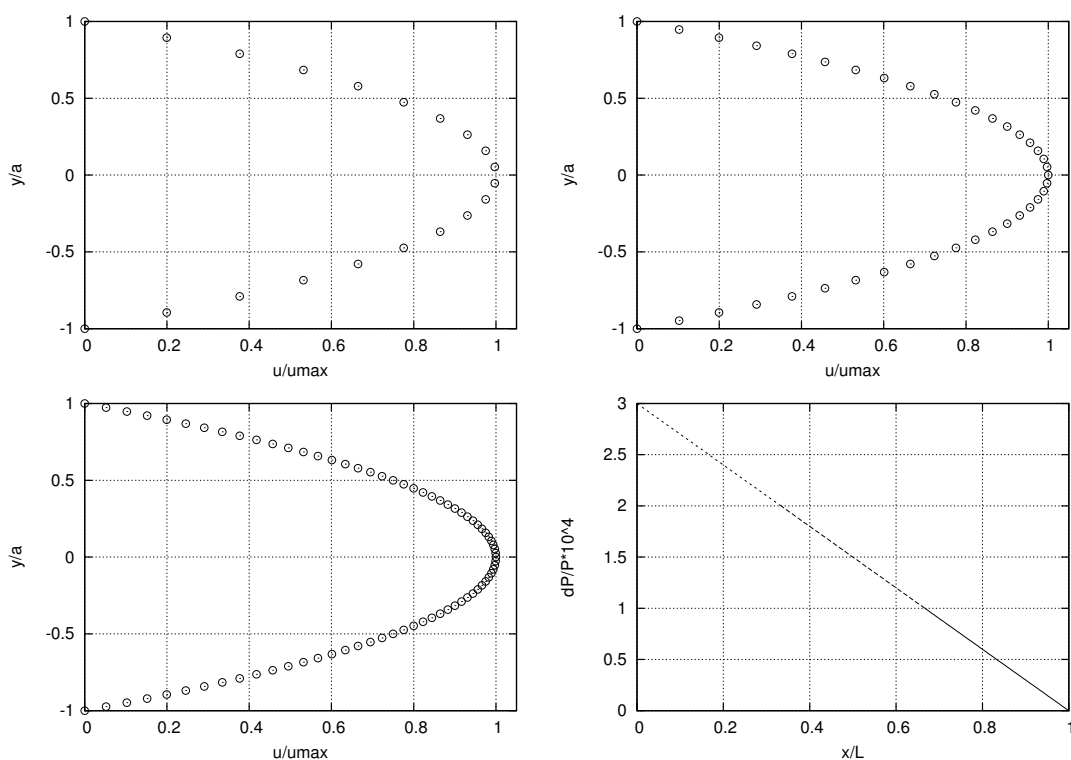


FIGURA D.2: Distribución de velocidad y presión adimensionalizadas en el problema de Poiseuille con tres niveles de refinamiento de grillas. La configuración del problema se muestra en la figura D.1. Arriba izq.: distribución de velocidad sobre el borde vertical izquierdo del subdominio con la grilla más gruesa; arriba der.: distribución de velocidad sobre el borde vertical izquierdo del subdominio central con refinamiento de grilla intermedio; abajo izq.: distribución de velocidad sobre el borde vertical izquierdo del subdominio con grilla más fina; abajo der.: distribución de presión en la longitud del ducto 2D.

la figura D.3. Sobre las caras y lados restantes se imponen condiciones de borde periódicas. Sobre la geometría del cuerpo la condición de borde de velocidad es impuesta utilizando el método de la sección 3.3.2 [51]. Se consideran iguales la densidad del fluido y la del cuerpo rígido, dando como resultado fuerzas de flotación nula.

La dinámica del cuerpo rígido está fuertemente influenciada por el número de Reynolds del problema:

$$Re = \frac{4G a^2}{\nu} \quad (D.3)$$

con $G = \frac{2U_w}{L}$ la relación de corte, y a es el semi-eje mayor del elipsoide o elipse según corresponda. La definición de G difiere según [176], [62] y la utilizada en este trabajo. Estas diferencias deben considerarse al comparar resultados.

La solución analítica propuesta por [177] en el límite $Re \rightarrow 0$ determina la velocidad de rotación $\dot{\psi}$ del cuerpo rígido sobre el eje z' :

$$\dot{\psi} = \frac{G}{a^2 + b^2} (a^2 \cos^2(\psi) + b^2 \sin^2(\psi)) \quad (D.4)$$

donde el ángulo de rotación ψ es:

$$\psi = \tan^{-1} \left(\frac{b}{a} \tan \left(\frac{abGt}{a^2 + b^2} \right) \right) \quad (D.5)$$

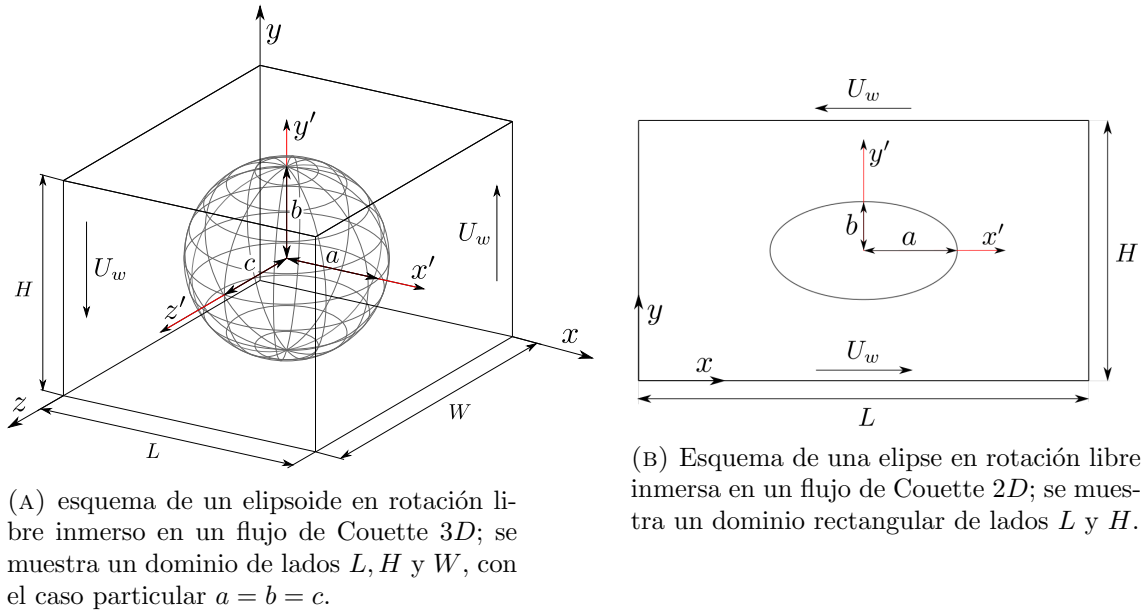


FIGURA D.3: Esquema de las configuraciones utilizada en el problema de rotación y orientación de un cuerpo rígido inmerso en un flujo de Couette.

Esta solución es válida para la rotación de una elipse o elipsoide (2D y 3D) en un flujo de Couette en el límite $Re \rightarrow 0$. Este resultado es utilizado para validar los numéricos obtenidos cuando $Re \rightarrow 0$.

Ecuaciones de movimiento. La orientación espacial del cuerpo rígido se determina a través de los ángulos de Euler ϕ, θ y ψ siguiendo la secuencia de rotaciones z, x, z . El movimiento del cuerpo rígido es determinado resolviendo las ecuaciones de movimiento del sólido con las rotaciones formuladas en cuaterniones [172]. La integración en el tiempo de las ecuaciones de movimiento se realiza utilizando un esquema numérico forward Euler, del mismo orden de precisión temporal que el LBM. En todos los casos analizados las fuerzas actuantes sobre el cuerpo rígido son fuerzas por su interacción con el fluido obtenidas con los métodos presentados en el Capítulo 4.

D.2.1. Rotación de una elipse en un flujo de Couette

Se determina la rotación de una elipse inmersa en un flujo de Couette con la configuración esquemática mostrada en la figura D.3b. Se analizan dos problemas a $Re = 0.032$ y $Re = 1.0$ para evaluar la convergencia de la solución hacia el resultado analítico presentado por [177]. En la figura D.4 se muestran los resultados obtenidos del LBM junto con la solución (D.4) propuesta por [177].

Los resultados presentados se obtienen para una configuración del dominio $L = 0.8$ [m] y $H = 0.4$ [m], con $a = 0.02$ [m] y $b = \frac{a}{2}$ definiendo la geometría del cuerpo rígido. Se impone $U_w = 1.0$ [m/s] sobre los lados del dominio como se indican en la figura D.3b, y se elige una viscosidad cinemática ν tal que el Re del problema sea el requerido. Para el problema a $Re = 0.032$ se discretiza el dominio en 639×320 puntos de grilla; mientras que para $Re = 1.0$ en 835×412 puntos de grilla.

