

*IMPLEMENTACIÓN DE MÉTODOS NUMÉRICOS BASADOS EN EL
MODELO DE LATTICE BOLTZMANN PARA APLICACIONES EN
DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL*

*IMPLEMENTATION OF NUMERICAL METHODS BASED ON THE
LATTICE BOLTZMANN MODEL FOR COMPUTATIONAL FLUID
DYNAMICS APPLICATIONS*

CAMILO ESTEBAN SOTO SARAY

camiloe.sotos@utadeo.edu.co

Director:

Dr. GABRIEL VILLALOBOS CAMARGO

Trabajo de grado para optar por el título de ingeniero ambiental



Facultad de Ciencias Básicas e Ingeniería

Bogotá D.C, Colombia

2021

“Si he visto más lejos es porque estoy
sentado sobre hombros de gigantes.”

Sir Isaac Newton

“Los encantos de esta ciencia sublime, las
matemáticas, sólo se le revelan a aquellos que
tienen el valor de profundizar en ella.”

Carl Friedrich Gauss

A mi familia

AGRADECIMIENTOS

Quisiera expresar mi más profundo y sincero agradecimiento al profesor Gabriel Villalobos, quien confió en mis capacidades y me brindó su paciencia y los conocimientos necesarios durante estos años para el desarrollo de este proyecto; acompañando mi entusiasmo y disposición para el estudio de esta hermosa ciencia, y a quien quisiera dedicar la siguiente frase: “El talento se educa en la calma y el carácter en la tempestad (Johann Wolfgang Goethe) “.

A mis padres, quienes me han acompañado y brindado todas las herramientas necesarias para salir adelante, infundiendo alegría y apoyo incondicional en estos tiempos difíciles. A mi hermano, con quien es un gusto compartir este encanto por las matemáticas y quien ha sido parte importante de inspiración para este trabajo. También quiero agradecer a mis demás familiares, quienes han sido parte fundamental durante todo este trayecto. A mi novia, por estar y compartir conmigo momentos alegres y difíciles de este proceso, siendo ella un pilar importante para el mismo.

Por último, quisiera agradecer a la Universidad de Bogotá Jorge Tadeo Lozano y a todos y cada uno de los profesores que hicieron parte de mi vida académica; siendo ellos transmisores de conocimientos y valores.

Con relación a lo desarrollado en este proyecto, se tiene la implementación del método Lattice Boltzmann (LBM) para la simulación de flujos alrededor de un círculo a diferentes números de Reynolds, mediante el lenguaje de programación Python; haciendo uso de la librería pylbm la cual permitió realizar un modelo D2Q9 (dos dimensiones y nueve velocidades), brindando una aproximación numérica a las soluciones relacionadas con las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes (NS).

Como parte del componente primario revisado para la implementación de este modelo, se desarrollaron simulaciones mediante funciones de equilibrio que relacionan los momentos y las velocidades del sistema partiendo de los conceptos definidos en mecánica de fluidos; consecutivamente, se aplicó el mecanismo BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) relacionado al proceso de transmisión y propagación fundamentados en la teoría cinético molecular de la materia.

Por otro lado, se realizó la discretización espacial y temporal por medio de arreglos regulares de celdas, que hacen parte de una estructura Euclidiana, mediante autómatas celulares con el fin de clasificar reglas de actualización que determinan la evolución espacio-temporal del sistema dinámico propuesto.

Finalmente, como parte de los resultados de este proyecto y con base a las simulaciones adelantadas, se evidenció el campo de velocidades proyectado por el movimiento del fluido a través del cuerpo sólido, caracterizados por diferentes números de Reynolds mostrando la importancia de los arreglos estructurales en el movimiento y transporte de fluidos.

Palabras Clave: Condiciones de frontera, equilibrio, propagación, colisión, momento, velocidad.

In relation to what has been developed in this project, the implementation of the Lattice Boltzmann Method (LBM) for the simulation of flows around a circle at different Reynolds numbers was carried out using the Python programming language, making use of the pylbm library, which allowed a D2Q9 model (two dimensions and nine speeds) to be created, providing a numerical approximation to the solutions related to the incompressible Navier-Stokes (NS) equations.

As part of the primary component reviewed for the implementation of this model, simulations were developed using equilibrium functions that relate the moments and velocities of the system based on the concepts defined in fluid mechanics; consequently, the BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) mechanism related to the transmission and propagation process based on the kinetic molecular theory of matter was applied.

On the other hand, the spatial and temporal discretisation was carried out by means of regular arrays of cells, which are part of a Euclidean structure, by means of cellular automata in order to classify update rules that determine the spatio-temporal evolution of the proposed dynamic system.

Finally, as part of the results of this project and based on the simulations carried out, the velocity field projected by the movement of the fluid through the solid body was demonstrated, characterized by different Reynolds numbers, showing the importance of the structural arrangements in the movement and transport of fluids.

Keywords: Boundary conditions, equilibrium, streaming, collision, momentum, velocity.

Tabla de contenido

RESUMEN I	5
ABSTRACT II	6
1 INTRODUCCIÓN	14
1.1 Ecuaciones de Navier-Stokes para el movimiento y transporte de fluidos	16
1.1.1 Descripción Euleriana y Lagrangiana en mecánica de fluidos.....	17
1.1.2 Ley de conservación de momentum	19
1.1.3 Ley de conservación de masa	20
2. OBJETIVOS	23
2.1 Objetivo General	23
2.1.1 Objetivos específicos.....	23
3. MARCO TEÓRICO	24
3.1 Autómata Celular (AC)	25
3.2 Autómata Celular Unidimensional.....	26
3.3 Clasificación de los Autómatas Celulares	28
3.3.1 Autómatas de Clase I	28
3.3.2 Autómata de clase II.....	28
3.3.3 Autómata de clase III.....	29
3.3.4 Autómata de clase IV.....	29
3.4 Autómata Celular Bidimensional.....	30
3.4.1 Vecindad de Von Neumann.....	30
3.4.2 Vecindades de Moore.....	32
3.5 Condiciones de Frontera de los AC.....	33
3.5.1 Condición de frontera abierta.....	33
3.5.2 Condición de frontera periódica.....	33
3.5.3 Condición de frontera reflectora.....	34
3.5.4 Condición sin frontera.....	34
3.6 Lattice Gas Cellular Automata (LGCA)	34
3.7 El Método de Lattice Boltzmann (LBM).....	35
3.7.1 Teoría cinética molecular de la materia.....	35
3.7.2 Función de distribución de densidad de probabilidad.....	36
3.7.3 Notación $DnQm$	39
3.7.4 Aproximación de Bhanthnagar, Gross y Krook (BGK).....	42

3.7.5 Condiciones de contorno en LBM	44
4. MATERIALES Y MÉTODOS	47
4.1 Geometría de la simulación	47
4.2 Malla de velocidades y direcciones para la Simulación	48
4.3 Dominio de la simulación.....	49
4.4 Esquema de momentos y velocidades para tiempos de relajación múltiple (MRT) .	51
5. CONCLUSIONES	57
Referencias	59
Bibliografía.....	60

Índice de Figuras

Figura 1. Escalas de análisis para fluidos	15
Figura 2. Enfoque Euleriano del movimiento de fluidos	18
Figura 3. Enfoque Lagrangiano del movimiento de fluidos	18
Figura 4. Paso de un fluido por un volumen de control.....	21
Figura 5. Orden de los autómatas celulares unidimensionales.....	26
Figura 6. Autómata celular unidimensional con rango igual a 1 y L igual a 5.....	26
Figura 7. Autómata celular unidimensional con rango igual a 2.....	27
Figura 8. Autómata celular clase I: Regla 222.....	28
Figura 9. Autómata celular clase II: Regla 94.....	29
Figura 10. Autómata celular clase III: Regla 30.....	29
Figura 11. Autómata celular clase IV: Regla 110.....	30
Figura 12. Vecindad de Von Neumann con $r = 1$	31
Figura 13. Vecindad de Von Neumann con $r = 2$	31
Figura 14. Vecindad de Moore con $r = 1$	32
Figura 15. Vecindad de Moore con $r = 2$	32
Figura 16. Condición de frontera periódica en 2D.....	33
Figura 17. Condición de frontera reflectora en 1D.....	34
Figura 18. Descripción de un sistema dinámico de N partículas con volumen dv en el espacio de fase.....	37
Figura 19. Sistema dinámico de N partículas en fase de colisión.....	38
Figura 20. Relación de la función de distribución con la densidad de probabilidad.....	39
Figura 21. Modelos unidimensional y bidimensional de rejillas.....	40
Figura 22. Modelos tridimensionales de rejillas	40
Figura 23. Conjunto de velocidades de la rejilla D2Q9.....	41
Figura 24. Histogramas de frecuencias en la rejilla D2Q9.....	41
Figura 25. Esquema de frontera elemental superior.....	44
Figura 26. Implementación de la geometría para la simulación mediante un círculo inscrito en una superficie plana.....	48
Figura 27. Malla de velocidades y direcciones implementada en la simulación del paso del fluido D2Q9.....	48
Figura 28. Ejemplo de celdas fantasmas aplicadas al dominio de la simulación y celdas del fluido.....	49

Figura 29. Ejemplo de dominio en donde se evidencia el conjunto de líneas de color hacia la frontera implementada.	50
Figura 30. Dominio implementado para el paso del fluido de dimensiones 250x120.	50
Figura 31. Representación esquemática de MRT en LBM.	52
Figura 32. Simulación del paso de un flujo laminar alrededor de un círculo con número de Reynolds 25.	55
Figura 33. Simulación del paso de un flujo laminar alrededor de un círculo con número de Reynolds 125.	55
Figura 34. Simulación del paso de un flujo en transición alrededor de un círculo con número de Reynolds 2500.	56
Figura 35. Simulación del paso de un flujo turbulento alrededor de un círculo con número de Reynolds 6250.	56

Índice de Tablas

Tabla 1. Ejemplo de la regla 90 de actualización.	27
Tabla 2. Propiedades de las rejillas implementadas en el LBM.	42

Nomenclatura

Símbolos – Definición

ρ :	Densidad.
m :	Masa de una partícula.
c :	Unidad de velocidad en LBM.
∇ :	Operador gradiente.
∇^2 :	Operador Laplaciano.
g :	Gravedad.
$-\nabla p$:	Gradiente de presión.
$V \cdot \nabla V$:	Termino de advección.
x :	Posición de una partícula.
ξ :	Velocidad de una partícula.
t :	Tiempo.
$f(x, \xi, t)$:	Función de distribución de densidad en el espacio.
$\rho(x, t)$:	Densidad de masa de un fluido.
μ :	Viscosidad.
M :	Número de Mach.
N :	Partículas de un sistema.
v_m :	Velocidad del objeto.
V_s :	Velocidad del sonido en el medio.
$\text{rot } \mathbf{F}(x, y, z)$:	Rotacional de un campo vectorial.
\mathbb{B} :	Centro de masa.
$\frac{d^2x}{dt^2}$:	Aceleración de una partícula en un campo vectorial.
\vec{a} :	Aceleración.
$\sum \vec{\mathbf{F}}$:	Cantidad de movimiento lineal.
D :	Dimensión.
v :	Velocidad macroscópica de un fluido.
i :	Filas de una matriz.
j :	Columnas de una matriz.

e :	Estados de un autómata celular.
C :	Celda de un autómata celular.
r :	Rango de un autómata celular.
\mathbb{Z} :	Conjunto de números enteros.
k^{2r+1} :	Configuraciones de un autómata celular.
$k^{k^{2r+1}}$:	Reglas de actualización.
A :	Área de una superficie.
Q_i :	Caudal Volumétrico.
\hat{n} :	Vector unitario.
\dot{m} :	Flujo másico.
m_{vc} :	Masa de un volumen de control.
L :	Malla euclidiana.
t :	Tiempo.
$\int d(*)$:	Integral respecto a (*).
x :	Posición.
(\cdot) :	Producto punto.
\vec{p} :	Momento.
$\sum \dot{m}_e$:	Flujo másico de entrada.
$\sum \dot{m}_s$:	Flujo másico de salida.
h :	Configuración inicial de un autómata celular.
h' :	Configuración final de un autómata celular.
\vec{v}_f :	Velocidad de flujo.
θ :	Angulo.
$N_{ij}^{(vN)}$:	Vecindad de Von Neumann.
$N_{ij}^{(M)}$:	Vecindad de Moore.
$\frac{d(\cdot)}{d*}$:	Derivada total de (\cdot) con respecto a $(*)$.
$\frac{\partial(\cdot)}{\partial*}$:	Derivada parcial de (\cdot) con respecto a $(*)$.
$d(*)$:	Diferencial respecto a $(*)$.
Q_{col} :	Operador de colisión.

$DnQm$:	Rejilla de simulación.
$\Gamma^{(+)}$:	Integral de colisión de partículas que ingresan al espacio de fase.
$\Gamma^{(-)}$:	Integral de colisión de partículas que salen del espacio de fase.
$f^{(N)}(\mathbf{x}^N, \vec{\mathbf{p}}^N, t)$:	Función de distribución.
$\dot{\vec{\mathbf{x}}}$:	Velocidad de una partícula en un campo vectorial.
f_a :	Función de distribución en cada dirección de una rejilla.
f_a^{eq} :	Función de equilibrio.
w_a :	Pesos de las partículas.
m_k :	Matriz de momentos.

Abreviaturas - Definición

CFD – Computational Fluid Dynamics.

EDP - Ecuaciones Diferenciales Parciales.

LBM – Lattice Boltzmann Method.

LGCA - Lattice Gas Cellular Automata.

BGK – Bhanagar, Gross y Krook.

NS – Navier Stokes, ecuaciones.

AC – Automatas celulares.

MD – Molecular Dynamics.

1 INTRODUCCIÓN

Los métodos numéricos aplicados a la dinámica de fluidos computacional (CFD), brindan una potente herramienta en cuanto al estudio del comportamiento de los fluidos de un sistema, mediante las soluciones de las ecuaciones de conservación de masa y conservación de momento; las cuales describen e integran las propiedades de un fluido en Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP), que establecen la evolución y estado de un sistema en un tiempo y espacio determinado. Las dificultades asociadas a las soluciones algebraicas de este tipo de ecuaciones, requieren de la implementación y desarrollo de métodos numéricos que, a partir de modelos simplificados fundamentados en conceptos matemáticos, describan de manera satisfactoria el fenómeno físico en cuestión. Consecuentemente, este trabajo sigue los principios del Método de Lattice Boltzmann (LBM), en relación a la discretización de un sistema que, a partir de los elementos compilados en la mecánica de fluidos e hidrodinámica, llegue a proponer un modelo práctico de aplicación a diversos sistemas.

Históricamente, en 1986 los autores Hardy, Pomeau y Pazzis, establecieron un modelo llamado Lattice Gas Cellular Automata (LGCA); el cual, mediante un sistema de colisiones basados en los principios matemáticos de conservación de masa y momento, describían el movimiento de los gases a partir de mallas estructurales con diferentes estados, en donde las leyes de evolución dependen estrictamente del estado inicial y de los estados vecinos en un tiempo determinado (Wolf-Gladrow & Alfred , 2005). Consecuentemente, el Método de Lattice Boltzmann (LBM) se fundamentó en los principios de LGCA, a partir de la derivación de la ecuación continua de Boltzmann mediante un arreglo estructural que discretiza el tiempo y el espacio; permitiendo con esto la modelación de fluidos viscosos, con el propósito de evaluar flujos laminares y turbulentos a diferentes números de Reynolds sobre geometrías móviles (Krüger , y otros, 2017).

Los alcances propuestos por el Método de Lattice Boltzmann (LBM) a la hora de describir fenómenos naturales, cubren una amplia e importante área de la ciencia; puesto que este método permite la solución numérica de Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP), siendo en esencia aplicados a la mecánica de fluidos, electrodinámica y otros campos; infiriendo en que la solución de la ecuación de transporte de Boltzmann es indispensable para efectuar un apropiado manejo de las cantidades aquí involucradas.