Los resultados presentados se obtienen utilizando el LBM-SRT cuasi-incompresible con un esquema de velocidad D2Q9. Se puede observar de la figura D.4 que la solución

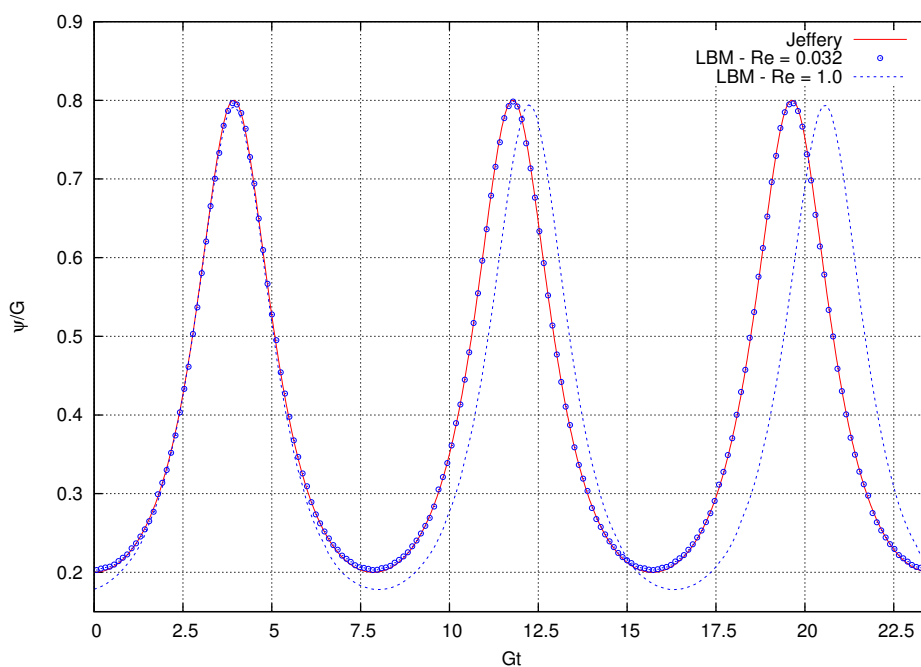


FIGURA D.4: Rotación de una elipse a bajos números de Reynolds. Soluciones numéricas obtenidas con el LBM a $Re = 0.032$ y $Re = 1.0$. Se muestra la solución analítica propuesta por [177]. La configuración del problema corresponde al esquema presentado en la figura D.3b.

numérica converge a la propuesta de [177] para $Re \rightarrow 0$. En especial para el resultado numérico a $Re = 0.032$ no se observan diferencias significativas apreciables con la solución analítica. Este resultado junto con los anteriores presentados, permiten validar el algoritmo utilizado en problemas de rotación bidimensionales a bajos números de Reynolds.

Para $Re = 1.0$ se puede apreciar un incremento en el período de rotación y una disminución en el valor mínimo de la velocidad de rotación respecto al resultado a $Re = 0.032$. En ambos problemas se observa un comportamiento periódico como el esperado en el régimen de números de Reynolds bajos analizado.

D.2.2. Rotación de un elipsoide en un flujo de Couette

Se determina la rotación de un elipsoide inmerso en un flujo de Couette con la configuración esquemática mostrada en la figura D.3–a. Se analizan dos casos a $Re = 0.1$ y $Re = 32$ para verificar el comportamiento de la solución numérica en el límite $Re \rightarrow 0$.

En la figura D.5 se muestran los resultados obtenidos del LBM junto con la solución analítica (D.4) propuesta por [177]. Los resultados del problema se obtienen para una configuración del dominio $L = H = W = 0.1$ [m] como se presentan en la figura D.3a. La geometría del cuerpo rígido está definida por semi-ejes $a = 0.025$ [m], $b = c = \frac{a}{2}$ con orientación inicial $\phi_0 = \theta_0 = \psi_0 = 0^\circ$.

Se utiliza una discretización de $64 \times 64 \times 64$ puntos de grilla, y se impone una velocidad $U_w = 1.0$ [m/s] sobre las caras laterales definidas por los planos $x = 0$ y $x = L$ (figura D.3a).

Los resultados presentados se obtienen utilizando el LBM-SRT cuasi-incompresible con un esquema de velocidad D3Q19, también se realizan evaluaciones con el esquema D3Q15.

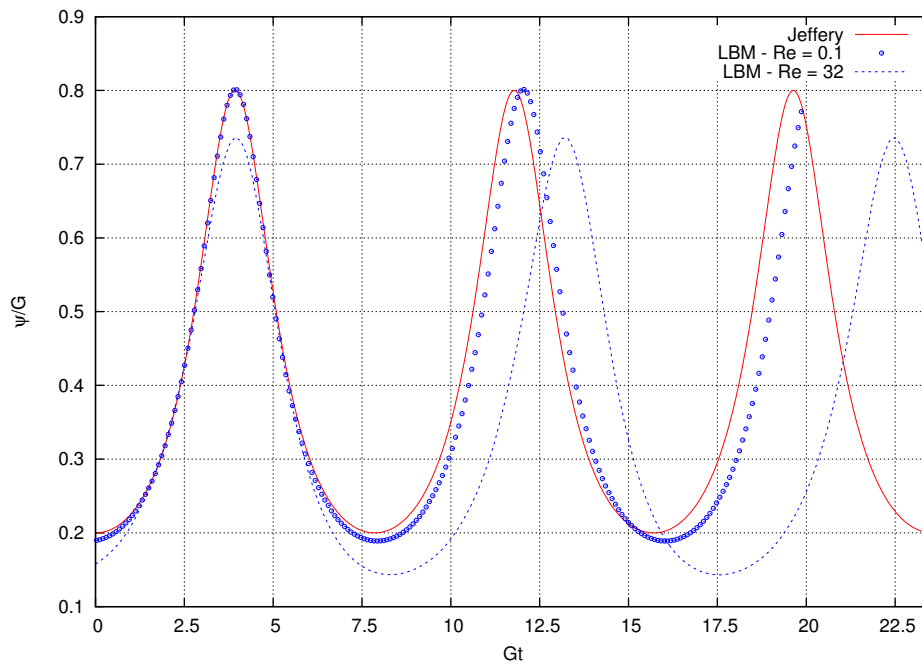


FIGURA D.5: Rotación de un elipsoide a bajos números de Reynolds. Solución numéricas obtenidas del LBM a $Re = 0.1$ y $Re = 32$. Se muestra la solución analítica propuesta por [177]. La configuración del problema se muestra de forma esquemática en la figura D.3a.

No se aprecian diferencias significativas entre los resultados obtenidos con ambos modelos. De los resultados se puede apreciar que la solución numérica tiende a la solución de [177] cuando $Re \rightarrow 0$. Los resultados encontrados y el comportamiento de la solución concuerda con los presentados en [62, 176].

Apéndice E

Algunos detalles sobre el tratamiento de geometrías arbitrarias

En este Apéndice se introducen algunos detalles y comentarios sobre el tratamiento de fronteras de geometría arbitraria. Es de interés presentar los métodos utilizados para encontrar los conjuntos de nodos necesarios en la implementación de las condiciones de borde en $\{LBM\}$. Se muestran y utilizan métodos elementales que lejos están de ser computacionalmente eficientes.

E.1. Tratamiento de fronteras de geometría arbitraria no coincidentes con la grilla

Como se presenta en el Capítulo 3, para implementar condiciones de borde en fronteras de geometría arbitraria, es necesario identificar algunos conjuntos de nodos y parámetros geométricos relacionados. En especial son interés los nodos del conjunto \mathcal{N}_b , y parámetros geométricos definidos en la sección 3.3.1.

Al crear el dominio computacional del problema con el arreglo de grillas necesario, todos los nodos inicialmente pertenecen a \mathcal{N}_F . Si la frontera es una superficie plana y coincide con la posición de los nodos en una de las caras regulares de la grilla, estos nodos pertenecen a \mathcal{N}_b . Esta es una condición simple de asignar ya que, por trabajar en el LBM con grillas cartesianas regulares, estos nodos se pueden identificar con facilidad. Para el caso más general de una frontera arbitraria y cerrada (superficie de un cuerpo¹) inmersa en un dominio fluido, no es trivial decidir cuales nodos del dominio computacional pertenecen a \mathcal{N}_b . Luego, es necesario disponer de algún método que pueda identificar los nodos que pertenecen a \mathcal{N}_b para fronteras de geometría y orientación arbitraria, y los demás parámetros geométricos necesarios para imponer las condiciones de borde.

La frontera se representa discretizada en segmentos de curvas o superficies simples; segmentos de rectas en 2D o superficies triangulares en 3D. Esta elección es arbitraria y se utiliza por considerarse la más simple. Cada segmento de recta está definido por las coordenadas de sus puntos o nodos extremos, mientras que la superficie triangular

¹Si bien en este apéndice se habla de fronteras de geometría arbitraria de un cuerpo rígido, los métodos que se presentan son válidos para fronteras arbitrarias abiertas y cerradas no coincidentes con la grilla, y no necesariamente rígidas.

está definida por las coordenadas de sus tres vértices o nodos. La discretización de la geometría se puede realizar con cualquier software de pre-proceso de datos utilizado en mecánica de fluidos computacional. En este trabajo se utiliza el software GiD² [178].

Luego cada segmento o superficie discreta tiene una posición conocida en el espacio y puede relacionarse con la grilla. Es necesario determinar si existe intersección entre la frontera y un segmento de recta formado por dos nodos de grilla primeros vecinos. Si existe intersección, cada uno de estos nodos pertenece a \mathcal{N}_b o pertenece a \mathcal{N}_s ; si la frontera es abierta ambos nodos pertenecen a \mathcal{N}_b . Si existe intersección, es posible determinar de manera simple los parámetros geométricos necesarios para imponer las condiciones de borde (ver sección 3.1 y 3.3.1). En las secciones siguientes se muestran los métodos simples utilizados para determinar las intersecciones y conjunto al que pertenecen los nodos de interés.

E.1.1. Determinación de puntos de intersección

Son de interés dos tipos bien definidos de intersección geométrica, intersección entre dos segmentos de rectas (problema 2D), e intersección entre un plano y un segmento de recta (problemas 3D).

E.1.1.1. Intersección entre dos segmentos de rectas

Encontrar el punto de intersección entre segmentos de rectas es un problema geométrico simple que dispone de varios métodos para solucionarlo. En la literatura [179, 180] pueden encontrarse una serie de métodos geométricos, desde simples implementaciones como la que abordamos en este trabajo (pero no eficientes computacionalmente), hasta implementaciones algo más complejas pensadas en optimizar performance computacionales.

El problema que se resuelve es encontrar el punto de intersección, si existe, entre dos segmentos de rectas en el espacio bidimensional. Cada segmento de recta está definido por las coordenadas de sus nodos o puntos extremos. Se consideran dos segmentos de rectas \overline{ab} y \overline{cd} , donde uno representa un segmento de la frontera y el otro un segmento entre dos nodos de grilla primeros vecinos. El segmento \overline{ab} está definido por los nodos a y b con coordenadas a_i y b_i , $i = 1, 2$ respectivamente. Para simplificar el problema se trabaja con una representación paramétrica de los segmentos. Considerando el segmento \overline{ab} , cualquier punto interior se puede escribir como:

$$p(t) = (1 - t)a + bt \quad \forall \quad 0 \leq t \leq 1 \quad (\text{E.1})$$

De igual manera para el segmento \overline{cd} :

$$q(k) = (1 - k)c + dk \quad \forall \quad 0 \leq k \leq 1 \quad (\text{E.2})$$

Existe intersección entre los segmentos si se satisface $p(t) = q(k)$ para los límites establecidos en los parámetros t y k . Bajo estas condiciones se encuentra el siguiente sistema de ecuaciones:

$$a_i - c_i = t(a_i - b_i) + k(d_i - c_i) \quad i = 1, 2 \quad (\text{E.3})$$

²Este provee como dato de salida un archivo de formato programable conteniendo toda la información necesaria de la discretización elegida junto con una serie de datos adicionales que definen el problema.

de donde se encuentran expresiones algebraicas para t y k :

$$k = -\frac{c_1a_2 - c_1b_2 - b_1a_2 + a_1b_2 - c_2a_1 + c_2b_1}{d_1a_2 - d_1b_2 - c_1a_2 + c_1b_2 - d_2a_1 + d_2b_1 + c_2a_1 - c_2b_1} \quad (\text{E.4})$$

$$t = \frac{d_1a_2 - d_1c_2 - d_2a_1 - c_1a_2 + c_2a_1 + d_2c_1}{d_1a_2 - d_1b_2 - c_1a_2 + c_1b_2 - d_2a_1 + d_2b_1 + c_2a_1 - c_2b_1}$$

Luego existe intersección entre los segmentos de rectas si los parámetros t y k se encuentran dentro de los límites definidos en E.1 y E.2 respectivamente. Existe un caso particular donde no hay solución para los parámetros buscados, cuando el denominador de las expresiones (E.4) se anula. Esto es:

$$d_1a_2 - d_1b_2 - c_1a_2 + c_1b_2 - d_2a_1 + d_2b_1 + c_2a_1 - c_2b_1 = 0 \quad (\text{E.5})$$

$$\frac{b_2 - a_2}{b_1 - a_1} = \frac{d_2 - c_2}{d_1 - c_1} \quad (\text{E.6})$$

se observa de E.6 que no existe solución para los parámetros buscados cuando ambos segmentos son paralelos.

E.1.1.2. Intersección entre un segmento de recta y una superficie triangular

Se quiere encontrar el punto de intersección, si existe, entre un segmento de recta y un plano definido por una superficie triangular. Este caso ocurre en problemas 3D donde la frontera arbitraria se discretiza en superficies triangulares de un tamaño apropiado. Cada superficie triangular discreta está definida por sus tres vértices, a, b, c . El segmento de recta está definido por las coordenadas de sus nodos extremos l_1 y l_2 , estos corresponden a puntos de grilla primeros vecinos. En la figura E.1 se muestra un esquema que representa el caso de análisis cuando ocurre intersección. En la figura E.1, $\hat{n} = \overline{ab} \times \overline{bc}$ es la normal

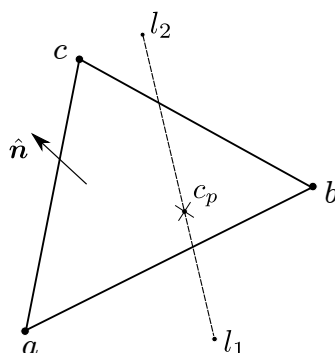


FIGURA E.1: Esquema de la intersección entre un segmento de recta l_1, l_2 y una superficie triangular definida por sus vértices a, b, c en el espacio. c_p es el punto de intersección entre el segmento de recta y la superficie con vector normal \hat{n}

al plano, donde \overline{ab} y \overline{bc} son vectores desde el vértice a al b y desde el vértice b al c respectivamente. c_p es el punto de intersección entre el plano y el segmento de recta. Si c_p está en el plano:

$$\overline{ac_p} \cdot \hat{n} = 0 \quad (\text{E.7})$$

con $\overline{ac_p}$ un vector desde el vértice a al punto de intersección c_p . Cualquier punto del segmento de recta puede escribirse como:

$$L(t) = (1-t)l_1 + l_2t \quad \forall \quad 0 \leq t \leq 1 \quad (\text{E.8})$$

Si el segmento de recta no es paralelo al plano que definen los vértices abc , $\exists t = \bar{t}$ tal que $L(\bar{t}) = c_p$. De E.7 y E.8 se obtiene:

$$\sum_i (a_i - (1-t)l_{1,i} - l_{2,i}t) \hat{n}_i = 0 \quad (\text{E.9})$$

$$\bar{t} = \frac{\sum_i (a_i - l_{1,i}) \hat{n}_i}{\sum_i (l_{2,i} - l_{1,i}) \hat{n}_i} \quad (\text{E.10})$$

\bar{t} no está definido cuando el plano y la recta son paralelos. Luego es necesario identificar si c_p esta dentro de la superficie triangular. Para verificar esta condición se utiliza el siguiente cambio de variables (coordenadas de área) referenciado en la figura E.2. Se utilizan tres

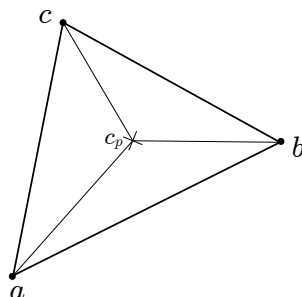


FIGURA E.2: Esquema de coordenadas de áreas utilizadas para identificar si el punto de intersección c_p se encuentra dentro del triángulo definido por sus vértices a, b, c .

variables que representan una fracción del área del triángulo abc :

$$\alpha = \frac{\|\overline{c_p b} \times \overline{c_p c}\|}{2A_r} \quad ; \quad \beta = \frac{\|\overline{c_p c} \times \overline{c_p a}\|}{2A_r} \quad ; \quad \gamma = \frac{\|\overline{c_p a} \times \overline{c_p b}\|}{2A_r} \quad (\text{E.11})$$

con $A_r = \frac{1}{2} \|\overline{ab} \times \overline{ac}\|$ el área del triángulo, \overline{ac} un vector desde el vértice a al c , $\overline{c_p a}$, $\overline{c_p b}$, y $\overline{c_p c}$ vectores desde el punto de intersección c_p a los vértices a, b , y c respectivamente. Si c_p se encuentra en la región de interés debe satisfacerse la condición:

$$\gamma + \alpha + \beta = 1 \quad (\text{E.12})$$

E.1.1.3. Criterio de búsqueda

La búsqueda de los nodos de grilla primeros vecinos que forman el segmento de recta se realiza en un entorno acotado de la grilla para reducir el costo computacional. Existen al menos dos niveles de búsqueda, el primero y más general es identificar en que grilla está posicionada la frontera de interés. Esto es de utilidad en problemas con múltiples grilla (ver Capítulo 5). Identificada la grilla continúa un proceso de búsqueda acotado en una región determinada para encontrar los nodos de interés.

Para determinar en que grilla o grillas se encuentra la frontera, se utiliza un método de comparación directa entre dos paralelepípedos regulares, uno es la grilla y el otro el más pequeño que contiene a la frontera. Esta aproximación inicial reduce la búsqueda a las posibles grillas donde vive la frontera de interés. Esto es una aproximación ya que

la frontera se representa mediante una geometría de dimensiones mayores o iguales a la frontera.

Esta representación se puede mejorar para incrementar la precisión, incluso se puede segmentar la frontera por subdominios e identificar en que grillas vive cada regiones de la frontera. En $\{LBM\}$ se asume inicialmente que las fronteras de geometría arbitraria están siempre contenidas en una única grilla.

Identificadas las grillas el proceso de búsqueda se reduce notablemente. Luego se determinan los nodos de la grilla que forman cada segmento de recta sobre el que se busca intersección con la frontera. Para reducir la búsqueda en este caso, cada segmento de recta o superficie discreta de la frontera se identifica con una posición de referencia. Como las grillas y la geometría de la frontera comparten el mismo sistema de coordenadas global, y se conoce el δx , es posible identificar el nodo de grilla más cercano al segmento de recta o superficie considerada. Luego para este nodo se construyen Q segmentos de rectas ficticios que forma con sus primeros vecinos para cada $i \in \mathcal{N}_q$, para cada uno de estos segmentos se busca intersección con la frontera. El proceso se repite para cada segmento de recta o superficie discreta de la frontera. Para encontrar todas las intersecciones, el tamaño de las discretizaciones debe ser menor que δx .

E.2. Determinación del conjunto de nodos \mathcal{N}_b y \mathcal{N}_s

De la determinación de los puntos de intersección, entre segmentos de rectas en 2D o entre segmentos de rectas y superficies planas en 3D, se conocen los nodos primeros vecinos a la frontera. Si la frontera es abierta, todos los nodos primeros vecinos encontrados son nodos que pertenecen a \mathcal{N}_b , el problema está completamente definido. Estos nodos se utilizan para imponer las condiciones de borde y obtener las fuerzas que el fluido ejerce sobre la frontera. Si la frontera es cerrada, es necesario determinar cuales de los nodos encontrados pertenece a \mathcal{N}_s o pertenece a \mathcal{N}_b . El caso más simple es cuando todos los nodos son tratados como nodos fluido, y solo es necesario determinar cuales de los nodos primeros vecinos a la frontera pertenece a \mathcal{N}_b , para aplicar las condiciones de borde y evaluar correctamente las fuerzas. En caso que no se quiera evolucionar en todos los nodos de la grilla, el problemas es más elaborado y se deben determinar adicionalmente todos los nodos que pertenecen a \mathcal{N}_s para excluirlos de la evolución.

Se realizan dos aproximaciones para identificar la dependencia de cada nodo en la grilla. La más simple, basada en una normal de cada segmento de recta o superficie discreta, es de utilidad únicamente para los nodos primeros vecinos a la frontera. Una aproximación más elaborada, y de utilidad general para encontrar todos los nodos que pertenecen a \mathcal{N}_s , está basada en resultados conocidos del análisis vectorial. En las secciones siguientes se detallan los métodos utilizados en problemas 2D y 3D.

Los métodos que se utilizan no son los más eficientes desde el punto de vista computacional, pero funcionan correctamente y permitieron resolver los problemas de interés en este trabajo. Este algoritmo es especialmente importante en $\{LBM\}$, y debe mejorarse para incrementar las performance computacionales, en especial en problemas de cuerpos en movimiento.