Es fundamental tener presente las variables asociadas a la descripción física de los fluidos, las cuales se analizan a cuatro escalas principalmente; atómica 10^{-11}m , microscópica 10^{-6}m , mesoscópica y macroscópica. La escala atómica hace referencia a las distancias entre partículas tales como átomos o moléculas individuales, e involucra la mecánica cuántica de estas partículas; y se modela mediante Dinámica Molecular (MD). A escala microscópica se partirá de un volumen que contiene una cantidad N de partículas, en donde estas no se encuentran regidas por los efectos cuánticos frente a la reactividad química de las mismas; siendo presentadas únicamente como masa puntual en un espacio determinado. Por otra parte, tenemos la descripción macroscópica en la cual se basa el principio de continuidad, mediante la caracterización de variables tales como: densidad, velocidad, temperatura y presión. Dichas propiedades toman lugar en la modelación matemática de las ecuaciones de Navier-Stokes (NS) por medio de la dinámica asociada al movimiento de los fluidos. Finalmente la escala mesoscópica se presenta como una correlación entre las escalas anteriormente definidas (ver **Figura 1**). Es en esta escala en la que se desarrolla el Método de Lattice Boltzmann (LBM), el cual se basa en la función de densidad de probabilidad como unidad fundamental de la teoría cinética $f(x, \xi, t)$; siendo esta una generalización de la densidad la cual incluye la velocidad de las partículas. Mientras $\rho(x, t)$ representa la densidad de la masa en un espacio, $f(x, \xi, t)$ simultáneamente representa tanto la densidad de la masa en el espacio físico tridimensional, como su flujo o velocidad tridimensional; o dicho de otra forma, la función de distribución $f(x, \xi, t)$ representa la densidad de las partículas con velocidad $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ (Giovacchini, Ortiz, & Sacco, 2012).

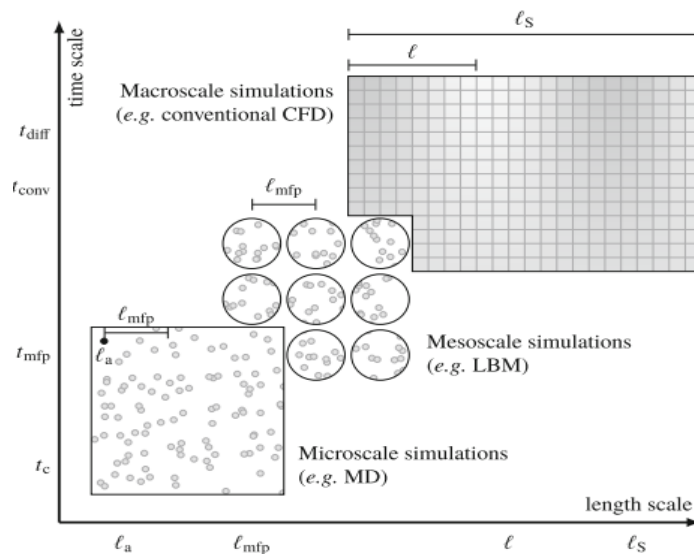


Figura 1. Escalas de análisis para fluidos. Tomado de (Krüger, y otros, 2017).

A partir de las definiciones anteriormente establecidas, la función de distribución se conecta a variables macroscópicas como la densidad y la velocidad de un fluido a partir de sus momentos. Estos momentos son la integral de la función de distribución en una cierta velocidad, la cual se determina mediante la siguiente expresión:

$$\rho(x, t) = \int f(x, \xi, t) d^3\xi \quad (1.1)$$

En este contexto, el Método de Lattice Boltzmann (LBM) ofrece un formalismo completamente aplicable a diferentes sistemas hidrodinámicos, aerodinámicos, medicinales entre otros; implementándose como importante herramienta para la modelación de fluidos.

1.1 Ecuaciones de Navier-Stokes para el movimiento y transporte de fluidos

Un fluido se define como aquella sustancia que cambia su forma de manera irreversible cuando se somete a un esfuerzo cortante por pequeño que este sea; por lo cual se puede categorizar a los gases y los líquidos como fluidos. En contraste, los sólidos sometidos a un esfuerzo cortante pueden sufrir una deformación temporal pero retornan a su configuración inicial (Shames, 1995). Por otra parte, se puede realizar una categorización respecto a la densidad; pues aquellos flujos que no varían su densidad bajo altas presiones, se clasifican como incompresibles, a diferencia de los compresibles, cuya densidad varía a altas presiones o velocidades de flujo. Esta relación se cuantifica mediante el número adimensional de Mach para el caso de los gases, el cual se define como la relación entre la velocidad del fluido y la velocidad del sonido en el fluido; y se aplica esencialmente en aerodinámica.

$$M = \frac{v_m}{V_s} \quad (1.2)$$

En física de medios continuos, las ecuaciones de Navier-Stokes (NS) son fundamentalmente un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales, que se encargan de la modelación de fluidos a escala macroscópica.

Estas ecuaciones fueron históricamente integradas y obtenidas por Leonhard Euler en el siglo XVIII, y aplican los principios de conservación de masa y la segunda ley de Newton para la modelación de fluidos libres de fuerzas de fricción. Posteriormente, Claude-Louis

Henri Navier y George Gabriel Stokes estudiaron el caso para fluidos viscosos, llegando así a una expresión matemática definida como (Younsi, 2012):

$$\rho \left(\frac{\partial V}{\partial t} + V \cdot \nabla V \right) = -\nabla p + \rho g + \mu \nabla^2 V \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.4)$$

El matemático Jean Leray en su tesis doctoral desarrollada a principios del siglo pasado, demostró matemáticamente la solución débil a este tipo de ecuaciones en segunda dimensión; mediante condiciones iniciales de velocidad regular la cual no presenta turbulencias o singularidades; no obstante, estas ecuaciones representan hoy por hoy uno de los siete problemas del milenio (Mora, 2017). La dificultad de encontrar soluciones a estas ecuaciones para todo tiempo radica en la turbulencia, gracias a la estructura compleja que esta implica, y para la cual se desea determinar soluciones frecuentes para todo tiempo; puesto que este fenómeno forma espectros amplios a escalas de espacio y tiempo que exhiben un alto grado de aleatoriedad, en donde los trazadores se mezclan rápidamente. Dicho fenómeno toma lugar bajo operadores vectoriales como el rotacional, el cual evalúa la vorticidad como un término cuantificador de la rotación local de un fluido (Larson & Bruce H, 2010).

$$\text{rot } \mathbf{F}(x, y, z) = \nabla \times \mathbf{F}(x, y, z) \quad (1.5)$$

1.1.1 Descripción Euleriana y Lagrangiana en mecánica de fluidos

Para este tipo de modelos numéricos y sus soluciones se hace uso de un enfoque euleriano; el cual consiste en el estudio de la dinámica de las partículas mediante un marco de referencia fijo en relación a un punto (x_0, y_0, z_0) como se evidencia en la **Figura 2**. Denotándose matemáticamente mediante la función vectorial (1.6) la cual describe la velocidad de las partículas en un instante de tiempo t .

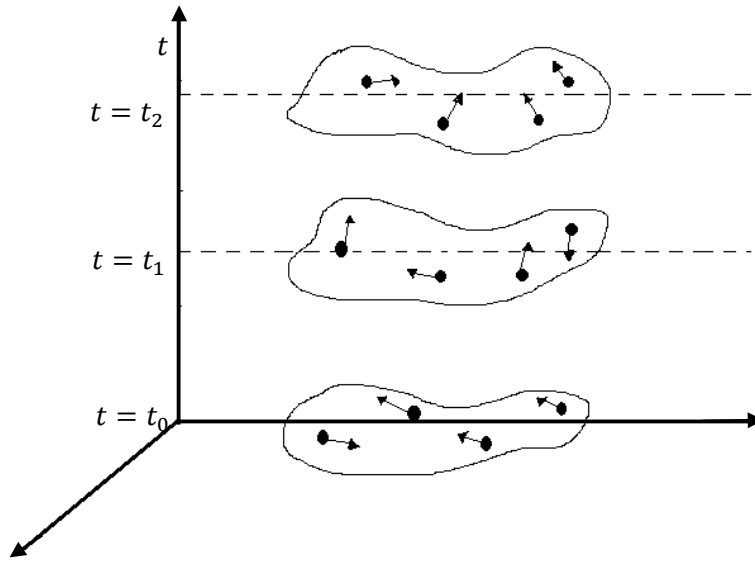


Figura 2. Enfoque Euleriano del movimiento de fluidos. La posición de las partículas del fluido se mide desde un punto fijo de coordenadas (x_0, y_0, z_0) .

$$\dot{\vec{x}} = (\vec{x}(x, y, t), \vec{y}(x, y, t)) \quad (1.6)$$

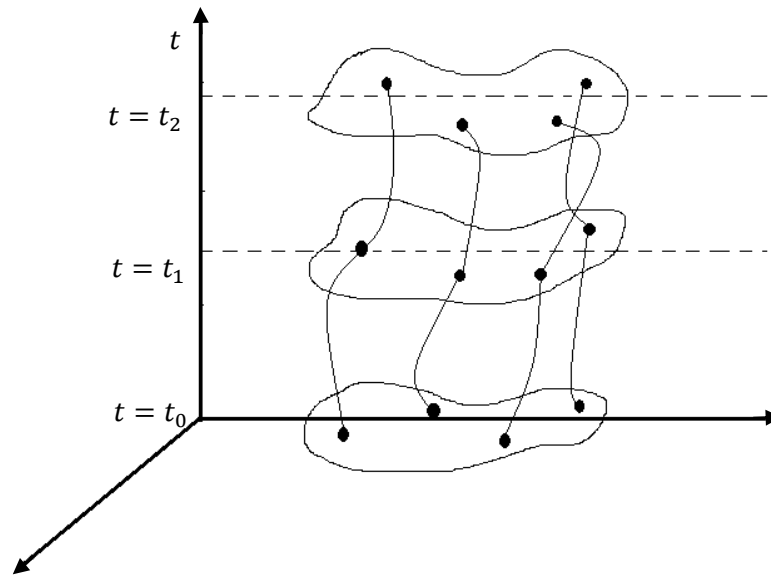


Figura 3. Enfoque Lagrangiano del movimiento de fluidos. La posición de las partículas del fluido depende de un punto que se mueve con el fluido, usualmente su centro de masa \mathbb{B} .

$$\vec{x} = \vec{x}(\vec{x}_0, t) \quad (1.7)$$

En el enfoque lagrangiano, se modela el movimiento del fluido con respecto a las coordenadas de un punto que no necesariamente está fijo en el espacio; conocida la trayectoria que describe una “partícula fluida”, y para la cual se sigue el recorrido que describe la misma en función del tiempo como se evidencia en la **Figura 3**; seguidamente, como parte de la función matemática que modela este fenómeno, se tiene la parametrización de la trayectoria de la partícula fluida en la posición con respecto al tiempo como se denota en la ecuación (1.7).

Tomando un marco de referencia euleriano, se llega a una expresión matemática denominada “derivada material o sustancial”; la cual describe la variación temporal de las partículas de un fluido en un medio, encontrándose sujetas a variaciones del campo vectorial que las contiene, haciendo énfasis en un componente temporal y espacial (Oliver Olivella & Agelet de Saracíbar, 2000):

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d\dot{x}}{dt}, \dot{x}(\vec{x}(t), \vec{y}(t), t) \quad (1.8)$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{\partial \dot{x}}{\partial t} \frac{dt}{dt} + \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial \dot{x}}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} \quad (1.9)$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d\dot{x}}{dt} = \frac{\partial \dot{x}}{\partial t} + u \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} + v \frac{\partial \dot{x}}{\partial y} \quad (1.10)$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d\dot{x}}{dt} = \frac{\partial \dot{x}}{\partial t} + \dot{x}(x, t) \cdot (\nabla \dot{x}) \quad (1.11)$$

1.1.2 Ley de conservación de momentum

La cantidad de movimiento lineal, es una cantidad vectorial que se modela a partir del producto de la masa m de una partícula y la velocidad \vec{v} con que dicha partícula se mueve en el medio (Serway & Jewett, 2008). Tomando la segunda ley de Newton:

$$\sum \vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d(m\vec{v})}{dt} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = m\vec{a} \quad (1.12)$$

Con componentes:

$$\vec{p}_x = m\vec{v}_x \quad (1.13)$$

$$\vec{p}_y = m\vec{v}_y \quad (1.14)$$

$$\vec{p}_z = m\vec{v}_z \quad (1.15)$$

Si $\sum \vec{F} = 0$ entonces:

$$\frac{d(\vec{p}_A + \vec{p}_B)}{dt} = 0 \quad (1.16)$$

$$\vec{p}_A + \vec{p}_B = \text{constante} \quad (1.17)$$

1.1.3 Ley de conservación de masa

Frente a la ley de conservación de masa, se debe entender como principio fundamental que la materia no se puede crear ni destruir; sin embargo, esta puede ser sometida a diferentes transformaciones. Cabe resaltar que, para procesos de baja energía como las reacciones químicas, este principio aplica de forma precisa; no obstante, para aquellas reacciones que requieran de altos niveles de energía como las nucleares, la definición clásica de masa no aplica y; por ende, se describe un proceso diferente.

Considerando un volumen de control con una geometría definida, en donde se expresa el paso de un fluido como en la **Figura 4**, podemos realizar un análisis para la modelación de la ecuación de continuidad (White, 2004).

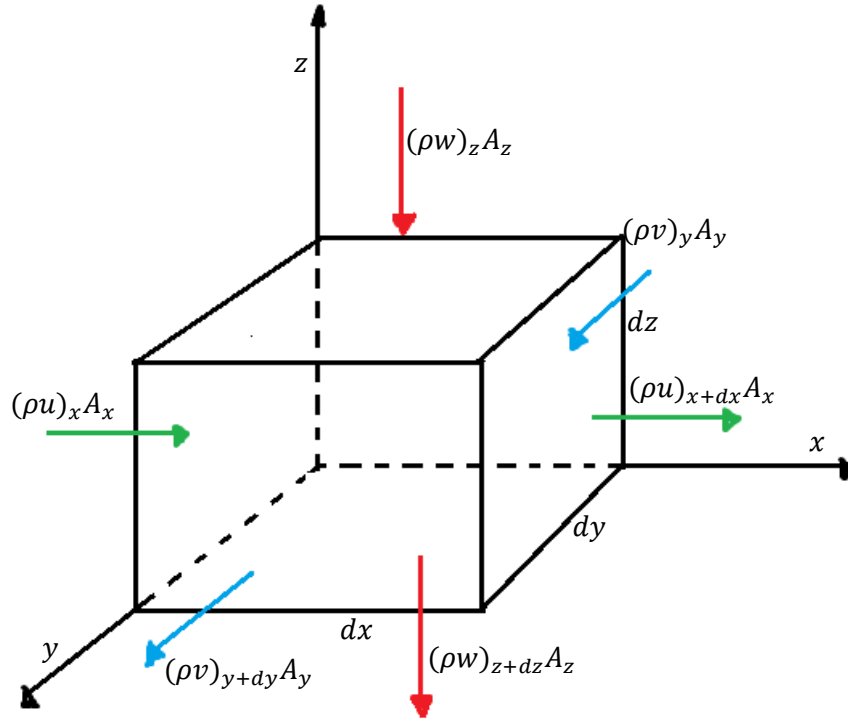


Figura 4. Paso de un fluido por un volumen de control

Partiendo del teorema de transporte de Reynolds se tiene que:

$$\frac{d}{dt} \iiint \rho dV + \iint \rho (\vec{v}_f \cdot \hat{n}) dA = 0 \quad (1.18)$$

En donde se sabe que $m = \rho V$ y $V = dxdydz$, por lo cual para la integral triple tenemos:

$$\frac{dm_{vc}}{dt} \quad (1.19)$$

Seguidamente para la integral de área, al descomponer vectorialmente los flujos que ingresan por diferentes ángulos al volumen de control se tiene que $\vec{v}_f \cdot \hat{n} = v \cos(\theta)$; en donde si $\theta > 90$ indicara entonces un flujo que sale; por lo tanto, si $\theta < 90$ se obtendrá un flujo que ingresa.