E.2.1. Problemas 2D - curvas cerradas

En la figura E.3 se muestra un esquema del problema 2D que se analiza, una frontera $\partial\Omega$ cerrada e inmersa en un dominio fluido Γ . Se muestra la grilla del dominio computacional y se utiliza la misma representación de los nodos de la sección 3.1.

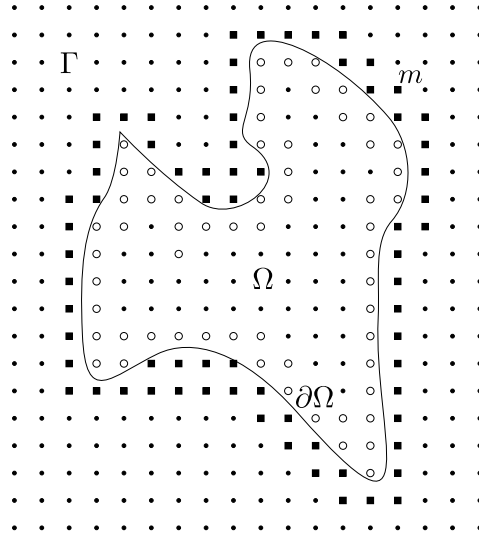


FIGURA E.3: Esquema del problema de una frontera $\partial\Omega$ cerrada inmersa en un dominio fluido Γ . Se muestra la grilla del dominio computacional donde se desea determinar el conjunto de dependencia de cada nodo de la grilla. Con \blacksquare se identifican los nodos que pertenecen a \mathcal{N}_b , con \circ algunos nodos que pertenecen a \mathcal{N}_s .

Si todos los nodos de la grilla son tratados como nodos fluido, como es el caso en $\{LBM\}$, se quiere determinar que nodos primeros vecinos a la frontera en la figura E.3 pertenecen a \mathcal{N}_b o pertenecen a \mathcal{N}_s (si pertenecen a Γ o pertenecen a Ω respectivamente).

Se presenta inicialmente el método basado en el cálculo vectorial, derivado del teorema de Green [181], para determinar el conjunto de dependencia de cada nodo en la grilla en problemas 2D. Se introduce el método considerando como ejemplo un nodo m arbitrario primer vecino al borde, luego el método se puede extender a todos los nodos primeros vecinos, o a todos los nodos de la grilla si es necesario. Se propone un campo vectorial $\mathbf{F}(x, y)$ centrado en m , definido como:

$$\mathbf{F}(x, y) = q \frac{\mathbf{r}_m}{r_m^2} \quad (\text{E.13})$$

con

$$\mathbf{r}_m = (x - x_m)\hat{i} + (y - y_m)\hat{j} \quad ; \quad r_m^2 = (x - x_m)^2 + (y - y_m)^2 \quad (\text{E.14})$$

Como un resultado del teorema de Green y del teorema de la divergencia en el plano [181], para el campo vectorial E.13 propuesto se tiene:

$$\oint_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, ds = \begin{cases} 0 & \text{si } m \in \Gamma \\ 2q\pi & \text{si } m \in \Omega \end{cases} \quad (\text{E.15})$$

Luego, el resultado obtenido de evaluar E.15 nos garantiza que el nodo m está en Γ y pertenece a \mathcal{N}_b . De igual manera se procede para los demás nodos primeros vecinos y se los clasifica como nodos que pertenecen a \mathcal{N}_b o que pertenecen a \mathcal{N}_s si están en Γ o en

Ω respectivamente. El procedimiento se puede extender para determinar todos los nodos que pertenecen a \mathcal{N}_s .

La evaluación de E.15 se realiza de manera numérica sobre la curva $\partial\Omega$ definida a trozos por segmentos de rectas. Pueden utilizarse varios métodos numéricos para la evaluación de E.15, dependiendo su elección de un compromiso entre tamaño de discretización de $\partial\Omega$ y costo de evaluación del método numérico seleccionado. En principio se adopta el método del trapecio, brinda una precisión aceptable en los casos analizados, siendo fuertemente dependiente de la discretización o número de segmentos que definen $\partial\Omega$.

Este método es efectivo pero computacionalmente costoso. El costo computacional es especialmente importante cuando se analizan problemas con cuerpos en movimiento, donde en cada paso temporal es necesario verificar el conjunto \mathcal{N}_b . En estos casos se utiliza un método alternativo basado únicamente en datos geométricos de los segmentos de rectas que definen $\partial\Omega$.

Cada nodo primer vecino a $\partial\Omega$ con coordenadas \mathbf{x}_A tiene asociado un segmento de recta que discretiza $\partial\Omega$. El segmento de recta que se asigna a un nodo \mathbf{x}_A es el que brinda el menor valor de Δ para toda $\bar{i} : i \in \mathcal{N}_{Ib}$ (ver sección 3.1 y 3.3.1). Cada segmento de recta en una curva cerrada tiene un vector normal $\hat{\mathbf{n}}_l$ en dirección hacia Γ . Luego un nodo que pertenece a \mathcal{N}_b si $\hat{\mathbf{n}}_l \cdot \mathbf{x}_A < 0$. Para garantizar un funcionamiento efectivo, cada segmento de recta en $\partial\Omega$ debe tener longitud menor a δx , $\frac{3\delta x}{4}$ es una elección apropiada. Este método tiene menor costo computacional que el anterior, y solo es de utilidad para los nodos primeros vecinos a la frontera. Estos nodos se los identifica con el método de la sección E.1.1.1, corresponden a aquellos nodos para los cuales un segmento de recta que une el nodo de interés con otro primer vecino es intersectado por $\partial\Omega$. No es posible determinar completamente \mathcal{N}_s .

E.2.2. Problemas 3D - curvas cerradas

En problemas 3D es posible extender ambos métodos implementados en la sección E.2.1 anterior. Considerando el primero de los métodos, es posible determinar si un nodo m de la grilla pertenece a \mathcal{N}_b o \mathcal{N}_s evaluando la siguiente expresión:

$$\oint_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dS = \begin{cases} 0 & \text{si } m \in \mathcal{N}_b \\ 4q\pi & \text{si } m \in \mathcal{N}_s \end{cases} \quad (\text{E.16})$$

Este método no se utiliza por el costo computacional en la evaluación numérica de la integral.

El método basado en la normal de cada superficie discreta es el que se utiliza en los problemas que se resuelven. Es posible obtener un vector normal $\hat{\mathbf{n}}$ en cada elemento triangular de la superficie, mediante el producto vectorial de dos vectores construidos por los nodos de los vértices del triángulo en el espacio que define el plano de interés. La dirección de la normal queda siempre garantizada con el orden correcto de los vértices del triángulo que definen el plano. Cada nodo de grilla primer vecino a $\partial\Omega$ tiene un elemento de superficie discreta asociado, el más cercano se determina con Δ . Luego mediante el producto escalar, como en la sección E.2.1, se puede determinar si el nodo de interés pertenecen a \mathcal{N}_b o pertenecen a \mathcal{N}_s .

Bibliografía

- [1] Juan P. Giovacchini and Omar E. Ortiz. Flow force and torque on submerged bodies in lattice-boltzmann methods via momentum exchange. *Phys. Rev. E*, 92:063302, Dec 2015. doi: 10.1103/PhysRevE.92.063302.
- [2] Juan P. Giovacchini. Sedimentation analysis of small ice crystals by lattice boltzmann method. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. ISSN 1477-870X. doi: 10.1002/qj.3164. URL <http://dx.doi.org/10.1002/qj.3164>. QJ-17-0139.R2.
- [3] M. R. Serial, E.V. Silletta, J. P. Giovacchini, M. I. Velasco, O. Ortiz, E.D. Danieli, B. Blümich, F. Casanova, and R. H. Acosta. Single shot velocity mapping with rewinding of the velocity encoding with echo-planar imaging. *En proceso de publicación*.
- [4] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics, Second Edition: Volume 6 (Course of Theoretical Physics)*. Course of theoretical physics / by L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Vol. 6. Butterworth-Heinemann, 2 edition, 1987. ISBN 0750627670.
- [5] Frank White. *Viscous Fluid Flow*. McGraw-Hill Mechanical Engineering. McGraw-Hill Education, 2005. ISBN 0072402318.
- [6] Robert W. Fox and Alan T. McDonald. *Introducción a la Mecánica de Fluidos*. McGraw-Hill, 2 edition, 1995.
- [7] Lawrence E. Malvern. *Introduction to the mechanics of a continuous medium*. Prentice-Hall series in engineering of the physical sciences. Prentice-Hall, Englewood Cliffs (N.J.), 1969. ISBN 0-13-487603-2.
- [8] L. E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley & Sons, 2 edition, 1998. ISBN 0-471-59520-9.
- [9] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. Wiley, 2 edition, 1987. ISBN 0471815187.
- [10] Y. Sone. *Kinetic Theory and Fluid Dynamics*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhäuser Boston, 2002. ISBN 9780817642846.
- [11] S. Harris. *An Introduction to the Theory of the Boltzmann Equation*. Dover books on physics. Dover Publications, 2004. ISBN 9780486438313.
- [12] Carlo Cercignani. *Theory and application of the Boltzmann equation*. Scottish Academic Press, 1975.
- [13] Carlo Cercignani. *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Springer Science+Business Media, 1988. ISBN 978-1-4612-6995-3.

- [14] Harold Grad. *Principles of the Kinetic Theory of Gases*. Springer Berlin Heidelberg, 1958. ISBN 978-3-642-45894-1.
- [15] 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 systems. *Phys. Rev.*, 94:511–525, May 1954. doi: 10.1103/PhysRev.94.511.
- [16] Xiaoyi He and Li-Shi Luo. Theory of the lattice boltzmann method: From the boltzmann equation to the lattice boltzmann equation. *Phys. Rev. E*, 56(6):6811–6817, Dec 1997. doi: 10.1103/PhysRevE.56.6811.
- [17] Xiaoyi He and Li-Shi Luo. A priori derivation of the lattice boltzmann equation. *Phys. Rev. E*, 55:R6333–R6336, Jun 1997. doi: 10.1103/PhysRevE.55.R6333. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.55.R6333>.
- [18] D.A. Wolf-Gladrow. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction*. Number n.º 1725 in Lattice-gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction. Springer, 2000. ISBN 9783540669739.
- [19] U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau. Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. *Phys. Rev. Lett.*, 56:1505–1508, Apr 1986. doi: 10.1103/PhysRevLett.56.1505. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.1505>.
- [20] Daniel H. Rothman and Stiphane Zaleski. *Lattice-Gas Cellular Automata: Simple Models of Complex Hydrodynamics*. Collection Alea-Saclay: Monographs and Texts in Statistical Physics. Cambridge University Press, 1997. doi: 10.1017/CBO9780511524714.
- [21] Gary D. Doolen. *Lattice Gas Methods: Theory, Application, and Hardware*. MIT / North Holland, 1 edition, 1991. ISBN 9780262540636.
- [22] G. McNamara and G. Zanetti. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters*, 61(20):2332–2335, 1988.
- [23] Leo P. Kadanoff, Guy R. McNamara, and Gianluigi Zanetti. From automata to fluid flow: Comparisons of simulation and theory. *Phys. Rev. A*, 40:4527–4541, Oct 1989. doi: 10.1103/PhysRevA.40.4527. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.40.4527>.
- [24] F. J. Higuera and J. Jiménez. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *EPL (Europhysics Letters)*, 9(7):663, 1989.
- [25] D. d’Humières. Generalized lattice-boltzmann equations. *Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations, Progress in Astronautics and Aeronautics*, 159:450–458, 1992.
- [26] Sauro Succi. *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, Oxford, 2001.
- [27] Paul J. Dellar. Nonhydrodynamic modes and *a priori* construction of shallow water lattice boltzmann equations. *Phys. Rev. E*, 65:036309, Feb 2002. doi: 10.1103/PhysRevE.65.036309. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.65.036309>.

- [28] Paul J. Dellar. Incompressible limits of lattice boltzmann equations using multiple relaxation times. *Journal of Computational Physics*, 190(2):351 – 370, 2003. ISSN 0021-9991. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991\(03\)00279-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00279-1).
- [29] Paul J. Dellar. Non-hydrodynamic modes and general equations of state in lattice boltzmann equations. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 362(1): 132 – 138, 2006. ISSN 0378-4371. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2005.09.012>. Discrete Simulation of Fluid Dynamics Proceedings of the 13th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics 13th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics.
- [30] M’hamed Bouzidi, Dominique d’Humières, Pierre Lallemand, and Li-Shi Luo. Lattice boltzmann equation on a two-dimensional rectangular grid. *Journal of Computational Physics*, 172(2):704 – 717, 2001. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2001.6850>.
- [31] Pierre Lallemand and Li-Shi Luo. Theory of the lattice boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, galilean invariance, and stability. *Phys. Rev. E*, 61: 6546–6562, Jun 2000. doi: 10.1103/PhysRevE.61.6546. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.61.6546>.
- [32] R. Adhikari and S. Succi. Duality in matrix lattice boltzmann models. *Phys. Rev. E*, 78:066701, Dec 2008. doi: 10.1103/PhysRevE.78.066701. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.78.066701>.
- [33] Irina Ginzburg, Frederik Verhaeghe, and d’Humières Dominique. Two-relaxation-time lattice boltzmann scheme: About parametrization, velocity, pressure and mixed boundary conditions. *Communications in Computational Physics*, 3(2):427–478, 2008.
- [34] Irina Ginzburg. Truncation errors, exact and heuristic stability analysis of two-relaxation-times lattice boltzmann schemes for anisotropic advection-diffusion equation. *Communications in Computational Physics*, 11(5):1439–1502, 2012. doi: 10.4208/cicp.211210.280611a.
- [35] S. Ansumali, I. V. Karlin, and H. C. Öttinger. Minimal entropic kinetic models for hydrodynamics. *EPL (Europhysics Letters)*, 63(6):798, 2003. URL <http://stacks.iop.org/0295-5075/63/i=6/a=798>.
- [36] S. S. Chikatamarla, S. Ansumali, and I. V. Karlin. Entropic lattice boltzmann models for hydrodynamics in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 97:010201, Jul 2006. doi: 10.1103/PhysRevLett.97.010201. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.010201>.
- [37] D. d’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, and L. S. Luo. Multiple-relaxation-time lattice boltzmann models in three dimensions. *Philosophical Transactions: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 360(1792):437+, 2002. ISSN 1364503X. doi: 10.2307/3066323.
- [38] Xiaoyi He and Li-Shi Luo. Lattice boltzmann model for the incompressible navier-stokes equation. *Journal of Statistical Physics*, 88(3-4):927–944, 1997. ISSN 0022-4715. doi: 10.1023/B:JOSS.0000015179.12689.e4.

- [39] Rui Du, Baochang Shi, and Xingwang Chen. Multi-relaxation-time lattice boltzmann model for incompressible flow. *Physics Letters A*, 359(6):564 – 572, 2006. ISSN 0375-9601. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2006.07.074>.
- [40] Michael Junk, Axel Klar, and Li-Shi Luo. Asymptotic analysis of the lattice boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, 210(2):676 – 704, 2005. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2005.05.003>.
- [41] Michael Junk and Zhaoxia Yang. Asymptotic analysis of lattice boltzmann boundary conditions. *J. Stat. Phys.*, 121, 2005.
- [42] Takaji Inamuro, Masato Yoshino, and Fumimaru Ogino. Accuracy of the lattice boltzmann method for small knudsen number with finite reynolds number. *Phys. Fluids*, 9(11):3535–3542, 1997.
- [43] Takeshi Kataoka and Michihisa Tsutahara. Accuracy of the lattice boltzmann method for describing the behavior of a gas in the continuum limit. *Phys. Rev. E*, 82:056709, Nov 2010. doi: 10.1103/PhysRevE.82.056709. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.056709>.
- [44] Xiaoyi He, Qisu Zou, Li-Shi Luo, and Micah Dembo. Analytic solutions of simple flows and analysis of nonslip boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. *Journal of Statistical Physics*, 87(1):115–136, 1997. ISSN 1572-9613. doi: 10.1007/BF02181482. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02181482>.
- [45] Irina Ginzburg and Dominique d’Humières. Multireflection boundary conditions for lattice boltzmann models. *Phys. Rev. E*, 68:066614, Dec 2003. doi: 10.1103/PhysRevE.68.066614. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.68.066614>.
- [46] Qisu Zou and Xiaoyi He. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. *Phys. Fluids E*, 9(6):1591–1598, 1997.
- [47] Robert S. Maier, Robert S. Bernard, and Daryl W. Grunau. Boundary conditions for the lattice boltzmann method. *Phys. Fluids*, 8(7), March 1996. doi: 10.1063/1.868961.
- [48] D. R. Noble, S. Chen, J. G. Georgiadis, and R. O. Buckius. A consistent hydrodynamic boundary condition for the lattice Boltzmann method. *Physics of Fluids*, 7(1):203–209, 1995. ISSN 10706631. doi: 10.1063/1.868767.
- [49] Anthony J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized boltzmann equation. part 1. theoretical foundation. *Journal of Fluid Mechanics*, 271:285–309, 7 1994. ISSN 1469-7645. doi: 10.1017/S0022112094001771.
- [50] Renwei Mei, Li-Shi Luo, and Wei Shyy. An accurate curved boundary treatment in the lattice boltzmann method. *Journal of Computational Physics*, 155(2):307 – 330, 1999. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1999.6334>.
- [51] Renwei Mei, Wei Shyy, Dazhi Yu, and Li-Shi Luo. Lattice boltzmann method for 3-d flows with curved boundary. *Journal of Computational Physics*, 161(2):680 – 699, 2000. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2000.6522>.
- [52] Olga Filippova and Dieter Hänel. Grid refinement for lattice-bgk models. *Journal of Computational Physics*, 147(1):219 – 228, 1998. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.6089>.

- [53] M'hamed Bouzidi, Mouaouia Firdaouss, and Pierre Lallemand. Momentum transfer of a boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Physics of Fluids*, 13(11):3452–3459, 2001. doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1399290>.
- [54] Pierre Lallemand and Li-Shi Luo. Lattice boltzmann method for moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 184(2):406 – 421, 2003. ISSN 0021-9991. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991\(02\)00022-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991(02)00022-0).
- [55] Dazhi Yu, Renwei Mei, and Wei Shyy. *A Unified Boundary Treatment in Lattice Boltzmann Method*. Aerospace Sciences Meetings. American Institute of Aeronautics and Astronautics, Jan 2003. doi: 10.2514/6.2003-953. URL <http://dx.doi.org/10.2514/6.2003-953>. 0.
- [56] Zhaoli Guo, Chuguang Zheng, and Baochang Shi. An extrapolation method for boundary conditions in lattice boltzmann method. *Physics of Fluids*, 14(6):2007–2010, 2002. doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1471914>. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/14/6/10.1063/1.1471914>.
- [57] Jonas Lätt. *Hydrodynamic Limit of Lattice Boltzmann Equation*. PhD thesis, Université de Genève, 2007.
- [58] Joris C.G. Verschaeve and Bernhard Müller. A curved no-slip boundary condition for the lattice boltzmann method. *Journal of Computational Physics*, 229(19):6781 – 6803, 2010. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2010.05.022>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999110002834>.
- [59] Zhaoxia Yang. *Analysis of Lattice Boltzmann Boundary Conditions*. PhD thesis, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Sektion Fachbereich Mathematik und Statistik - Universität Konstanz, 2007.
- [60] Michael Junk and Zhaoxia Yang. Outflow boundary conditions for the lattice boltzmann method. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 8(1-4):38–48, 2008. doi: <http://dx.doi.org/10.1504/PCFD.2008.018077>.
- [61] Zhaoxia Yang. Lattice boltzmann outflow treatments: Convective conditions and others. *Computers & Mathematics with Applications*, 65(2):160 – 171, 2013. ISSN 0898-1221. doi: 10.1016/j.camwa.2012.11.012. Special Issue on Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES-2010, Edmonton, Canada).
- [62] Cyrus K. Aidun, Yannan Lu, and E.-Jiang Ding. Direct analysis of particulate suspensions with inertia using the discrete boltzmann equation. *Journal of Fluid Mechanics*, 373:287–311, 10 1998. ISSN 1469-7645. doi: 10.1017/S0022112098002493.
- [63] A. Caiazzo. Analysis of lattice boltzmann nodes initialization in moving boundary problems. *Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal*, 8: 3–10, 2008. doi: 10.1504/PCFD.2008.018074.
- [64] Siddharth Krithivasan, Siddhant Wahal, and Santosh Ansumali. Diffused bounce-back condition and refill algorithm for the lattice boltzmann method. *Phys. Rev. E*, 89:033313, Mar 2014. doi: 10.1103/PhysRevE.89.033313.
- [65] Renwei Mei, Dazhi Yu, Wei Shyy, and Li-Shi Luo. Force evaluation in the lattice boltzmann method involving curved geometry. *Phys. Rev. E*, 65:041203, Apr 2002. doi: 10.1103/PhysRevE.65.041203.