Al desarrollar dicha integral teniendo en cuenta que $\dot{m} = \rho VA$ y realizar los cambios correspondientes se llega a:

$$\sum \dot{m}_e - \sum \dot{m}_s \quad (1.20)$$

Finalmente obtenemos como resultado mediante la suma de las ecuaciones (1.19) y (1.20) e igualando a cero:

$$\frac{dm_{vc}}{dt} + \sum \dot{m}_e - \sum \dot{m}_s = 0 \quad (1.21)$$

Posteriormente, se procede a realizar el balance de los flujos definidos en la **Figura 4** mediante la ecuación (1.21), con lo que se llega a :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\partial \rho u}{\partial x} - \frac{\partial \rho v}{\partial y} - \frac{\partial \rho w}{\partial z} \quad (1.22)$$

Debido que $\nabla = \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$, entonces:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\nabla \cdot (\rho \vec{u}) \quad (1.23)$$

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.24)$$

Para fluidos incompresibles se tiene que la densidad de un fluido no varía; por lo cual, al desarrollar la derivada del producto se puede despreciar esta propiedad, y la ecuación (1.24) da como resultado:

$$\nabla \cdot (\vec{u}) = 0 \quad (1.25)$$

En el caso de que la salida y la entrada sean unidimensionales, la ecuación (1.25) se puede escribir como:

$$Q_1 = Q_2 \quad (1.26)$$

En donde:

$$Q_i = vA \quad (1.27)$$

2. OBJETIVOS

2.1 Objetivo General

- Implementar y validar un modelo de cálculo computacional del Método de Lattice Boltzmann (LBM); como herramienta para la simulación de fluidos a través de estructuras geométricas simples, a diferentes números de Reynolds.

2.1.1 Objetivos específicos

- Elaborar un documento explicativo acerca del proceso de transmisión y colisión, como técnicas elementales para la aplicación del Método de Lattice Boltzmann (LBM).
- Desarrollar un modelo de cómputo y graficación de autómatas celulares para diferentes reglas de transmisión, como herramienta de simulación de fenómenos naturales.
- Implementar y validar la solución numérica de la ecuación de Boltzmann, mediante la discretización del espacio y el tiempo en una malla regular a pasos discretos, haciendo uso de la librería pylbm para el flujo alrededor de un círculo.
- Aplicar el modelo para otras geometrías a diferentes velocidades de flujo.

3. MARCO TEÓRICO

Dentro del conjunto de métodos numéricos asociados a las soluciones de Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP), se destaca la amplia y efectiva aplicación del método de Lattice Boltzmann (LBM); debido a su fácil implementación y eficaz simulación en diferentes dimensiones. Por un lado, otros métodos numéricos discretizan un volumen de control en el cual se realiza un estudio de variables macroscópicas como densidad, presión, temperatura entre otros; con el fin de evaluar dichas propiedades frente a las interacciones del fluido y el medio, en donde se debe lidiar con imprecisiones derivadas de la discretización de dichos sistemas. De forma contraria, se puede considerar las interacciones de cada partícula como los átomos o las moléculas; para las cuales se hace referencia a la escala atómica, en donde se evidencia un gasto computacional alto debido a la complejidad intrínseca que se tiene a la hora de modelar dichos sistemas. Por lo cual, es aquí en donde se valida y toma lugar el Método de Lattice Boltzmann (LBM); ya que este se desarrolla a una escala mesoscópica, en donde se considera un sistema de colisiones asociadas a sus respectivas funciones de distribución.

El Método de Lattice Boltzmann (LBM) es un Autómata Celular (AC), que implementa una discretización de la ecuación de Boltzmann. Este método toma como unidad de medida para el tiempo en la malla denominada “*Lattice*” el *time step* ($lu\ ts^{-1}$), y el espacio lo discretiza como *lattice units* (lu); en donde las mallas más comunes de aplicación y estudio son: $D1Q3$, $D2Q9$, $D2Q5$, $D2Q13$ y $D3Q19$. Este algoritmo consiste fundamentalmente en el paso de “Streaming” el cual se conoce como propagación o transmisión, y el paso de “Collision” conocido como colisión o relajación; combinándose en una ecuación bajo la formulación BGK (Bhatnagar-Gross-Krook). Este modelo dinámico molecular, se caracteriza entonces por la condición que establece para la localización de las partículas, las que se encuentran directamente relacionadas a un vector de velocidad bajo reglas de actualización simples; en donde se define la posición de las partículas para todo tiempo a pasos discretos, garantizando con esto la conservación de la cantidad de movimiento y de masa (Wolf-Gladrow & Alfred , 2005).

3.1 Autómata Celular (AC)

Un autómata celular es una herramienta computacional algorítmica que permite el análisis de sistemas dinámicos; a partir de la idealización de medios naturales, en donde se parte de un arreglo regular de celdas con condiciones iniciales y de contorno, impuestas al grupo de autómatas que interactúan localmente entre sí. Para el desarrollo de estos modelos, se debe construir una malla euclidiana L de dimensión D , en donde toda localización dentro de la misma se encuentra equidistante por valores enteros, tal que $L = \mathbb{Z}^D$. Este modelo determinístico basa sus reglas de actualización en condiciones uniformes de espacio y tiempo. Sin embargo, se pueden llegar a presentar sistemas dinámicos con reglas estocásticas.

Dentro del conjunto de características que determinan a un autómata celular se tiene (Gladrow, 2000):

- Son arreglos regulares de celdas individuales del mismo tipo.
- Cada celda contiene un número finito de estados discretos.
- Los estados se actualizan simultáneamente en niveles temporales discretos.
- Las reglas de actualización son determinísticas y uniformes en el espacio y tiempo.
- Las reglas de evolución de una celda dependen únicamente de la vecindad local alrededor de ella.

Consecuentemente, podemos concluir que la configuración global de un autómata, hará referencia entonces a los estados definidos en las vecindades en un instante de tiempo t ; puesto que la evolución temporal de una configuración h en un tiempo $t + 1$ dará como resultado una configuración h' ; en donde todos los elementos de la configuración inicial se abran actualizado sincrónicamente (Muñoz, 2019).

Las características más interesantes de los autómatas celulares se presentan en el caso unidimensional como se muestra a continuación (Gladrow, 2000).

3.2 Autómata Celular Unidimensional

Típicamente, estos sistemas se configuran a partir de una fila i con cierta cantidad de elementos con forma definida. Las vecindades de una celda C serán determinadas por el rango r , el cual indica el número de elementos adyacentes a la i -ésima celda; por ende, al considerar la celda C , el conjunto de vecindades totales se encontrará constituido por un total de $2r + 1$ elementos (Muñoz, 2019). Los autómatas unidimensionales se organizan en una malla, en la cual las diferentes columnas de la misma fila corresponden a diferentes autómatas, y las diferentes filas corresponden a diferentes tiempos.

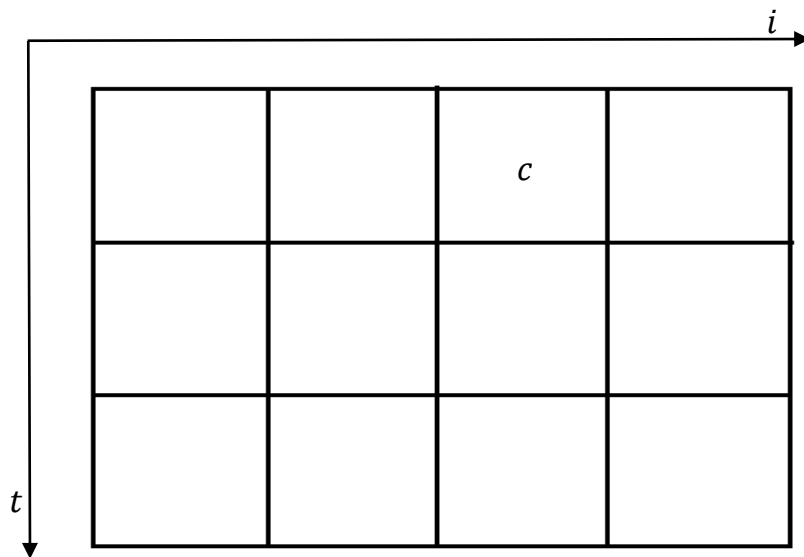


Figura 5. Orden de los autómatas celulares unidimensionales.

Un ejemplo de esto lo podemos evidenciar mediante la estructura que se muestra en la **Figura 6**, en donde se parte de un conjunto de células y se define un $r = 1$, con lo que se tiene entonces que la cantidad de vecinos para la celda negra serán las dos grises; ya que comparten un lado y se encuentran a un salto de esta, además, al realizar el cálculo de la cantidad de elementos que conforman dichos estados e , se obtiene un total de 3 elementos.

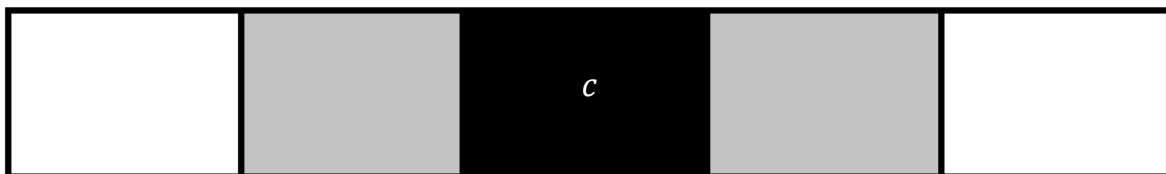


Figura 6. Autómata celular unidimensional con rango igual a 1 y L igual a 5.

Si se deseara tomar un $r = 2$, se obtendrá entonces un conjunto de vecindades de aquellas células que se encuentran a dos saltos de la celda negra como se muestra en la **Figura 7**; para la cual entonces al realizar el cálculo de la cantidad de elementos se obtiene un total de 5 células.

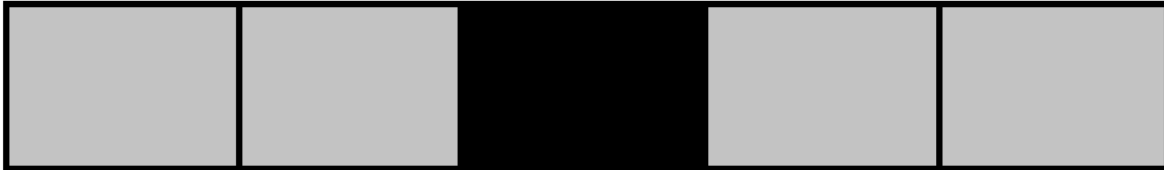


Figura 7. Autómata celular unidimensional con rango igual a 2.

Los estados de una celda se especifican normalmente por un número entero no negativo comprendido desde 0 hasta $k - 1$.

Por ende, modelos de autómatas celulares de rango r y estados posibles k , tendrán un total de configuraciones k^{2r+1} y un total de $k^{k^{2r+1}}$ reglas de actualización; por lo cual, tomando el ejemplo definido en la **Figura 6** en donde $k = 2$, se tiene entonces un total de 2 estados, 8 configuraciones posibles y 256 reglas de actualización.

El estado de la i -ésima celda en un instante de tiempo t puede expresarse mediante:

$$c_i^{(t)} = F[c_{i-1}^{(t-1)}, c_i^{(t-1)}, c_{i+1}^{(t-1)}] \quad (3.28)$$

A manera de ejemplo se muestra en la **Tabla 1** la regla de transición 90, en donde se denota en la columna 4 la regla de actualización local, dada por la configuración específica de la vecindad.

Tabla 1. Ejemplo de la regla 90 de actualización.

$c_{i-1}^{(t-1)}$	$c_i^{(t-1)}$	$c_{i+1}^{(t-1)}$	$c_i^{(t)}$
0	0	0	0
0	0	1	1
0	1	0	0
0	1	1	1
1	0	0	1
1	0	1	0

$c_{i-1}^{(t-1)}$	$c_i^{(t-1)}$	$c_{i+1}^{(t-1)}$	$c_i^{(t)}$
1	1	0	1
1	1	1	0

3.3 Clasificación de los Autómatas Celulares

La clasificación de un autómata celular, corresponde al patrón que este exhibe; por ende, la complejidad de cierto sistema, definirá entonces el esquema de configuraciones de manera global (Wolfram, 2002).

3.3.1 Autómatas de Clase I

Este tipo de autómatas celulares, son aquellos cuyas condiciones iniciales, evolucionan rápidamente a patrones estables y homogéneos, en donde cualquier aleatoriedad que se presente en ellos, se disipara rápidamente.

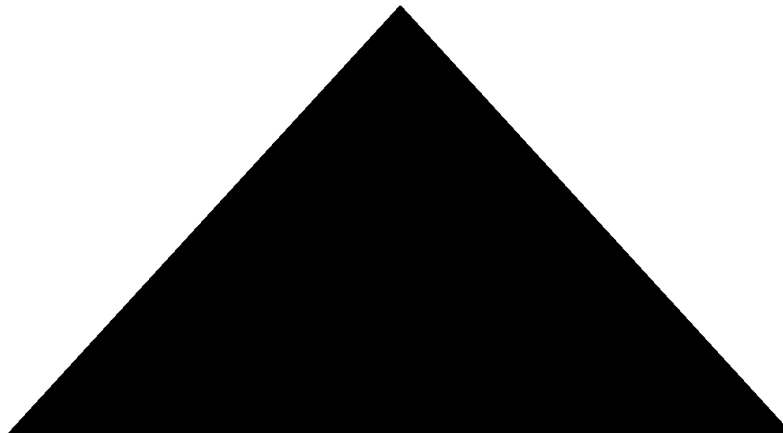


Figura 8. Autómata celular clase I: Regla 222.

3.3.2 Autómata de clase II

Son aquellos autómatas que dan lugar a configuraciones periódicas de estructuras estables y continuas, dependientes del tiempo y repetitivos en el mismo. Este tipo de autómatas evolucionan de manera secuencial, presentando cierta influencia por un grupo de células fijas de la configuración inicial.

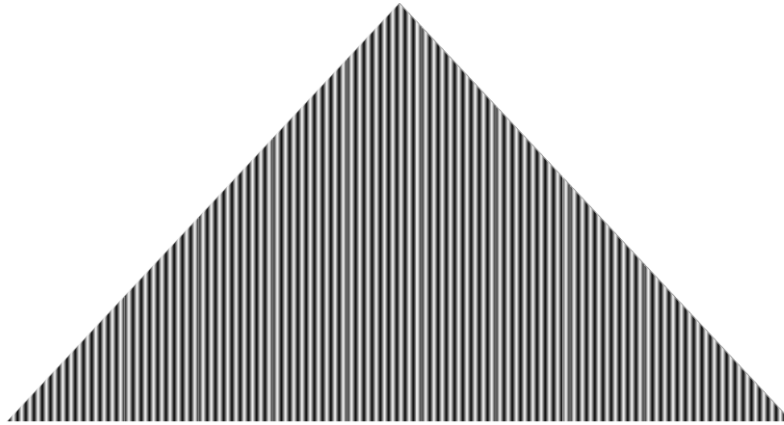


Figura 9. Autómata celular clase II: Regla 94.

3.3.3 Autómata de clase III

Este tipo de autómatas simulan sistemas caóticos con el paso del tiempo, en donde el cambio de estado de una célula depende estrictamente de un mayor número de estados iniciales, jugando un papel fundamental en el estudio de sistemas caóticos.