- [66] Binghai Wen, Huabing Li, Chaoying Zhang, and Haiping Fang. Lattice-type-dependent momentum-exchange method for moving boundaries. *Phys. Rev. E*, 85: 016704, Jan 2012. doi: 10.1103/PhysRevE.85.016704.
- [67] Binghai Wen, Chaoying Zhang, Yusong Tu, Chunlei Wang, and Haiping Fang. Galilean invariant fluid-solid interfacial dynamics in lattice boltzmann simulations. *J. Comput. Phys.*, 266:161–170, June 2014. ISSN 0021-9991. doi: 10.1016/j.jcp.2014.02.018.
- [68] O. Filippova and D. Hänel. Boundary-fitting and local grid refinement for lattice-bgk models. *International Journal of Modern Physics C*, 09(08):1271–1279, 1998. doi: 10.1142/S012918319800114X.
- [69] Dazhi Yu, Renwei Mei, and Wei Shyy. A multi-block lattice boltzmann method for viscous fluid flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 39(2): 99–120, 2002. ISSN 1097-0363. doi: 10.1002/fld.280. URL <http://dx.doi.org/10.1002/fld.280>.
- [70] Jonas Tölke, Sören Freudiger, and Manfred Krafczyk. An adaptive scheme using hierarchical grids for lattice boltzmann multi-phase flow simulations. *Computers & Fluids*, 35(8–9):820 – 830, 2006. ISSN 0045-7930. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2005.08.010>. Proceedings of the First International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science.
- [71] D. Lagrava, O. Malaspinas, J. Latt, and B. Chopard. Advances in multi-domain lattice boltzmann grid refinement. *Journal of Computational Physics*, 231(14):4808 – 4822, 2012. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2012.03.015>.
- [72] Salvador Izquierdo and Norberto Fueyo. Characteristic nonreflecting boundary conditions for open boundaries in lattice boltzmann methods. *Phys. Rev. E*, 78:046707, Oct 2008. doi: 10.1103/PhysRevE.78.046707.
- [73] Daniel Heubes, Andreas Bartel, and Matthias Ehrhardt. Characteristic boundary conditions in the lattice boltzmann method for fluid and gas dynamics. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 262:51 – 61, 2014. ISSN 0377-0427. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2013.09.019>. Selected Papers from NUMDIFF-13.
- [74] Juan P. Giovacchini, Omar E. Ortiz, and Carlos Sacco. El método de lattice boltzmann con condiciones de borde en geometrías arbitrarias no regulares. *Mecánica Computacional*, XXXI:165–183, 11 2012.
- [75] XIAOWEN SHAN, XUE-FENG YUAN, and HUDONG CHEN. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the navier–stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics*, 550:413–441, 2006. doi: 10.1017/S0022112005008153.
- [76] Philip J. Davis and Philip Rabinowitz. *Methods of Numerical Integration*. Computer Science and Applied Mathematics. Academic Press, Inc., 2 edition, 1984.
- [77] Y. H. Qian, D. D’Humières, and P. Lallemand. Lattice bgk models for navier-stokes equation. *EPL (Europhysics Letters)*, 17(6):479, 1992. URL <http://stacks.iop.org/0295-5075/17/i=6/a=001>.
- [78] Hudong Chen, Shiyi Chen, and William H. Matthaeus. Recovery of the navier-stokes equations using a lattice-gas boltzmann method. *Phys. Rev. A*, 45:R5339–R5342, Apr 1992. doi: 10.1103/PhysRevA.45.R5339. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.45.R5339>.

- [79] X. D. Niu, C. Shu, Y. T. Chew, and T. G. Wang. Investigation of stability and hydrodynamics of different lattice boltzmann models. *Journal of Statistical Physics*, 117(3):665–680, Nov 2004. ISSN 1572-9613. doi: 10.1007/s10955-004-2264-x. URL <https://doi.org/10.1007/s10955-004-2264-x>.
- [80] Paul J. Dellar. Bulk and shear viscosities in lattice boltzmann equations. *Phys. Rev. E*, 64:031203, Aug 2001. doi: 10.1103/PhysRevE.64.031203. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.031203>.
- [81] Wahyu Perdana Yudistiawan, Sang Kyu Kwak, D. V. Patil, and Santosh Ansumali. Higher-order galilean-invariant lattice boltzmann model for microflows: Single-component gas. *Phys. Rev. E*, 82:046701, Oct 2010. doi: 10.1103/PhysRevE.82.046701. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.046701>.
- [82] Chongxun Pan, Li-Shi Luo, and Cass T. Miller. An evaluation of lattice boltzmann schemes for porous medium flow simulation. *Computers & Fluids*, 35(8–9):898–909, 2006. ISSN 0045-7930. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2005.03.008>. Proceedings of the First International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science.
- [83] Li-Shi Luo, Wei Liao, Xingwang Chen, Yan Peng, and Wei Zhang. Numerics of the lattice boltzmann method: Effects of collision models on the lattice boltzmann simulations. *Phys. Rev. E*, 83:056710, May 2011. doi: 10.1103/PhysRevE.83.056710.
- [84] Sauro Succi, Iliya V. Karlin, and Hudong Chen. *Colloquium* : Role of the H theorem in lattice boltzmann hydrodynamic simulations. *Rev. Mod. Phys.*, 74:1203–1220, Nov 2002. doi: 10.1103/RevModPhys.74.1203.
- [85] Michel O. Deville and Thomas B. Gatski. *Mathematical Modeling for Complex Fluids and Flows*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2012.
- [86] Pietro Asinari. *Multi-Scale Analysis of Heat and Mass Transfer in Mini/Micro-Structures*. PhD thesis, Engineering Faculty of Politecnico di Torino, 2005.
- [87] Li-Shi Luo. *Lattice-Gas Automata and Lattice Boltzmann Equations for two-dimensional hydrodynamics*. PhD thesis, Georgia Institute of Technology, 1993.
- [88] Y. Sone. *Molecular Gas Dynamics: Theory, Techniques, and Applications*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Springer London, Limited, 2007. ISBN 9780817645731.
- [89] Zhi-Gang Feng and Efstathios E Michaelides. The immersed boundary-lattice boltzmann method for solving fluid–particles interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 195(2):602 – 628, 2004. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2003.10.013>.
- [90] Zhi-Gang Feng and Efstathios E. Michaelides. Proteus: a direct forcing method in the simulations of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 202(1):20 – 51, 2005. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2004.06.020>.
- [91] Dazhi Yu, Renwei Mei, and Wei Shyy. Improved treatment of the open boundary in the method of lattice boltzmann equation: general description of the method. *Progress in Computational Fluid Dynamics, an International Journal*, 5(1):3 – 12, 2005. doi: 10.1504/PCFD.2005.005812.

- [92] Alireza Najafiyazdi and Luc Mongeau. chapter A Perfectly Matched Layer Formulation for Lattice Boltzmann Method. *Aeroacoustics Conferences*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, May 2009. doi: 10.2514/6.2009-3117. URL <http://dx.doi.org/10.2514/6.2009-3117>. 0.
- [93] A. Najafi-Yazdi and L. Mongeau. An absorbing boundary condition for the lattice boltzmann method based on the perfectly matched layer. *Computers & Fluids*, 68:203 – 218, 2012. ISSN 0045-7930. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.07.017>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004579301200285X>.
- [94] Kevin W Thompson. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 68(1):1 – 24, 1987. ISSN 0021-9991. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(87\)90041-6](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(87)90041-6). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999187900416>.
- [95] T.J Poinsoot and S.K Lelef. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101(1):104 – 129, 1992. ISSN 0021-9991. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90046-2](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(92)90046-2). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999192900462>.
- [96] Eleuterio Toro. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics:A Practical Introduction*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2 edition, 1999. ISBN 3-540-65966-8.
- [97] R. Cornubert, D. d’Humières, and D. Levermore. A knudsen layer theory for lattice gases. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 47(1):241 – 259, 1991. ISSN 0167-2789. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789\(91\)90295-K](http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789(91)90295-K). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016727899190295K>.
- [98] Donald P. Ziegler. Boundary conditions for lattice boltzmann simulations. *Journal of Statistical Physics*, 71(5):1171–1177, 1993. ISSN 1572-9613. doi: 10.1007/BF01049965. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF01049965>.
- [99] I. Ginzbourg and P.M. Adler. Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice boltzmann model. *Journal de Physique II*, 4:191–214, feb 1994. doi: 10.1051/jp2:1994123.
- [100] Qisu Zou, Shuling Hou, and Gary D. Doolen. Analytical solutions of the lattice boltzmann bgk model. *Journal of Statistical Physics*, 81(1):319–334, 1995. ISSN 1572-9613. doi: 10.1007/BF02179981. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02179981>.
- [101] Ho Chih-Fung, Chang Cheng, Lin Kuen-Hau, and Lin Chao-An. Consistent boundary conditions for 2d and 3d lattice boltzmann simulations. *cmes*, 44-2:137–155, 2009.
- [102] Qing-Dong Cai. Lattice boltzmann simulation of flows in bifurcate channel at rotating inflow boundary conditions and resulted different outflow fluxes. *Acta Mechanica Sinica*, 27(4):510–518, 08 2011. doi: 10.1007/s10409-011-0466-4.
- [103] Martin Hecht and Jens Harting. Implementation of on-site velocity boundary conditions for d3q19 lattice boltzmann simulations. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(01):P01018, 2010.

- [104] Heinz-Otto Kreiss. Initial boundary value problems for hyperbolic systems. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 23(3):277–298, 1970. ISSN 1097-0312. doi: 10.1002/cpa.3160230304. URL <http://dx.doi.org/10.1002/cpa.3160230304>.
- [105] Xiaoyi He, Li-Shi Luo, and Micah Dembo. Some progress in lattice boltzmann method. part i. nonuniform mesh grids. *Journal of Computational Physics*, 129(2):357 – 363, 1996. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1996.0255>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999196902557>.
- [106] Xiaoyi He and Gary D. Doolen. Lattice boltzmann method on a curvilinear coordinate system: Vortex shedding behind a circular cylinder. *Phys. Rev. E*, 56:434–440, Jul 1997. doi: 10.1103/PhysRevE.56.434. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.56.434>.
- [107] Haowen Xi, Gongwen Peng, and So-Hsiang Chou. Finite-volume lattice boltzmann schemes in two and three dimensions. *Phys. Rev. E*, 60:3380–3388, Sep 1999. doi: 10.1103/PhysRevE.60.3380. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.60.3380>.
- [108] S. Ubertini, G. Bella, and S. Succi. Lattice boltzmann method on unstructured grids: Further developments. *Phys. Rev. E*, 68:016701, Jul 2003. doi: 10.1103/PhysRevE.68.016701. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.68.016701>.
- [109] Xuewen Yin, Guigao Le, and Junfeng Zhang. Mass and momentum transfer across solid-fluid boundaries in the lattice-boltzmann method. *Phys. Rev. E*, 86:026701, Aug 2012. doi: 10.1103/PhysRevE.86.026701. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.026701>.
- [110] Bastien Chopard and Alexandre Dupuis. A mass conserving boundary condition for lattice boltzmann models. *International Journal of Modern Physics B*, 17(01n02):103–107, 2003. doi: 10.1142/S0217979203017151. URL <http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979203017151>.
- [111] A. Sohankar, C. Norberg, and L. Davidson. Low-reynolds-number flow around a square cylinder at incidence: study of blockage, onset of vortex shedding and outlet boundary condition. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 26(1):39–56, 1998. ISSN 1097-0363. doi: 10.1002/(SICI)1097-0363(19980115)26:1<39::AID-FLD623>3.0.CO;2-P.
- [112] Dazhi Yu, Renwei Mei, Li-Shi Luo, and Wei Shyy. Viscous flow computations with the method of lattice boltzmann equation. *Progress in Aerospace Sciences*, 39(5): 329 – 367, 2003. ISSN 0376-0421. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0376-0421\(03\)00003-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0376-0421(03)00003-4).
- [113] CyrusK. Aidun and Yannan Lu. Lattice boltzmann simulation of solid particles suspended in fluid. *Journal of Statistical Physics*, 81(1-2):49–61, 1995. ISSN 0022-4715. doi: 10.1007/BF02179967. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02179967>.
- [114] Takaji Inamuro, Koji Maeba, and Fumimaru Ogino. Flow between parallel walls containing the lines of neutrally buoyant circular cylinders. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(12):1981 – 2004, 2000. ISSN 0301-9322. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0301-9322\(00\)00007-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0301-9322(00)00007-0).

- [115] Zhenhua Xia, Kevin W. Connington, Saikiran Rapaka, Pengtao Yue, James J. Feng, and Shiyi Chen. Flow patterns in the sedimentation of an elliptical particle. *Journal of Fluid Mechanics*, 625:249–272, 4 2009. ISSN 1469-7645. doi: 10.1017/S0022112008005521.
- [116] Huabing Li, Xiaoyan Lu, Haiping Fang, and Yuehong Qian. Force evaluations in lattice boltzmann simulations with moving boundaries in two dimensions. *Phys. Rev. E*, 70:026701, Aug 2004. doi: 10.1103/PhysRevE.70.026701.
- [117] Anthony J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized boltzmann equation. part 2. numerical results. *Journal of Fluid Mechanics*, 271:311–339, 7 1994. ISSN 1469-7645. doi: 10.1017/S0022112094001783.
- [118] Alfonso Caiazzo and Michael Junk. Boundary force in lattice boltzmann: Analysis of momentum exchange algorithm. *Computers and Mathematics with Applications*, 55:1415–1423, 2008.
- [119] Jonathan R. Clausen and Cyrus K. Aidun. Galilean invariance in the lattice-boltzmann method and its effect on the calculation of rheological properties in suspensions. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(4):307 – 311, 2009. ISSN 0301-9322. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2009.01.007>.
- [120] J. Feng, H. H. Hu, and D. D. Joseph. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a newtonian fluid part 1. sedimentation. *Journal of Fluid Mechanics*, 261:95–134, 1994. ISSN 1469-7645. doi: 10.1017/S0022112094000285.
- [121] E-Jiang Ding and CyrusK. Aidun. Extension of the lattice-boltzmann method for direct simulation of suspended particles near contact. *Journal of Statistical Physics*, 112(3-4):685–708, 2003. ISSN 0022-4715. doi: 10.1023/A:1023880126272. URL <http://dx.doi.org/10.1023/A%3A1023880126272>.
- [122] Hudong Chen. Volumetric formulation of the lattice boltzmann method for fluid dynamics: Basic concept. *Phys. Rev. E*, 58:3955–3963, Sep 1998. doi: 10.1103/PhysRevE.58.3955. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.58.3955>.
- [123] H. Chen, O. Filippova, J. Hoch, K. Molvig, R. Shock, C. Teixeira, and R. Zhang. Grid refinement in lattice boltzmann methods based on volumetric formulation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 362(1):158 – 167, 2006. ISSN 0378-4371. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2005.09.036>. Discrete Simulation of Fluid Dynamics Proceedings of the 13th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics 13th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics.
- [124] M. Rohde, D. Kandhai, J. J. Derksen, and H. E. A. van den Akker. A generic, mass conservative local grid refinement technique for lattice-boltzmann schemes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 51(4):439–468, 2006. ISSN 1097-0363. doi: 10.1002/fld.1140.
- [125] Abbas Fakhari and Taehun Lee. Finite-difference lattice boltzmann method with a block-structured adaptive-mesh-refinement technique. *Phys. Rev. E*, 89:033310, Mar 2014. doi: 10.1103/PhysRevE.89.033310. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.89.033310>.

- [126] Alexandre Dupuis and Bastien Chopard. Theory and applications of an alternative lattice boltzmann grid refinement algorithm. *Phys. Rev. E*, 67:066707, Jun 2003. doi: 10.1103/PhysRevE.67.066707.
- [127] Songying Chen, Cheng Peng, Yihua Teng, Lian-Ping Wang, and Kun Zhang. Improving lattice boltzmann simulation of moving particles in a viscous flow using local grid refinement. *Computers & Fluids*, 136:228 – 246, 2016. ISSN 0045-7930. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2016.06.009>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793016301943>.
- [128] A. Miyamura, S. Iwasaki, and T. Ishii. Experimental wall correction factors of single solid spheres in triangular and square cylinders, and parallel plates. *International Journal of Multiphase Flow*, 7(1):41 – 46, 1981. ISSN 0301-9322. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0301-9322\(81\)90013-6](http://dx.doi.org/10.1016/0301-9322(81)90013-6).
- [129] B. F. Ryan, E. R. Wishart, and D. E. Shaw. The growth rates and densities of ice crystals between $3C^\circ$ and $21C^\circ$. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 33(5): 842–850, 1976. doi: 10.1175/1520-0469(1976)033<0842:TGRADO>2.0.CO;2.
- [130] Andrew J. Heymsfield and Jean Iaquinta. Cirrus crystal terminal velocities. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 57(7):916–938, 2000. doi: 10.1175/1520-0469(2000)057<0916:CCTV>2.0.CO;2.
- [131] Choji Magono and Chung Woo Lee. Meteorological classification of natural snow crystals. *Journal of the Faculty of Science, Hokkaido University. Series 7, Geophysics*, 2(4), Nov 1966.
- [132] Matthew P. Bailey and John Hallett. A comprehensive habit diagram for atmospheric ice crystals: Confirmation from the laboratory, airs ii, and other field studies. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 66(9):2888–2899, 2009. doi: 10.1175/2009JAS2883.1. URL <http://dx.doi.org/10.1175/2009JAS2883.1>.
- [133] H. Lindqvist, K. Muinonen, T. Nousiainen, J. Um, G. M. McFarquhar, P. Haapanala, R. Makkonen, and H. Hakkarainen. Ice-cloud particle habit classification using principal components. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 117(D16), 2012. ISSN 2156-2202. doi: 10.1029/2012JD017573. URL <http://dx.doi.org/10.1029/2012JD017573>. D16206.
- [134] Junshik Um and Greg M. McFarquhar. Single-scattering properties of aggregates of plates. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 135(639):291–304, 2009. ISSN 1477-870X. doi: 10.1002/qj.378. URL <http://dx.doi.org/10.1002/qj.378>.
- [135] T. Eidhammer, H. Morrison, A. Bansemer, A. Gettelman, and A. J. Heymsfield. Comparison of ice cloud properties simulated by the community atmosphere model (cam5) with in-situ observations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14(18): 10103–10118, 2014. doi: 10.5194/acp-14-10103-2014.
- [136] Vitaly I. Khvorostyanov and Judith A. Curry. Terminal velocities of droplets and crystals: Power laws with continuous parameters over the size spectrum. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 59(11):1872–1884, 2002. doi: 10.1175/1520-0469(2002)059<1872:TVODAC>2.0.CO;2.