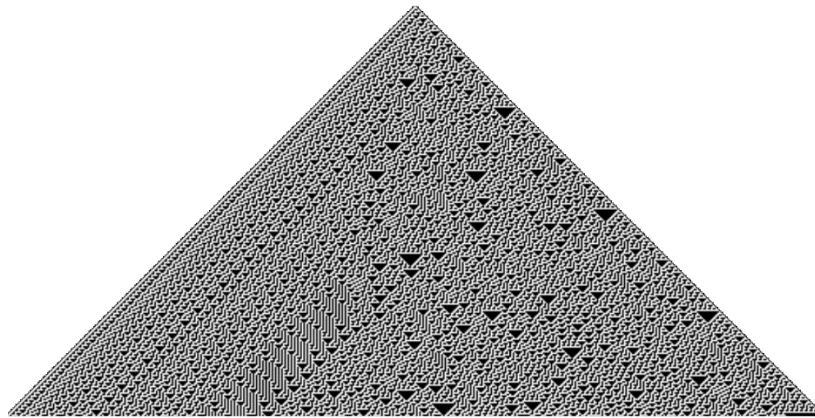


Figura 10. Autómata celular clase III: Regla 30.

3.3.4 Autómata de clase IV

Esta clase de autómatas describen estructuras complejas, las cuales no presentan características completamente caóticas ni ordenadas, siendo estas dependientes estrictamente de un amplio conjunto de vecindades y estados iniciales.

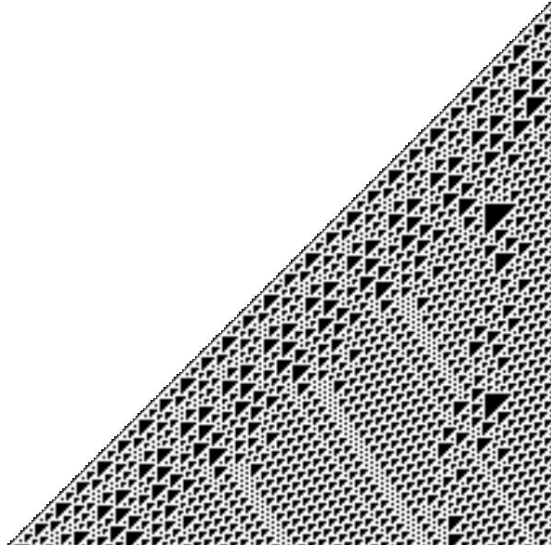


Figura 11. Autómata celular clase IV: Regla 110.

3.4 Autómata Celular Bidimensional.

Los autómatas celulares bidimensionales, se basan en los principios anteriormente expuestos para los unidimensionales. Por lo cual, frente a la cantidad de elementos que constituyen dichos sistemas, las configuraciones locales están determinadas gracias al número de elementos incluidos dentro de una vecindad. Para estos modelos se destacan la vecindad de Von Neumann y la vecindad de Moore.

3.4.1 Vecindad de Von Neumann.

La vecindad de Von Neumann se expresa mediante (Wolf-Gladrow & Alfred , 2005):

$$N_{ij}^{(vN)} := \{(k, l) \in L \mid |k - i| + |l - j| \leq r\} \quad (3.29)$$

En donde se destacan el conjunto de vecindades que comparten un lado con la célula, obteniendo entonces el arreglo que se muestra en la **Figura 12**.

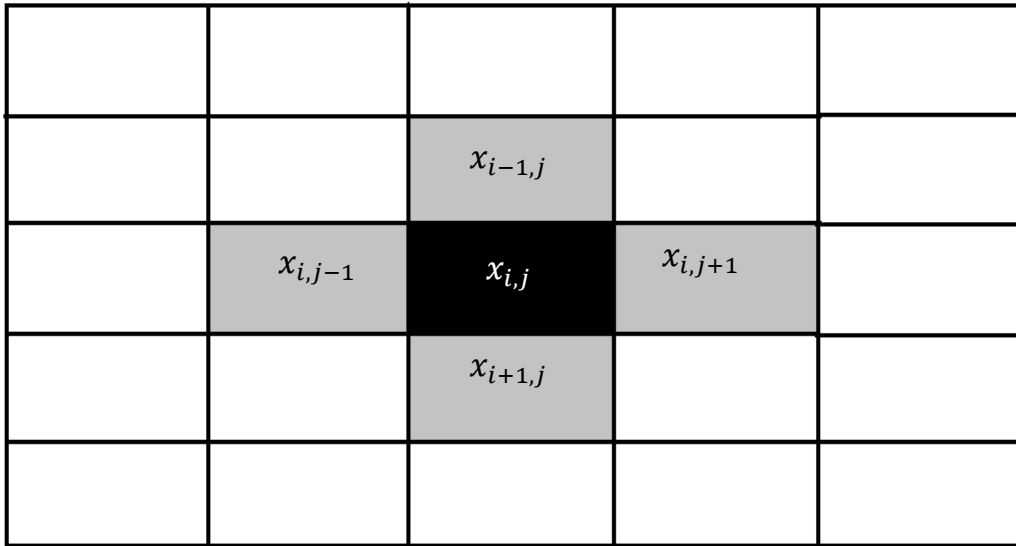


Figura 12. Vecindad de Von Neumann con $r=1$.

Consecuentemente, para vecindades de Von Neumann con un rango igual a dos, se obtiene finalmente una representación gráfica como se muestra en la **Figura 13**, partiendo de la configuración inicialmente expuesta, estableciendo el conjunto de vecindades mediante aquellas células que comparten un lado en común.

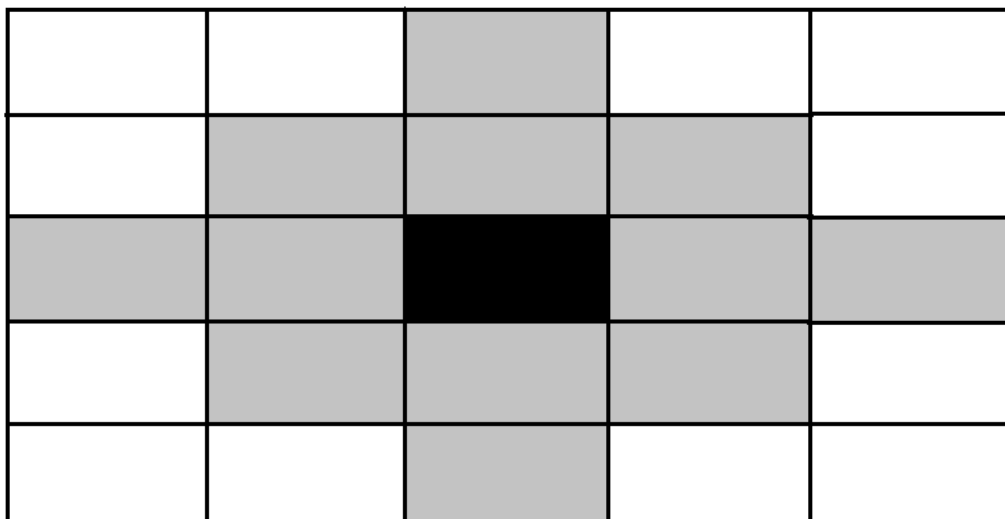


Figura 13. Vecindad de Von Neumann con $r=2$.

3.4.2 Vecindades de Moore.

La vecindad de Moore se expresa mediante (Wolf-Gladrow & Alfred , 2005):

$$N_{i,j}^{(M)} := \{(k, l) \in L \mid |k - i| \leq r \wedge |l - j| \leq r\} \quad (3.30)$$

En donde se destacan el conjunto de vecindades que comparten un lado y un vértice con la célula, obteniendo entonces el arreglo que se muestra en la **Figura 14**.

	$x_{i-1,j-1}$	$x_{i-1,j}$	$x_{i-1,j+1}$	
	$x_{i,j-1}$	$x_{i,j}$	$x_{i,j+1}$	
	$x_{i+1,j-1}$	$x_{i+1,j}$	$x_{i+1,j+1}$	

Figura 14. Vecindad de Moore con $r = 1$.

Finalmente, para vecindades de Moore cuyo rango sea igual a dos, se obtendrá entonces el conjunto de estados que comparten un lado y un vértice a dos saltos de la célula de partida como se evidencia en la **Figura 15**.

Figura 15. Vecindad de Moore con $r = 2$.

3.5.3 Condición de frontera reflectora

Este tipo de condición de frontera, hace referencia entonces a aquellas celdas que se encuentran por fuera del sistema; las cuales tomarán los valores de aquellas que están más próximas y dentro del mismo (Wolfram, 2002).



Figura 17. Condición de frontera reflectora en 1D.

Partiendo de la **Figura 17** en donde $i \in [0, L - 1]$, se describe esta condición para el caso de las celdas grises mediante la ecuación (3.28) en donde se sabe que $c(-1) = c(0)$ y por lo tanto:

$$c(0, t + 1) = F[c(-1), c(0), c(1)] \quad (3.31)$$

Para el caso de las celdas azules, se cumple que $c(L) = c(L - 1)$ en donde mediante la ecuación (3.28) se llega a:

$$c(L - 1, t + 1) = F[c(L - 2), c(L - 1), c(L)] \quad (3.32)$$

3.5.4 Condición sin frontera

Para los sistemas que no presentan condiciones de frontera, se evidencia entonces un crecimiento dinámico de la implementación realizada, posibilitando entonces interacciones externas a la red propuesta (Wolfram, 2002).

3.6 Lattice Gas Cellular Automata (LGCA)

Los autómatas celulares como modelos de aproximación de fenómenos físicos, reproducen con éxito y bajo gasto computacional diferentes sistemas para los cuales son implementados; destacando de los mismos, que no requieren de un estudio exhaustivo y profundo de las ecuaciones que gobiernan los fenómenos para los cuales se deseen aplicar. La importancia de estos modelos, radica entonces en la capacidad que estos tienen para exhibir de forma precisa las estructuras complejas de la naturaleza, durante una evolución temporal mediante reglas de actualización establecidas. Algunos casos para los cuales estos pueden ser implementados son: modelos de crecimiento urbano, dinámica de fluidos, mercados financieros, tráfico y seguridad vial, consumo energético, algoritmos de encriptación, entre muchos otros (Munar Suarez & Piñeros Hernández, 2016).

3.7 El Método de Lattice Boltzmann (LBM)

3.7.1 Teoría cinética molecular de la materia.

La teoría cinética, es una rama de la física que se encarga del estudio de las propiedades macroscópicas de los fluidos mediante un enfoque estadístico; partiendo del comportamiento arbitrario de un sistema constituido por una cantidad importante de elementos llamados moléculas (Muñoz, 2019). Si un sistema contiene un número amplio de elementos, la complejidad de las ecuaciones que especifican el movimiento de cada partícula, limitan la descripción de un proceso que en últimas parece elemental; por lo cual, se debe acudir a fórmulas prácticas enfocadas a una formulación estadística, que tengan como base principal los siguientes supuestos:

- Se debe considerar un número amplio de elementos o partículas dentro del sistema, como requisito para realizar promedios estadísticos.
- Las partículas que forman parte de dicho sistema, se regirán bajo los principios de la mecánica newtoniana.
- Las reacciones químicas y efectos cuánticos de las partículas se desprecian, siendo estas únicamente masa en un espacio determinado.
- Los choques de las partículas serán perfectamente elásticos, por lo cual estas no sufrirán ningún tipo de deformación con los impactos; además, se conserva el momento lineal y la energía cinética del sistema.

3.7.2 Función de distribución de densidad de probabilidad.

En mecánica estadística, el estado de los elementos de un sistema de partículas son caracterizados mediante la posición \vec{x} y el momento \vec{p} . Las coordenadas de cada partícula estarán dadas por las variables anteriormente establecidas, con elementos infinitesimales $d\vec{p}$ y $d\vec{x}$ que definirán el volumen $dv = d\vec{x}d\vec{p}$ del espacio de fase (Muñoz, 2019). En este sentido, la probabilidad de partículas con posición en el rango $x \pm dx$ y momento $\vec{p} \pm d\vec{p}$, estará dada por:

$$f^{(N)}(\vec{x}^N, \vec{p}^N, t) dx d\vec{p} \quad (3.33)$$

Si $\sum \vec{F} = 0$ en el instante de tiempo $t + dt$, las nuevas posiciones de las moléculas estarán dadas por (Thorne & Sukop, 2007):

$$\vec{x} = \vec{x} + \left(\frac{\vec{p}}{m}\right) dt = \vec{x} + \left(\frac{d\vec{x}}{dt}\right) dt = \vec{x} + d\vec{x} \quad (3.34)$$

En donde m y $\left(\frac{\vec{p}}{m}\right)$ es igual a la masa y a la velocidad ξ de la partícula respectivamente.

De igual manera se tiene los nuevos momentos en el espacio de fase en un tiempo $t + dt$, lo cuales estarán definidos por la ecuación (3.35) si se introducen fuerzas externas \vec{F} llegando a:

$$\vec{p} = \vec{p} + \mathbf{F} dt = \vec{p} + \left(\frac{d\vec{p}}{dt}\right) dt = \vec{p} + d\vec{p} \quad (3.35)$$

Por tal razón, cuando la posición y el momento son conocidos en un instante de tiempo en particular, al presentarse un desplazamiento en el espacio de fase en un paso de tiempo, se evidencia entonces que (Thorne & Sukop, 2007):

$$f^{(1)}(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{p} + d\vec{p}, t) d\vec{x}d\vec{p} = f^{(1)}(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{x}d\vec{p} \quad (3.36)$$

Las posiciones y los momentos en el tiempo futuro $t + dt$ y el punto del espacio de fase $(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{p} + d\vec{p})$ se obtienen desplazando los valores en el punto (\vec{x}, \vec{p}) y el tiempo t , estableciendo esto para el proceso de "streaming" (Ver **Figura 18**).

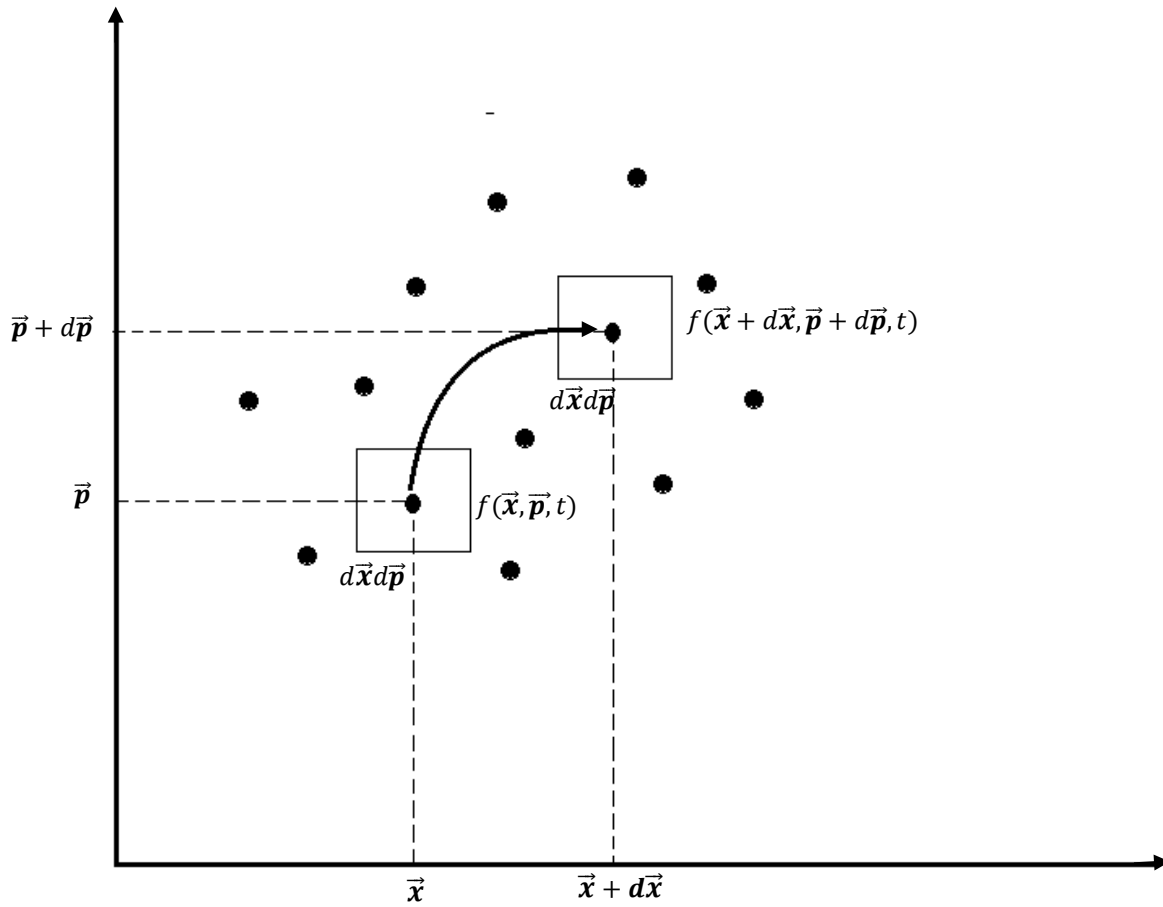


Figura 18. Descripción de un sistema dinámico de N partículas con volumen dv en el espacio de fase.

Cuando el proceso de colisión o relajación toma lugar en el espacio fase, la distribución definida en (\vec{x}, \vec{p}, t) no llega al punto $(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{p} + d\vec{p}, t + dt)$ y por tanto, se requiere de una diferencia entre el número de partículas que harán parte de la distribución y de aquellas que la abandonan (Thorne & Sukop, 2007). Por tal razón, este paso puede escribirse como:

$$f^{(1)}(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{p} + d\vec{p}, t) d\vec{x}d\vec{p} - f^{(1)}(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{x}d\vec{p} = Q_{col} d\vec{x}d\vec{p} dt \quad (3.37)$$

En donde Q_{col} es el operador de colisión y describe este proceso en el espacio de fase, estando este definido como:

$$Q_{col} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} = \Gamma^{(+)} - \Gamma^{(-)} \quad (3.38)$$

Siendo los operadores $\Gamma^{(+)}$ y $\Gamma^{(-)}$, integrales de colisión que denotan aquel conjunto de partículas que pasan a hacer parte de la distribución y aquellas que la abandonan respectivamente (Ver **Figura 19**).

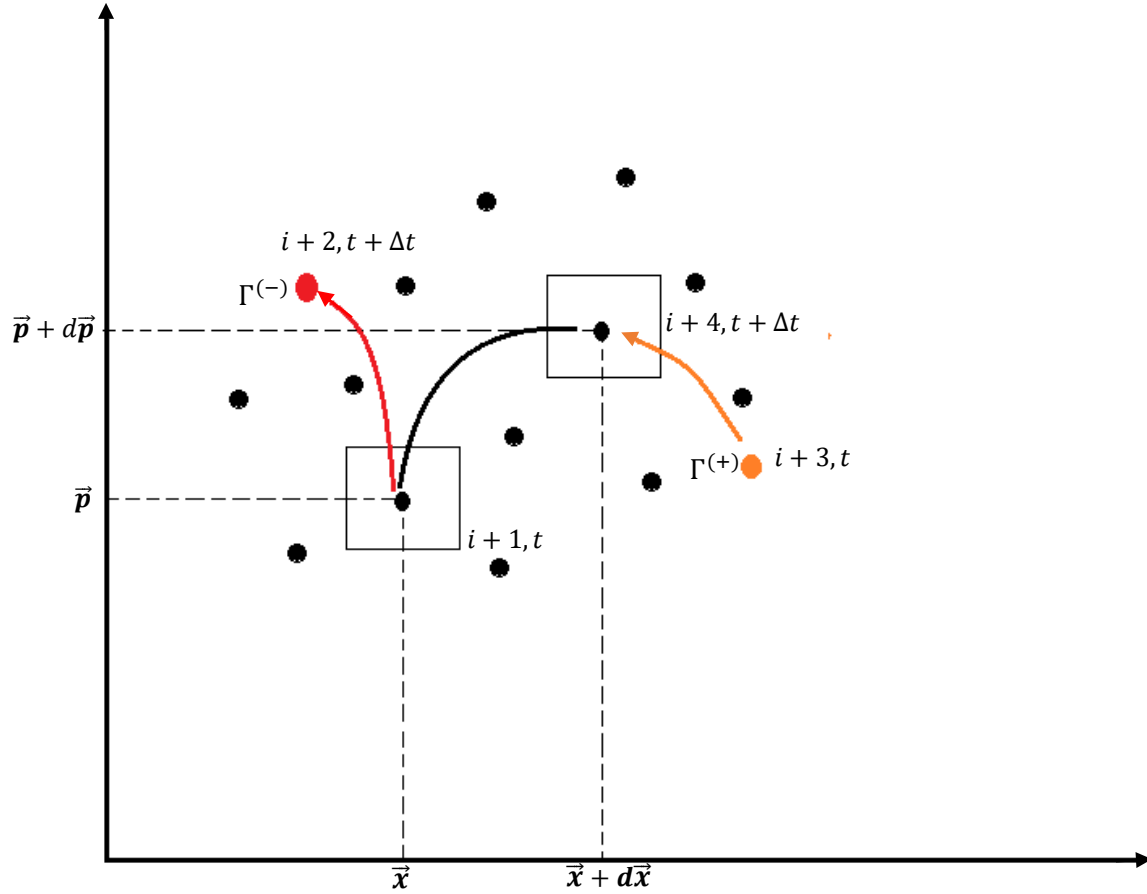


Figura 19. Sistema dinámico de N partículas en fase de colisión.

Si $f(\vec{x}, \vec{p}, t) = f$ entonces para la primera expansión en series de Taylor:

$$f^{(1)}(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{p} + d\vec{p}, t) d\vec{x} d\vec{p} = f^{(1)} + d\vec{x} \cdot \nabla_x f^{(1)} + d\vec{p} \cdot \nabla_{\vec{p}} f^{(1)} + \left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right) dt + \dots \quad (3.39)$$

Sustituyendo (3.39) en (3.38) se deduce que:

$$\xi \cdot \nabla_x f^{(1)} + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\vec{p}} f^{(1)} + \left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right) = \Gamma^{(+)} - \Gamma^{(-)} \quad (3.40)$$

Al incluir el operador de colisión en la ecuación diferencial no lineal de Boltzmann (3.40), se describe la evolución de la función de densidad de probabilidad de una o muchas partículas indistinguibles, las cuales se ven afectadas por fuerzas externas (Giovacchini J. P., 2018).

Una vez establecida la función de distribución de las partículas, es posible realizar una conexión entre la descripción microscópica y macroscópica en relación a la dinámica misma de un fluido; puesto que la integral de la densidad $\int_0^{x=L_x/2} \rho d^3x$, en un volumen que contiene un gas en específico, dará como resultado la masa de dicho gas (Krüger , y otros, 2017).

Un ejemplo de esto lo podemos evidenciar mediante la **Figura 20**, en donde la masa total de las partículas que se encuentran contenidas en el total del volumen, o en este caso la mitad de ellas; se verán relacionadas a las funciones de distribución asociadas a las mismas (Krüger , y otros, 2017).

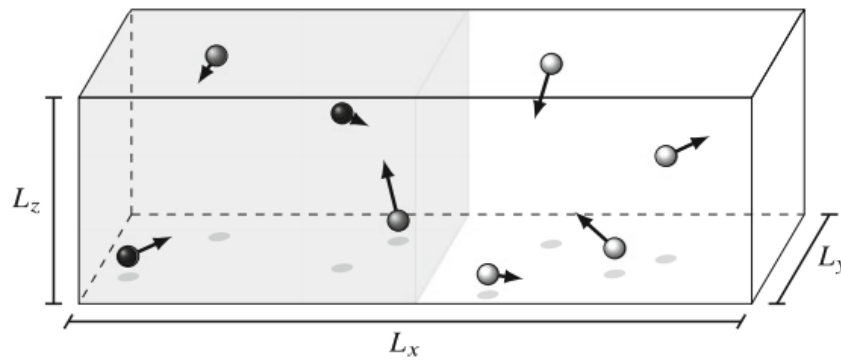


Figura 20. Relación de la función de distribución con la densidad de probabilidad.
Tomado de (Krüger , y otros, 2017).

Lo que se calcula mediante:

$$\int_{x=0}^{x=L_x/2} \int_{\xi_{x>0}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3\vec{p} d^3\vec{x} \quad (3.41)$$

3.7.3 Notación $DnQm$

Como parte de la implementación del Método de Lattice Boltzmann (LBM), el dominio de la simulación se implementa mediante estructuras llamadas rejillas. Típicamente estas rejillas hacen referencia a la dimensión de interés y al número de vectores de velocidad mediante la notación $DnQm$, donde n representa la dimensión y m la cantidad de líneas que conectan los vértices del arreglo (Muñoz, 2019).

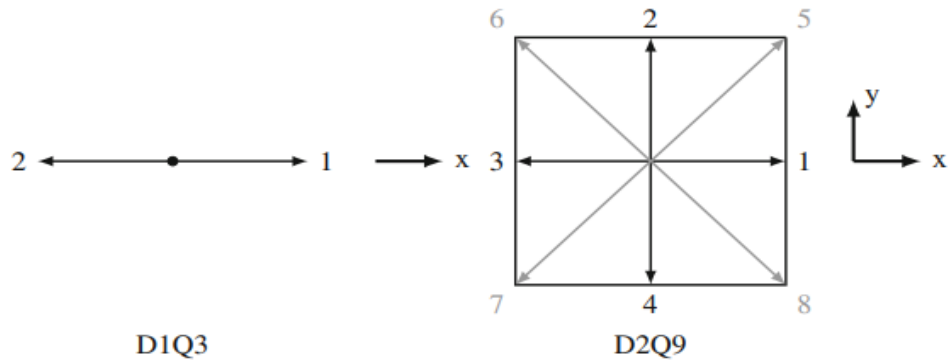


Figura 21. Modelos unidimensional y bidimensional de rejillas. Tomado de (Krüger, y otros, 2017).

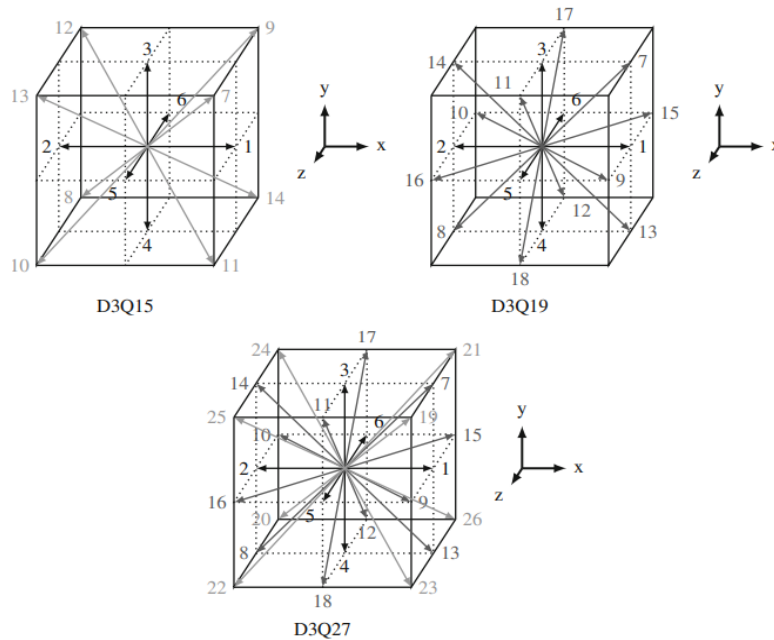


Figura 22. Modelos tridimensionales de rejillas. Tomado de (Krüger, y otros, 2017).

Uno de los modelos comúnmente empleados en la simulación de fluidos mediante el Método de Lattice Boltzmann es el D2Q9 (Rahmany, Sundararajan, Mohd Zin, & Abdullah, 2013); siendo este un arreglo que contiene un total de nueve velocidades y nueve direcciones, en donde la magnitud de dicha velocidad para e_1 hasta e_4 se encuentra a una unidad de lattice por paso de tiempo (1 lu/ts^{-1}), y para la magnitud de e_5 hasta e_8 será entonces de $\sqrt{2} \text{ lu/ts}^{-1}$ (ver **Figura 23**).

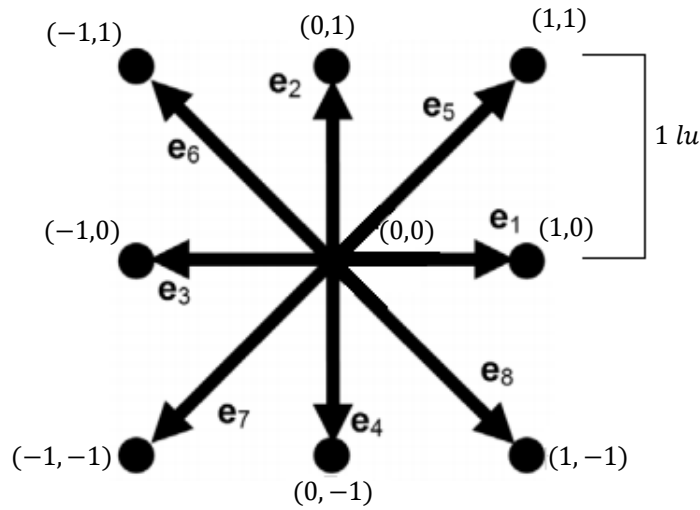


Figura 23. Conjunto de velocidades de la rejilla D2Q9. Tomado de (Thorne & Sukop, 2007).

En donde las frecuencias de ocurrencias en dicha rejilla, se expresan como densidad de fluido específicas en cada dirección. Luego, la densidad macroscópica de un fluido se expresa como:

$$\rho = \sum_{a=0}^8 f_a \quad (3.42)$$

Indicando con esto las nueve direcciones a y sus respectivas funciones de distribución f_a asociadas a las mismas; la función de distribución puede considerarse como un histograma de frecuencia en relación a los eventos de propagación y colisión en un nodo de una rejilla (Thorne & Sukop, 2007).

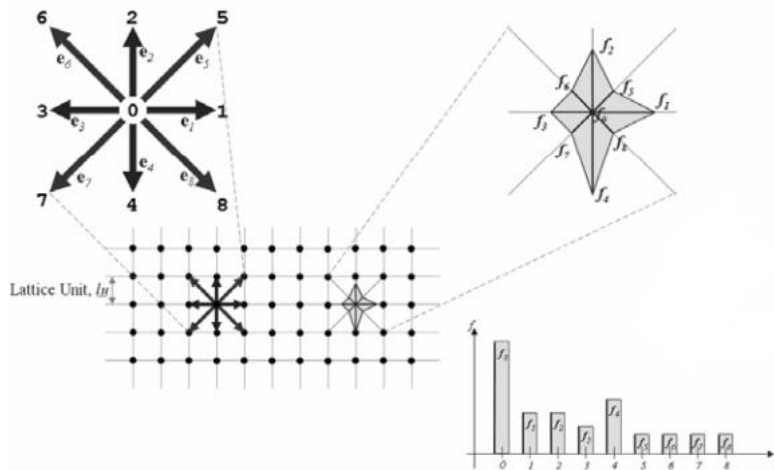


Figura 24. Histogramas de frecuencias en la rejilla D2Q9. Tomado de (Thorne & Sukop, 2007).

Además de una ecuación en cuanto a la densidad del fluido en cada dirección ρ , se puede determinar de la misma manera para la velocidad macroscópica de un fluido v , una expresión que relaciona el promedio de velocidades microscópicas e_a por sus respectivas funciones de distribución f_a y se define como:

$$v = \frac{1}{\rho} \sum_{a=0}^8 f_a e_a \quad (3.43)$$

En la **Tabla 2** se muestran las propiedades las rejillas comúnmente implementadas para la modelación de flujos mediante el Método de Lattice Boltzmann (LBM).

Tabla 2. Propiedades de las rejillas implementadas en el LBM. Tomado de (Krüger , y otros, 2017).