- [137] M. Kajikawa. Laboratory measurement of falling velocity of individual ice crystals. *Meteorological Society of Japan. Journal. Ser.II*, Vol. 51(no. 4):P.263–272, 1973. 7 refs. CRREL Acc. No: 28002698.
- [138] C. D. Westbrook. The fall speeds of sub-100 m ice crystals. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 134(634):1243–1251, 2008. ISSN 1477-870X. doi: 10.1002/qj.290.
- [139] A. J. Heymsfield and C. D. Westbrook. Advances in the estimation of ice particle fall speeds using laboratory and field measurements. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 67(8):2469–2482, Apr 2010. ISSN 0022-4928. doi: 10.1175/2010JAS3379.1.
- [140] Johannes P. Böhm. A general equation for the terminal fall speed of solid hydrometeors. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 46(15):2419–2427, 1989. doi: 10.1175/1520-0469(1989)046<2419:AGEFTT>2.0.CO;2.
- [141] Johannes Peter Böhm. A general hydrodynamic theory for mixed-phase microphysics. part i: drag and fall speed of hydrometeors. *Atmospheric Research*, 27(4):253 – 274, 1992. ISSN 0169-8095. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0169-8095\(92\)90035-9](http://dx.doi.org/10.1016/0169-8095(92)90035-9).
- [142] David L. Mitchell. Use of mass- and area-dimensional power laws for determining precipitation particle terminal velocities. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 53(12):1710–1723, 1996. doi: 10.1175/1520-0469(1996)053<1710:UOMAAD>2.0.CO;2.
- [143] David L. Mitchell and Andrew J. Heymsfield. Refinements in the treatment of ice particle terminal velocities, highlighting aggregates. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 62(5):1637–1644, 2005. doi: 10.1175/JAS3413.1. URL <http://dx.doi.org/10.1175/JAS3413.1>.
- [144] Vitaly I. Khvorostyanov and Judith A. Curry. Fall velocities of hydrometeors in the atmosphere: Refinements to a continuous analytical power law. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 62(12):4343–4357, 2005. doi: 10.1175/JAS3622.1.
- [145] K. O. L. F. Jayaweera and R. E. Cottis. Fall velocities of plate-like and columnar ice crystals. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 95(406):703–709, 1969. ISSN 1477-870X. doi: 10.1002/qj.49709540604.
- [146] K. O. L. F. Jayaweera and B. F. Ryan. Terminal velocities of ice crystals. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 98(415):193–197, 1972. ISSN 1477-870X. doi: 10.1002/qj.49709841516.
- [147] John D. Locatelli and Peter V. Hobbs. Fall speeds and masses of solid precipitation particles. *Journal of Geophysical Research*, 79(15):2185–2197, 1974. ISSN 2156-2202. doi: 10.1029/JC079i015p02185.
- [148] Gabriel Michaeli. Settling velocities of small ice crystals. *Tellus*, 29(3):282–285, 1977. ISSN 2153-3490. doi: 10.1111/j.2153-3490.1977.tb00737.x.
- [149] Rodrigo E. Bürgesser, Eldo E. Ávila, and Nesvit E. Castellano. Laboratory measurements of sedimentation velocity of columnar ice crystals. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 2016. ISSN 1477-870X. doi: 10.1002/qj.2766. URL <http://dx.doi.org/10.1002/qj.2766>.
- [150] Christopher David Westbrook, Robin J. Hogan, and Anthony J. Illingworth. The capacitance of pristine ice crystals and aggregate snowflakes. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 65(1):206–219, 2008. ISSN 0022-4928. doi: 10.1175/2007JAS2315.1.

- [151] Joseph B. Hubbard and Jack F. Douglas. Hydrodynamic friction of arbitrarily shaped brownian particles. *Phys. Rev. E*, 47:R2983–R2986, May 1993. doi: 10.1103/PhysRevE.47.R2983.
- [152] Kai-Yuan Cheng and Pao K. Wang. A numerical study of the flow fields around falling hails. *Atmospheric Research*, 132:253 – 263, 2013. ISSN 0169-8095. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosres.2013.05.016>.
- [153] Kai-Yuan Cheng, Pao K. Wang, and Tempei Hashino. A numerical study on the attitudes and aerodynamics of freely falling hexagonal ice plates. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 72(9):3685–3698, 2015. doi: 10.1175/JAS-D-15-0059.1.
- [154] Tempei Hashino, Kai-Yuan Cheng, Chih-Che Chueh, and Pao K. Wang. Numerical study of motion and stability of falling columnar crystals. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 73(5):1923–1942, 2016. doi: 10.1175/JAS-D-15-0219.1. URL <https://doi.org/10.1175/JAS-D-15-0219.1>.
- [155] Cyrus K. Aidun and Jonathan R. Clausen. Lattice-boltzmann method for complex flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42(1):439–472, 2010. doi: 10.1146/annurev-fluid-121108-145519.
- [156] Hans R. Pruppacher, James D. Klett, and Pao K. Wang. Microphysics of clouds and precipitation. *Aerosol Science and Technology*, 28(4):381–382, 1998. doi: 10.1080/02786829808965531. URL <http://dx.doi.org/10.1080/02786829808965531>.
- [157] Andrew J. Heymsfield and C. M. R. Platt. A parameterization of the particle size spectrum of ice clouds in terms of the ambient temperature and the ice water content. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41(5):846–855, 1984. doi: 10.1175/1520-0469(1984)041<0846:APOTPS>2.0.CO;2. URL [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469\(1984\)041<0846:APOTPS>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469(1984)041<0846:APOTPS>2.0.CO;2).
- [158] J. Um, G. M. McFarquhar, Y. P. Hong, S.-S. Lee, C. H. Jung, R. P. Lawson, and Q. Mo. Dimensions and aspect ratios of natural ice crystals. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 15(7):3933–3956, 2015. doi: 10.5194/acp-15-3933-2015. URL <http://www.atmos-chem-phys.net/15/3933/2015/>.
- [159] J. I. Katz. Subsuns and low reynolds number flow. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 55(22):3358–3362, 1998. doi: 10.1175/1520-0469(1998)055<3358:SALRNF>2.0.CO;2. URL [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469\(1998\)055<3358:SALRNF>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469(1998)055<3358:SALRNF>2.0.CO;2).
- [160] K. O. L. F. Jayaweera and B. J. Mason. The behaviour of freely falling cylinders and cones in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 22(4):709–720, 1965. doi: 10.1017/S002211206500109X.
- [161] Johannes Peter Böhm. Review of flow characteristics and kinematics of hydrometeors in free fall. *Atmospheric Research*, 26(4):285 – 302, 1991. ISSN 0169-8095.
- [162] Mariela Carpinella, Manuel I. Velasco, Emilia V. Silletta, Juan M. Ovejero, Sergio A. Dassie, and Rodolfo H. Acosta. Determination of flow patterns in a rotating disk electrode configuration by mri. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 750 (Supplement C):100 – 106, 2015. ISSN 1572-6657. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2015.05.018>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1572665715002453>.

- [163] Daniel Edelhoff, Lars Walczak, Stefan Henning, Frank Weichert, and Dieter Suter. High-resolution mri velocimetry compared with numerical simulations. 235C:42–49, 07 2013.
- [164] A. Alexiadis, A. Cornell, and M.P. Dudukovic. Comparison between cfd calculations of the flow in a rotating disk cell and the cochran/levich equations. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 669(Supplement C):55 – 66, 2012. ISSN 1572-6657. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2012.01.024>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S157266571200046X>.
- [165] H.O. Kreiss and O.E. Ortiz. *Introduction to Numerical Methods for Time Dependent Differential Equations*. Wiley, 2014. ISBN 9781118838914.
- [166] Allen J. Bard and Larry R. Faulkner. *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*. John Wiley & Sons, Inc, December 2001. ISBN 978-0-471-04372-0.
- [167] John Newman. Current distribution on a rotating disk below the limiting current. *Journal of The Electrochemical Society*, 113(12):1235–1241, 1966. doi: 10.1149/1.2423795. URL <http://jes.ecsdl.org/content/113/12/1235.abstract>.
- [168] R. J. Orth, R. S. Parikh, and K. C. Liddell. Application of the rotating ringdisk electrode in determining the secondorder rate constant for the reaction between cu(i) and fe(iii) in 1.0 mol/dm³ hcl. *Journal of The Electrochemical Society*, 136(10):2924–2930, 1989. doi: 10.1149/1.2096374. URL <http://jes.ecsdl.org/content/136/10/2924.abstract>.
- [169] L. Rajendran, A. Subbiah, and T. Vasudevan. A two-point padé approximation for the mass-transfer rate at rotating disc electrodes. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 547(2):173 – 177, 2003. ISSN 1572-6657. doi: [https://doi.org/10.1016/S0022-0728\(03\)00217-1](https://doi.org/10.1016/S0022-0728(03)00217-1). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022072803002171>.
- [170] Jesus Gonzalez, Cesar Real, Luis Hoyos, Raul Miranda, and Francisco Cervantes. Characterization of the hydrodynamics inside a practical cell with a rotating disk electrode. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 651(2):150 – 159, 2011. ISSN 1572-6657. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2010.11.021>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1572665710004856>.
- [171] W. G. Cochran. The flow due to a rotating disc. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 30(3):365–375, 1934. doi: 10.1017/S0305004100012561.
- [172] Herbert Goldstein, Charles P. Poole, and John L. Safko. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, 3 edition, June 2001. ISBN 0201657023.
- [173] J. P. Rivet and J. P. Boon. *Lattice Gas Hydrodynamics*. Cambridge University Press, 2001. ISBN 978-0521419444.
- [174] Carlo Cercignani and David H. Sattinger. *Scaling Limits and Models in Physical Processes*. Oberwolfach Seminars (Book 28). Birkhäuser, 1998. ISBN 978-3764359850.
- [175] E. Weinan. Principles of multiscale modeling, 2011.
- [176] Dewei Qi and Li-Shi Luo. Rotational and orientational behaviour of three-dimensional spheroidal particles in couette flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 477: 201–213, 2003. doi: 10.1017/S0022112002003191.

- [177] G. B. Jeffery. The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 102(715):161–179, 1922. ISSN 0950-1207. doi: 10.1098/rspa.1922.0078.
- [178] International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE). Gid - the personal pre and post processor. URL <https://www.gidhome.com>.
- [179] David M. Mount. *Lecture notes, course CMSC 754 - Computational Geometry*. Department of Computer Science - University of Maryland, 2002.
- [180] Mark de Berg, Otfried Cheong, Marc van Kreveld, and Mark Overmars. *Computational Geometry - Algorithms and Applications*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2008.
- [181] R.A. Adams. *Calculus: A Complete Course*. Addison-Wesley Longman, Incorporated, 2002. ISBN 9780201791310.