NOTACIÓN	VELOCIDAD	NUMERO DE VECTORES	DISTANCIA	PESO
D1Q3	(0)	1	0	2/3
	(±1)	2	1	1/6
D2Q9	(0, 0)	1	0	4/9
	(±1, 0), (0, ±1)	4	1	1/9
	(±1, ±1)	4	$\sqrt{2}$	1/36
D3Q15	(0, 0, 0)	1	0	2/9
	(±1, 0, 0), (0, ±1, 0), (0, 0, ±1)	6	1	1/9
	(±1, ±1, ±1)	8	$\sqrt{3}$	1/72
D3Q19	(0, 0, 0)	1	0	1/3
	(±1, 0, 0), (0, ±1, 0), (0, 0, ±1)	6	1	1/18
	(±1, ±1, 0), (±1, 0, ±1), (0, ±1, ±1)	12	$\sqrt{2}$	1/36
D3Q27	(0, 0, 0)	1	0	8/27
	(±1, 0, 0), (0, ±1, 0), (0, 0, ±1)	6	1	2/27
	(±1, ±1, 0), (±1, 0, ±1), (0, ±1, ±1)	12	$\sqrt{2}$	1/54
	(±1, ±1, ±1)	8	$\sqrt{23}$	1/216

3.7.4 Aproximación de Bhatnagar, Gross y Krook (BGK)

Ahora bien, en relación a la función de distribución, se evidencia que esta implica integrales de colisión que pueden representar de manera significativa complicaciones relacionadas a las soluciones algebraicas y numéricas de la misma. Sin embargo, para este operador se establecieron expresiones abreviadas, que sustituyen de manera precisa los eventos de colisión de las partículas que constituyen un fluido, brindando soluciones numéricas simplificadas y apropiadas respecto al sistema que se desee modelar (Krüger , y otros, 2017).

Frente a esto, la aproximación de Bhatnagar, Gross y Krook (BGK) brinda un formalismo plenamente sustituible por la integral de colisión de la función de distribución; siendo este un operador lineal que garantiza la conservación de masa y momento, expresándose como:

$$Q_{col} = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}) \quad (3.44)$$

Donde $1/\tau$ representa la frecuencia de colisión, τ es la constante de tiempo que determina la velocidad del equilibrio y se conoce como tiempo de relajación, y f^{eq} hace referencia a la función de distribución de equilibrio.

Por lo tanto, al reemplazar (3.44) en (3.40) se tiene que:

$$\xi \cdot \nabla_x f^{(1)} + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f^{(1)} + \left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}) \quad (3.45)$$

En donde al discretizar la ecuación (3.45) en tiempo y espacio se obtiene:

$$f_a(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) - f_a(x, t) = -\frac{1}{\tau} [f_a(x, t) - f_a^{eq}(x, t)] \quad (3.46)$$

Destacando de la ecuación (3.46) que $f_a(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) - f_a(x, t)$ es el término de “streaming” o propagación y $-[f_a(x, t) - f_a^{eq}(x, t)]/\tau$ será el término de “collision” o relajación del sistema, mediante las funciones de distribución en una rejilla de a direcciones. No obstante, cabe aclarar que los pasos de colisión en un flujo con condiciones de frontera sólidas deben ser separados debido a que el “bounce back” o rebote, es una colisión disímil (Yan & Yuan, 2001).

Ahora bien, las colisiones de las partículas de un fluido se consideran como relajación hacia un equilibrio local; por lo cual, basados en la configuración de la **Figura 23**, dichas funciones se definen como (Thorne & Sukop, 2007):

$$f_a^{eq}(x) = w_a \rho(x) \left[1 + 3 \frac{e_a \cdot v}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_a \cdot v)^2}{c^4} - \frac{3v^2}{2c^2} \right] \quad (3.47)$$

Siendo w_a los pesos de las partículas definidos en la **Tabla 2**, e_a el promedio de las velocidades microscópicas en cada dirección, c la unidad básica de velocidad ($lu \text{ ts}^{-1}$), v la velocidad macroscópica del fluido y $\rho(x)$ la densidad del fluido.

3.7.5 Condiciones de contorno en LBM

La modelación matemática de un flujo requiere de la implementación de condiciones de contorno, que lo restrinjan de manera precisa a un dominio considerado. En el desarrollo del Método de Lattice Boltzmann (LBM), se destacan dos tipos de condiciones de contorno: las elementales y las complejas. Las elementales son aquellas en las cuales la geometría de la frontera física se constituye esencialmente por líneas, planos, y rectas; en donde se destaca una alineación paralela o perpendicular con las partículas del fluido en todo momento. Caso contrario sucede con las condiciones de contorno complejas, en donde la geometría irregular del medio dificulta una implementación a partir de curvas suaves.

Las condiciones de contorno de Von Neumann en este tipo de modelos, están estrechamente relacionadas con las variables macroscópicas tales como la velocidad y la densidad; en donde se parte de un sistema de ecuaciones con variables desconocidas, en cuanto a las funciones de equilibrio como parte del proceso de colisión en una frontera sólida. Aplicando este concepto al modelo D2Q9 como parte de la descripción del flujo de un fluido sobre una condición de frontera elemental; se obtiene entonces una serie de expresiones que denotan las funciones de equilibrio asociadas a los procesos de transmisión y propagación en fronteras sólidas (Thorne & Sukop, 2007).

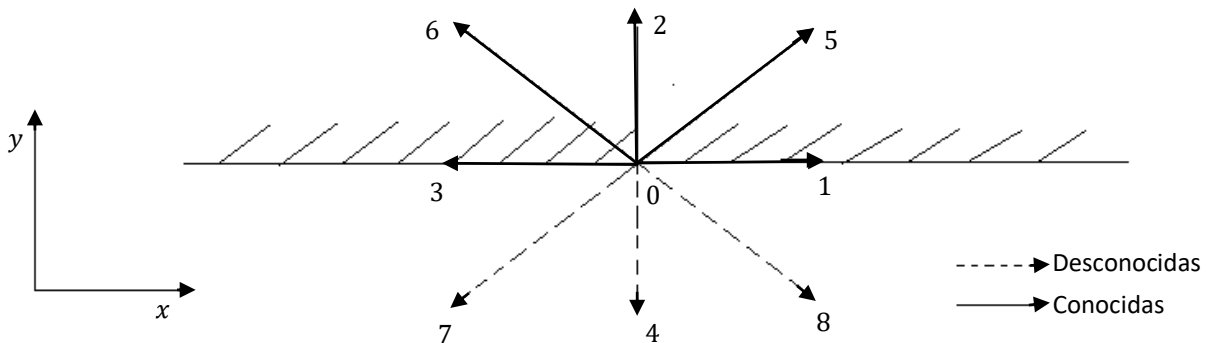


Figura 25. Esquema de frontera elemental superior.

Para la frontera superior mostrada en la **Figura 25**, dada la condición inicial de la ecuación (3.48) y las densidades conocidas a partir de (3.42) para las direcciones $\alpha = \{0, 1, 3, 4, 7, 8\}$; se requiere resolver el sistema de ecuaciones para f_4 , f_7 y f_8 las cuales son desconocidas. Para esto, se plantean las siguientes ecuaciones en relación a las variables desconocidas

teniendo en cuenta le densidad y las funciones de equilibrio conocidas. Inicialmente tenemos que:

$$\vec{u}_0 = \begin{bmatrix} u_0 \\ v_0 \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

$$0 = f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 \quad (3.49)$$

$$\rho v_0 = f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8 \quad (3.50)$$

En cuanto a las funciones de equilibrio, se hace la suposición que el “bounce back” o rebote, se presenta para la dirección normal a la condición de frontera, siendo en este caso la línea pintada de rojo. Por ende, se establece que las funciones de equilibrio conocidas son:

$$f_2 - f_2^{eq} = f_4 - f_4^{eq} \quad (3.51)$$

Para lo cual, mediante la ecuación (3.47) y la **Tabla 2** se encuentran los valores de f_4^{eq} y f_2^{eq} , dando como resultado:

$$f_2^{eq} = \frac{1}{9}\rho(1 + 3(1 \cdot v_0) + \frac{9}{2}(1 \cdot v_0)^2 - \frac{3}{2}\rho\vec{u}_0^2) \quad (3.52)$$

Al simplificar se obtiene:

$$f_2^{eq} = \frac{1}{9}\rho + \frac{1}{3}\rho v_0 + \frac{1}{2}\rho v_0^2 - \frac{1}{6}(u_0^2 + v_0^2) \quad (3.53)$$

Realizando el mismo procedimiento para f_4^{eq} se obtiene que:

$$f_4^{eq} = \frac{1}{9}\rho(1 + 3(-1 \cdot v_0) + \frac{9}{2}(1 \cdot v_0)^2 - \frac{3}{2}\rho\vec{u}_0^2) \quad (3.54)$$

Y, por ende:

$$f_4^{eq} = \frac{1}{9}\rho - \frac{1}{3}\rho v_0 + \frac{1}{2}\rho v_0^2 - \frac{1}{6}(u_0^2 + v_0^2) \quad (3.55)$$

En donde al despejar f_4 en (3.51) y reemplazar (3.54) y (3.55) se llega a :

$$f_4 = f_2 + f_4^{eq} - f_2^{eq} \quad (3.56)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} f_4 = f_2 + \frac{1}{9}\rho - \frac{1}{3}\rho v_0 + \frac{1}{2}\rho v_0^2 - \frac{1}{6}(u_0^2 + v_0^2) \\ - (\frac{1}{9}\rho + \frac{1}{3}\rho v_0 + \frac{1}{2}\rho v_0^2 - \frac{1}{6}(u_0^2 + v_0^2)) \end{aligned} \quad (3.57)$$

Y finalmente:

$$f_4 = f_2 - \frac{2}{3}\rho v_0 \quad (3.58)$$

Encontrando así el valor de f_4 , posteriormente se despeja f_8 de la ecuación (3.49).

$$f_8 = -f_1 + f_3 - f_5 + f_6 + f_7 \quad (3.59)$$

Consiguientemente para la ecuación (3.50), reemplazamos (3.58) y (3.59) con lo que se tiene:

$$\rho v_0 = f_2 - f_2 + \frac{2}{3}\rho v_0 + f_5 + f_6 - f_7 - (-f_1 + f_3 - f_5 + f_6 + f_7) \quad (3.60)$$

Al despejar para f_7 y simplificar se obtiene:

$$\rho v_0 = \frac{2}{3}\rho v_0 + 2f_5 - 2f_7 + f_1 - f_3 \quad (3.61)$$

$$f_7 = f_5 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{6}\rho v_0 \quad (3.62)$$

De igual forma a partir de (3.50) conociendo f_4 y f_7 se obtiene para f_8 :

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{6}\rho v_0 \quad (3.63)$$

4. MATERIALES Y MÉTODOS

La simulación desarrollada para el paso de un flujo sobre una geometría elemental se implementó la librería `pylbm`, la cual brinda soluciones numéricas a las funciones anteriormente establecidas, usando el proceso de transmisión y colisión. Como parte estructural para la ejecución del Método de Lattice Boltzmann (LBM), esta librería se compone de tres partes que se basan en los conceptos definidos como parte esencial de este método numérico.

Continuo, se usó una malla D2Q9 para dicha implementación mediante la simulación de un flujo por una geometría definida partiendo del modelo BGK; en donde se eligieron una serie de parámetros como la velocidad, viscosidad y geometría de la simulación, obteniendo, por consiguiente, el flujo de un fluido a diferentes números de Reynolds.

4.1 Geometría de la simulación

Dentro del conjunto de valores agregados a la implementación de un modelo de Lattice Boltzmann mediante la librería `pylbm`; se destaca la posibilidad de definir geometrías complejas como el conjunto de elementos que conforman diferentes objetos geométricos en un espacio determinado. No obstante, cabe resaltar que esta geometría no contiene ninguna consideración matemática en relación al modelo, más que un concepto estrictamente geométrico, al no implementar una malla y/o esquema de velocidad en particular.

Inicialmente, como parte del modelo para la simulación propuesta, se estableció como geometría un círculo con centro en el punto (40,70) y radio 20 (4.64) inscrito en una superficie plana de dimensiones 250×120 como se muestra en la **Figura 26**.

$$(x - 40)^2 + (y - 70)^2 = (20)^2 \quad (4.64)$$

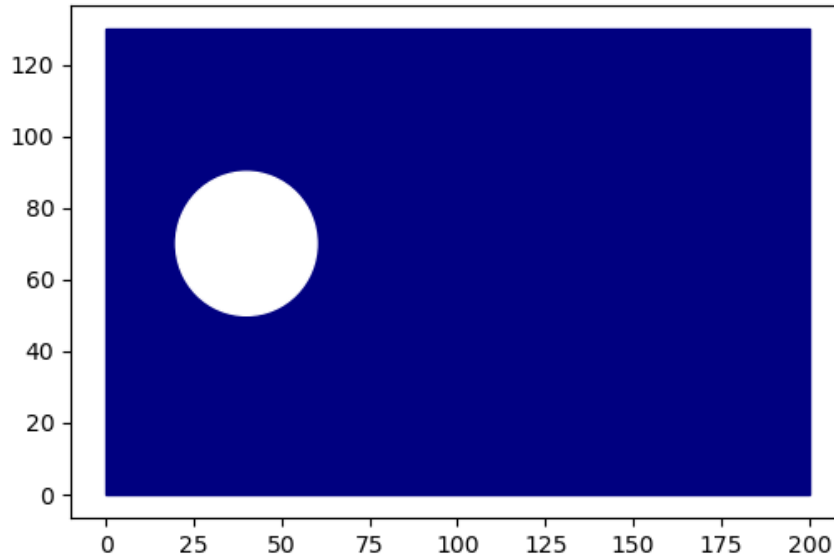


Figura 26. Implementación de la geometría para la simulación mediante un círculo inscrito en una superficie plana.

4.2 Malla de velocidades y direcciones para la Simulación

Para el modelo planteado, se estableció una malla de velocidades y direcciones D2Q9 (dos dimensiones y nueve velocidades) como se muestra en la **Figura 27**.

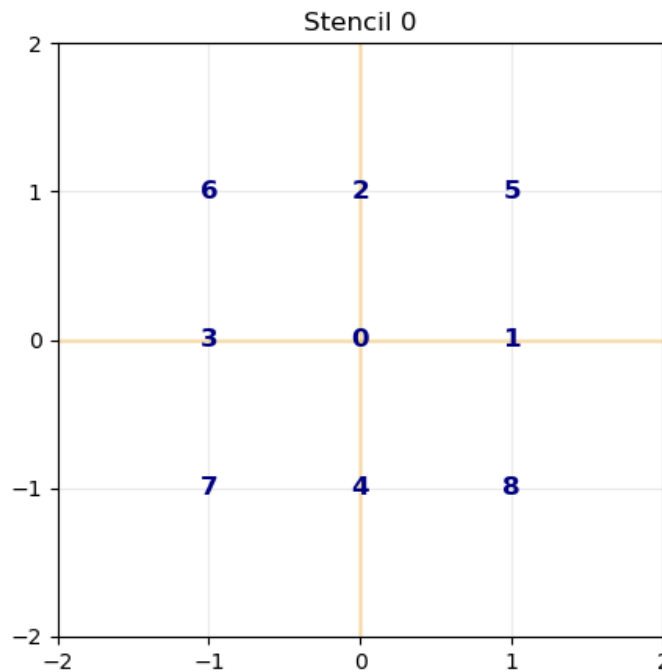


Figura 27. Malla de velocidades y direcciones implementada en la simulación del paso del fluido D2Q9.

De esta malla se destaca el conjunto de nueve velocidades para cada una de las nueve direcciones, siendo -1 y 1 la velocidad mínima y máxima que se presenta respectivamente. A partir de este modelo se realiza el análisis de transmisión y colisión mediante sus respectivas funciones de distribución y equilibrio para el caso de colisiones sobre la geometría implementada.

4.3 Dominio de la simulación.

Al implementar la librería pyIBM se debe establecer un dominio para la simulación a desarrollar. Este dominio se compone fundamentalmente de una geometría, una malla de velocidades y un paso espacial mediante una discretización cartesiana uniforme. Un ejemplo detallado de esto lo evidenciamos mediante la **Figura 28**, en donde se muestra un conjunto de celdas “fantasmas” alrededor del dominio de la simulación.

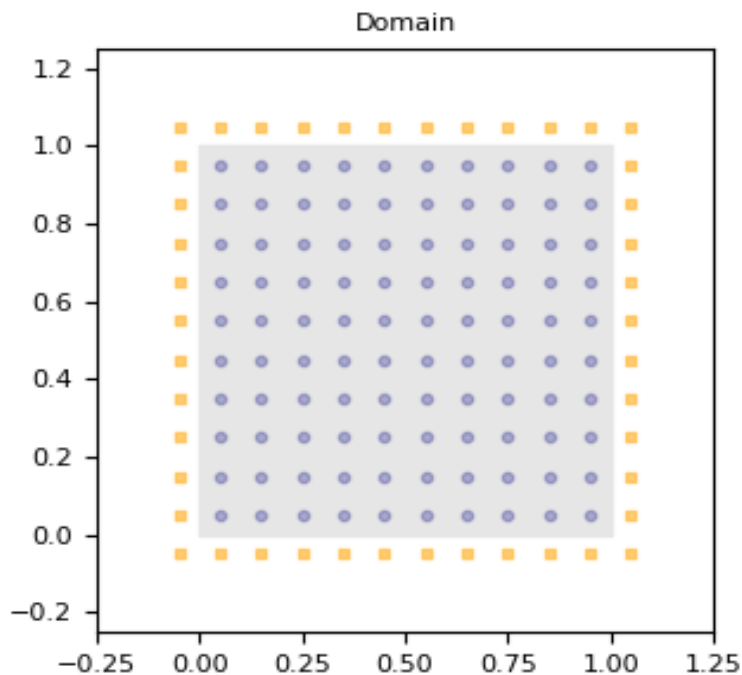


Figura 28. Ejemplo de celdas fantasmas aplicadas al dominio de la simulación y celdas del fluido.

Posteriormente se establece un paso espacial para la visualización en el dominio, y se añaden un conjunto de líneas de color que representan las funciones de distribución de los nodos fantasma, calculando con esto la distancia de cada punto hacia la frontera con una velocidad dada en un paso de tiempo (ver **Figura 29**). Para el caso de la simulación

propuesta, se establece un dominio de dimensiones 250×120 y se inscribe el círculo establecido como parte de la geometría a implementar en el modelo como se muestra en la **Figura 30**.

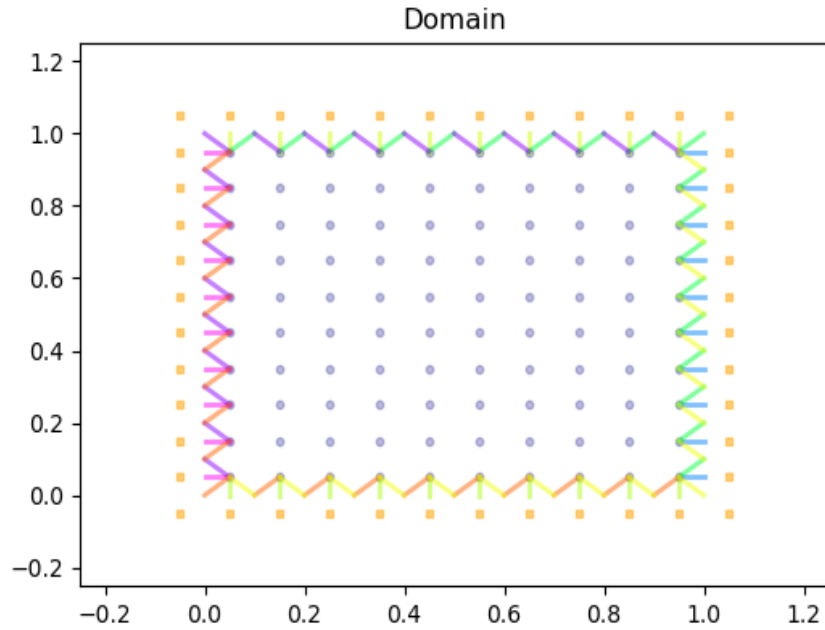


Figura 29. Ejemplo de dominio en donde se evidencia el conjunto de líneas de color hacia la frontera implementada.

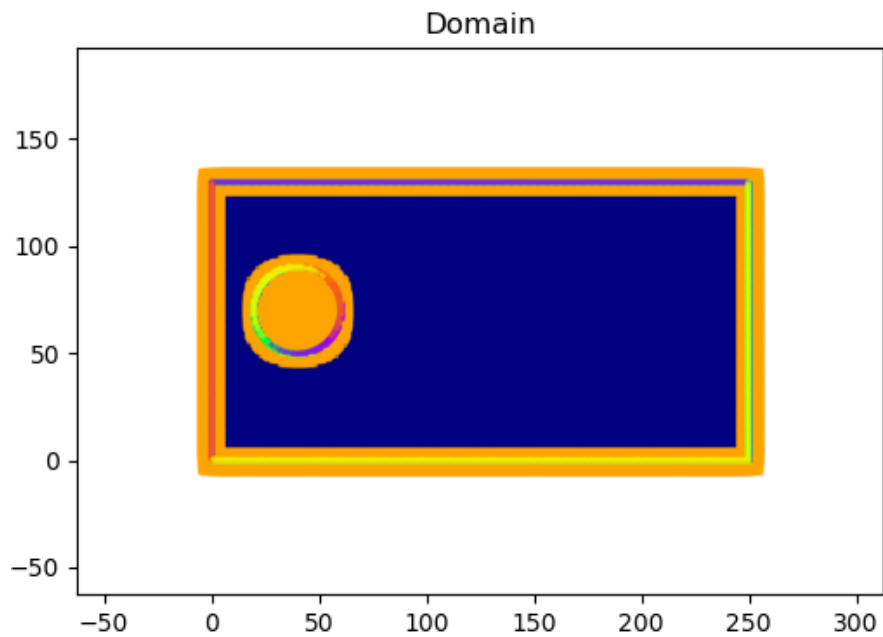


Figura 30. Dominio implementado para el paso del fluido de dimensiones 250×120 .

4.4 Esquema de momentos y velocidades para tiempos de relajación múltiple (MRT)

A partir del modelo Bhatnagar, Gross y Krook (BGK) se simplifica de manera importante la complejidad asociada a las integrales de colisión de la ecuación de Boltzmann; siendo esta una manera eficaz de facilitar en la simulación los procesos de colisión que se presentan entre las moléculas del fluido y las condiciones de contorno.

No obstante, el operador BGK tiene como contrapartida la reducción de su precisión y de estabilidad bajo grandes y bajas viscosidades respectivamente. Por tanto, se debe implementar el operador de colisión de relajación múltiple (MRT), el cual ofrece un mayor número de parámetros que se ajustan a este tipo de situaciones, brindando soluciones a estos problemas (Krüger, y otros, 2017). Una de las principales características del modelo MRT, es que las colisiones se realizan en el espacio de los momentos, siendo estos definidos mediante una matriz m_k de dimensiones $n \times m$ para una malla $D_n Q_m$ como se expresa en la ecuación (4.65).

$$m_k = \sum_{i=0}^{q-1} M_{ki} f_i \quad \text{para } k = 0, \dots, q-1. \quad (4.65)$$

Lo cual se puede escribir mediante una matriz como:

$$\mathbf{m} = \mathbf{M}\mathbf{f}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} m_0 \\ \vdots \\ m_{q-1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{0,0} & \dots & M_{0,q-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{q-1,0} & \dots & M_{q-1,q-1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_0 \\ \vdots \\ f_{q-1} \end{pmatrix} \quad (4.66)$$

A partir de las matrices anteriormente definidas y el modelo BGK expresado en la ecuación (3.46), se deriva el operador de colisión para tiempos de relajación múltiple (MRT), asumiendo que la matriz \mathbf{M} es invertible y por lo tanto $\mathbf{I} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}$. En donde se obtiene que:

$$f_a(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) - f_a(x, t) = -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M} \frac{1}{\tau} [f_a(x, t) - f_a^{eq}(x, t)] \quad (4.67)$$

Para el caso del MRT, la tasa de relajación se representa mediante ω y por lo tanto:

$$f_a(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) - f_a(x, t) = -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}\omega [f_a(x, t) - f_a^{eq}(x, t)] \quad (4.68)$$

Y al operar se obtiene:

$$f_a(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) - f_a(x, t) = -\mathbf{M}^{-1} \omega [\mathbf{M} f_a(x, t) - \mathbf{M} f_a^{eq}(x, t)] \quad (4.69)$$

Si $\mathbf{m} = \mathbf{M} \mathbf{f}$ y $\mathbf{S} = \omega \mathbf{I}$ entonces:

$$f_a(x + e_a \Delta t, t + \Delta t) - f_a(x, t) = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} [\mathbf{m}(x, t) - \mathbf{m}^{eq}(x, t)] \quad (4.70)$$

La expresión $\mathbf{S}(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{eq})$ representa la relajación de todos los momentos a una tasa ω . Mediante la expresión anteriormente definida, se establece tasas de colisión individuales para cada momento y se obtiene una matriz de relajación (4.71).

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \omega_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \omega_{q-1} \end{pmatrix} \quad (4.71)$$

Por lo tanto, al realizar un esquema de MRT en LBM se obtiene la representación dada en la **Figura 31**; destacando el paso de transmisión y colisión, los cuales se presentan como un bucle asociados a sus momentos y velocidades.

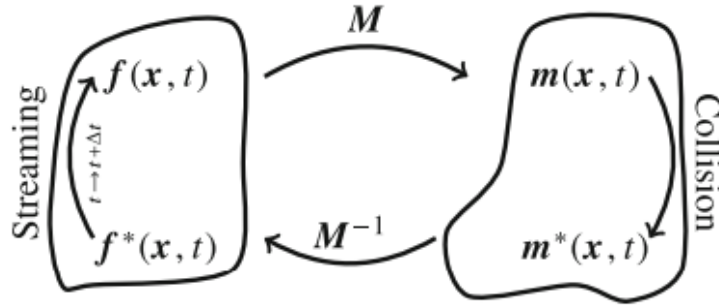


Figura 31. Representación esquemática de MRT en LBM. Tomado de (Krüger , y otros, 2017).

El esquema planteado anteriormente se aplica al modelo D2Q9 como se muestra a continuación, basándose en el proceso de ortogonalización de Gram Schmidt, en donde se establece la diferencia entre un vector \vec{w} y su proyección sobre otro vector \vec{h} (Silva, 1994).

Como parte de la simulación para la malla implementada D2Q9, se destacan las siguientes propiedades:

- $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$, en donde λ representa la velocidad del esquema.
- Conjunto de nueve velocidades $\{(0,0), (\pm 1,0), (0, \pm 1), (\pm 1, \pm 1)\}$
- Nueve polinomios implementados para la construcción de sus momentos.
- Nueve parámetros de relajación.

Consecuentemente, se construyó la matriz de momentos mediante los siguientes polinomios:

$$\begin{aligned}
 M_{\rho,i} &= 1, & M_{e,i} &= -4 + 3(x^2 + y^2), \\
 M_{\epsilon,i} &= 4 - \frac{21}{2}(x^2 + y^2) + \frac{9}{2}(x^2 + y^2)^2, & M_{j_x,i} &= x, \\
 M_{q_x,i} &= x(-5 + 3(x^2 + y^2)), & M_{j_y,i} &= y, \\
 M_{q_y,i} &= y(-5 + 3(x^2 + y^2)), \\
 M_{p_{xx},i} &= x^2 - y^2, & M_{p_{xy},i} &= xy.
 \end{aligned} \tag{4.72}$$

Por lo tanto, la matriz de momentos se define mediante el conjunto de velocidades para la malla D2Q9 establecidas en la **Tabla 2** siguiendo la configuración dada por la ecuación (4.73):

$$M_{ij} = P_i(v_j) \tag{4.73}$$

En donde se obtiene una matriz cuadrada de nueve filas y nueve columnas, las cuales se conforman a partir de la ecuación (4.73), evaluando cada una de las velocidades establecidas en las direcciones de la malla, en los polinomios definidos en (4.72), dando como resultado:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_\rho \\ M_e \\ M_\epsilon \\ M_{j_x} \\ M_{q_x} \\ M_{j_y} \\ M_{q_y} \\ M_{p_{xx}} \\ M_{p_{xy}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.74)$$

Posteriormente se definió los momentos de equilibrio de Gram-Schmidt en función de la densidad y la velocidad (Krüger , y otros, 2017):

$$\begin{aligned}
\rho^{eq} &= \rho, & e^{eq} &= \rho - 3\rho(v_x^2 + v_y^2), & \epsilon^{eq} &= 9\rho v_x^2 v_y^2 - 3\rho(v_x^2 + v_y^2) + \rho, \\
j_x^{eq} &= \rho v_x, & q_x^{eq} &= 3\rho v_x^3 - \rho v_x, & j_x^{eq} &= \rho v_y, \\
q_y^{eq} &= 3\rho v_y^3 - \rho v_y, & p_{xx}^{eq} &= \rho(v_x^2 + v_y^2), & p_{xx}^{eq} &= \rho v_x v_y.
\end{aligned} \quad (4.75)$$

Y finalmente se calcula la matriz de momentos inversa:

$$\mathbf{M}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & \frac{1}{9} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & 0 & 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & 0 & 0 & -\frac{1}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & 0 & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{12} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{12} & 0 & -\frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (4.76)$$

Y por consiguiente se obtiene entonces una matriz de relajación en donde las tasas de relajación cero, se presentan para los momentos conservados de densidad y velocidad:

$$\mathbf{S} = \text{diag}(0, \omega_e, \omega_\epsilon, 0, \omega_q, 0, \omega_q, \omega_v, \omega_v) \quad (4.77)$$

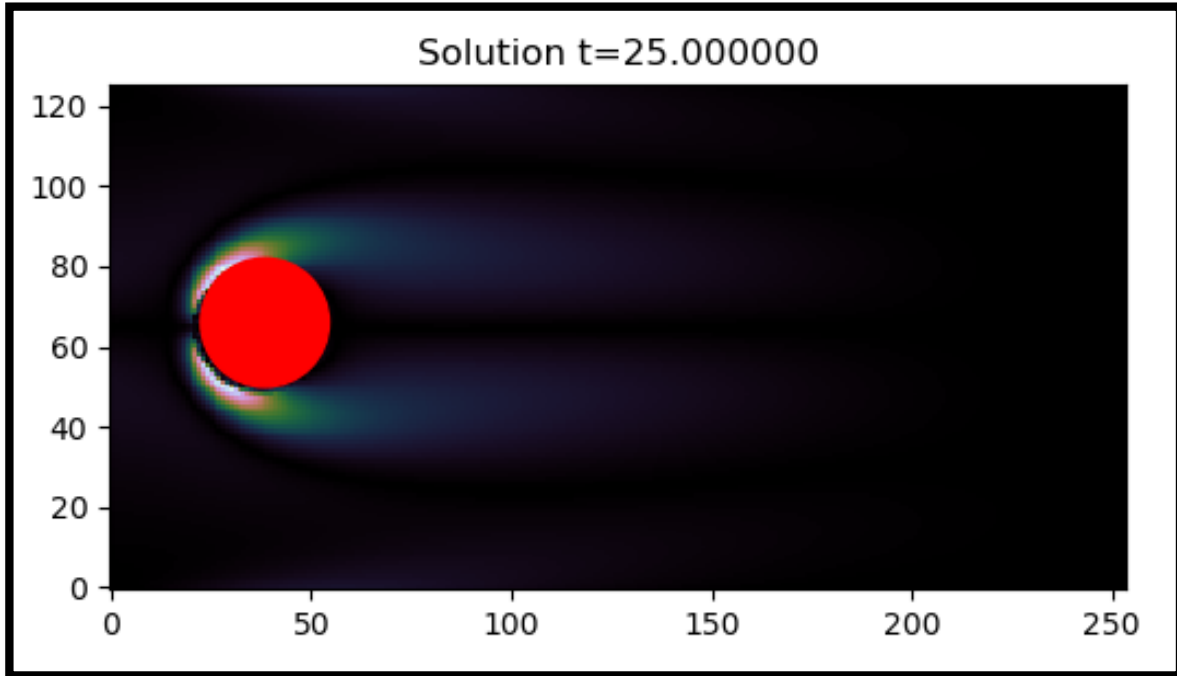


Figura 32. Simulación del paso de un flujo laminar alrededor de un círculo con número de Reynolds 25.

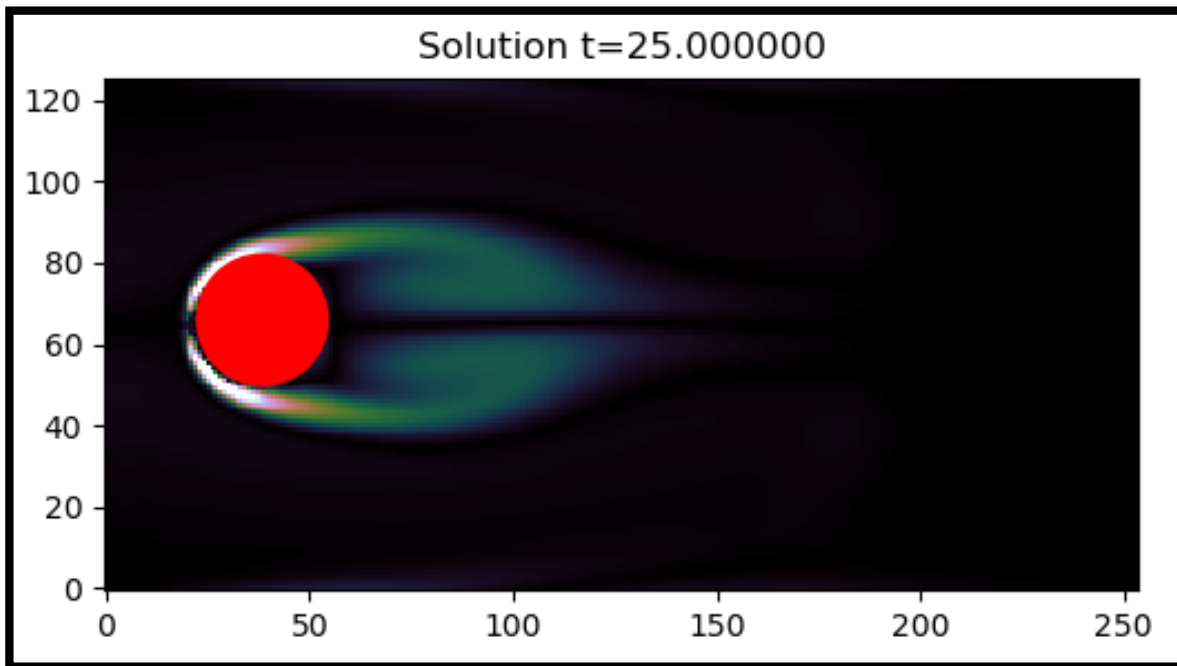


Figura 33. Simulación del paso de un flujo laminar alrededor de un círculo con número de Reynolds 125.

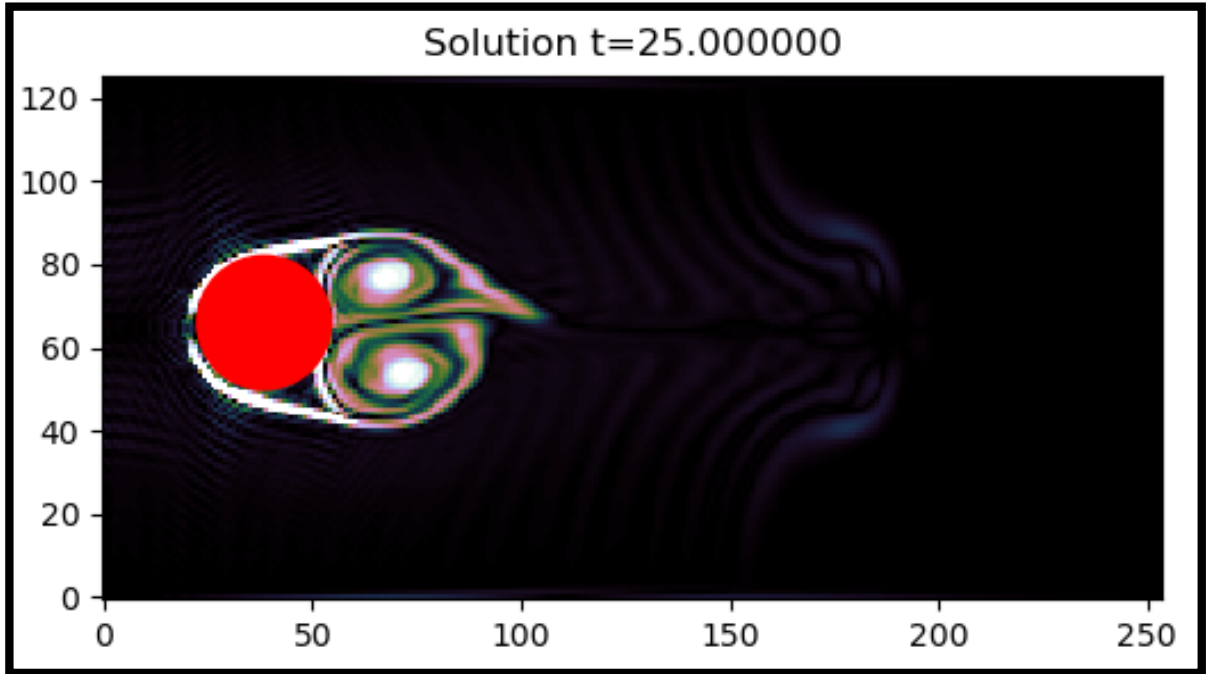


Figura 34. Simulación del paso de un flujo en transición alrededor de un círculo con número de Reynolds 2500.

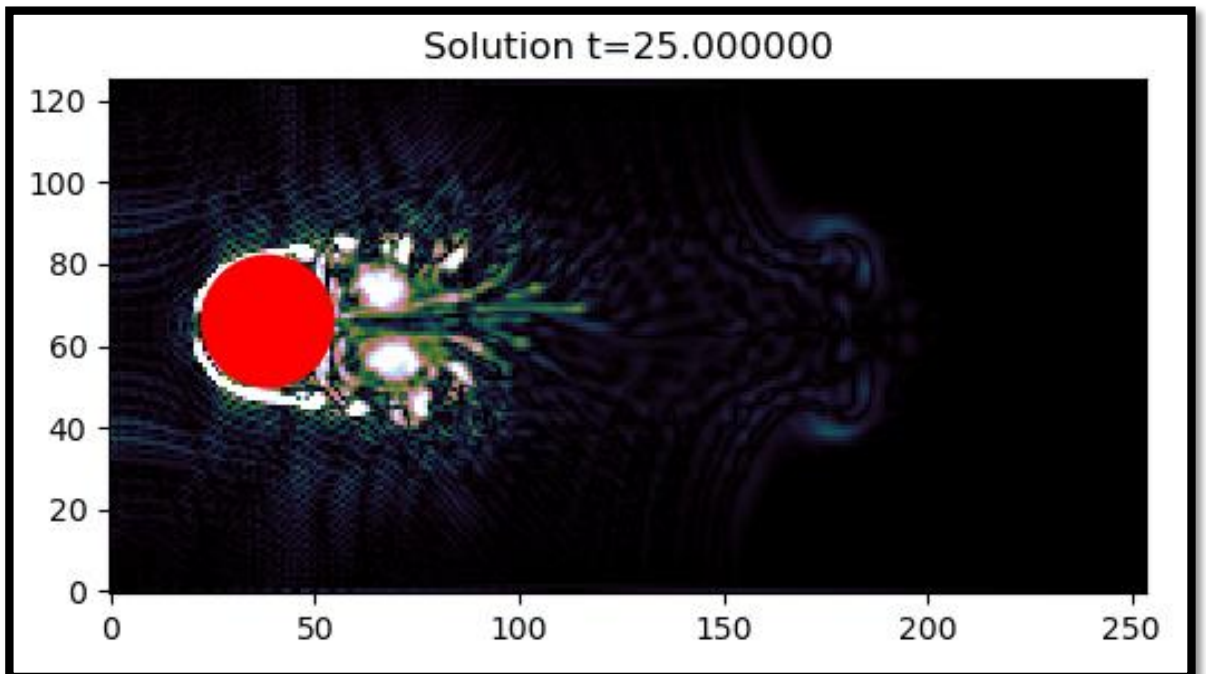


Figura 35. Simulación del paso de un flujo turbulento alrededor de un círculo con número de Reynolds 6250.

5. CONCLUSIONES

Durante el desarrollo del modelo implementado, se hizo uso de la librería `pylbm` del lenguaje de programación Python, como herramienta de cómputo para la simulación del paso de un fluido aplicando el método de Lattice Boltzmann; el cual se basa en el paso de transmisión y colisión mediante funciones de distribución y de equilibrio relacionadas a estos procesos respectivamente. Ante la presencia de dificultades asociadas a la complejidad de la modelación computacional de la ecuación de Boltzmann, se aplicó el modelo BGK con tiempos de relajación múltiple para la configuración matricial de los momentos asociados al paso de transmisión, y la formulación de la matriz de relajación indicada en el proceso de colisión. Obteniendo por consiguiente una simplificación de las expresiones matemáticas que modelan la dinámica a escala mesoscópica en la cual funciona el método.

A partir del estudio de los conceptos implementados en los autómatas celulares, se infiere que los procesos de transporte de partículas están estrictamente condicionados a la conservación de masa y momento, siendo estos conceptos los que posibilitan la reproducción de este tipo de sistemas, que están sujetos a reglas de actualización definidas.

Gracias a la discretización del tiempo y del espacio en la malla D2Q9, se logró obtener mediante este lenguaje de programación, salidas gráficas que muestran el paso del fluido por medio de la geometría implementada a diferentes números de Reynolds después de veinticinco segundos de inicio de la simulación; destacando de este método condiciones estables para todo tiempo en flujos laminares y en transición; no obstante, para el caso del flujo turbulento, se establece un desempeño menor de esta simulación pasado un periodo de tiempo mayor al evaluado.

Dentro del conjunto de diferencias establecidas para las simulaciones realizadas, se destaca variaciones en las condiciones de flujo para el mismo tiempo; esto se logró mediante la variación de la viscosidad, lo cual representó para los valores calculados en cuanto al números de Reynolds diferencias significativas, que permiten clasificar los flujos presentados en las figuras 32 y 33 como laminares, seguido de un flujo en transición para el caso de la figura 34 y por ultimo turbulento para la figura 35.

Los resultados obtenidos se describen como satisfactorios, debido a la fácil implementación del método y al correcto uso de las cantidades físicas asociadas al paso de fluidos sobre la geometría establecida en el dominio; puesto que este dominio garantizó las condiciones de borde de tipo “bounce back” o rebote para todo tiempo y sobre toda la superficie definida.

5.1 Recomendaciones y trabajo futuro

Dentro del conjunto de recomendaciones se destaca la necesidad de implementar de manera correcta las cantidades asociadas a las descripciones de los fluidos, puesto que, para el caso de las simulaciones realizadas, se evidencio una importante sensibilidad de la simulación a las variaciones de las velocidades de flujo, lo cual genera turbulencia y no permite de manera correcta para todo tiempo el desarrollo de la simulación.

Partiendo de la implementación funcional del método, el cual es capaz de resolver la ecuación continua de Boltzmann bajo la simplificación BGK para tiempos de relajación múltiple; se necesita continuar con el trabajo realizado para la simulación tridimensional del paso de un flujo por medio de otras geometrías. Mediante esta implementación, se desea entonces realizar el estudio del crecimiento de diversas poblaciones a partir de la definición de distintas propiedades físicas y químicas del medio simulado, con el fin de estudiar las condiciones óptimas para un desarrollo biológico de una población determinada.

Luego de realizar dicho modelo, se pretende validar de manera experimental los resultados obtenidos en un contexto real sobre el crecimiento de una determinada población bajo una serie de propiedades establecidas, guiando este modelo a condiciones de bajo gasto computacional.

Referencias

- Giovacchini, J. P. (Abril de 2018). Desarrollo e implementación de métodos basados en el modelo de Lattice Boltzmann para aplicaciones en mecánica de fluidos. Obtenido de <https://core.ac.uk/download/pdf/157740441.pdf>.
- Giovacchini, J., Ortiz, O., & Sacco, C. (13 de Noviembre de 2012). El método de Lattice Boltzmann con condiciones de borde en geometrías arbitrarias no regulares. Obtenido de <https://cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/article/view/4058>.
- Mora, X. (14 de marzo de 2017). Las ecuaciones de Navier - Stokes ¿Impredictibilidad incluso sin mariposas? Obtenido de <https://metode.cat/wp-content/uploads/2017/06/93ES-MONO-3-Navier-Stokes.pdf>.
- Munar Suarez, O. E., & Piñeros Hernández, J. F. (2016). Propuesta de diseño de sistemas complejos basada en autómatas celulares difusos no uniformes y algoritmos evolutivos. Obtenido de <https://repository.udistrital.edu.co/bitstream/handle/11349/3407/Pi%F1erosHern%E1ndezJohnFredy2016.pdf;jsessionid=214CAEC31FE22951D5BDA530AFC6738D?sequence=1>.
- Muñoz, K. A. (julio de 2019). Algoritmo preliminar de cálculo de flujo y dosis de neutrones para terapia por captura neutrónica mediante la implementación del método de lattice Boltzmann. Obtenido de <https://repository.javeriana.edu.co/handle/10554/44601>.
- Rahmany, M., Sundararajan, E., Mohd Zin, A., & Abdullah, S. (2013). Implementation Strategy fo D2Q9 Model on Desktop Grid Environment. Obtenido de <https://reader.elsevier.com/reader/sd/pii/S2212017313004556?token=8C506FB923394C2CC2EB4FC0AB73CA3D1E1B075EF3ABA91B7A09954D8ACDDB1BA1D99503F0D62D15F0FF3292E704F06D&originRegion=us-east-1&originCreation=20210402234545>.
- Sámano Tirado, D. A., & Sen, M. (15 de julio de 2009). Mecánica de Fluidos. Obtenido de <https://www3.nd.edu/~msen/MecFI.pdf>.
- Silva, J. D. (1994). Numerics of Gram-Schmidt Orthogonalization. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0024379594904936>.
- Vásquez, J. L. (2004). La ecuación de Navier-Stokes. Obtenido de https://www.researchgate.net/publication/28202179_La_ecuacion_de_Navier-Stokes_Un_reto_fisico-matematico_para_el_siglo_XXI.
- Yan, G., & Yuan, L. (10 de enero de 2001). Lattice Bhanthnagar-Gross-Krook model for the Lorenz attractor. Obtenido de <http://lsec.cc.ac.cn/~lyuan/phyD.pdf>.

Bibliografía

- Gladrow, D. A. (2000). Lattice- Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models. Berlin: Springer.
- Krüger , T., Kusumaatmaja, H., Kuzmin, A., Shardt, O., Silva, G., & Vigen, E. M. (2017). The Lattice Boltzmann Method - Principles and Practice. Switzerland: Springer.
- Larson, R., & Bruce H, E. (2010). Cálculo 2 de varias variables. México D.F: McGrawHill.
- Oliver Olivella, X., & Agelet de Saracibar, C. (2000). Mecánica de medios continuos para ingenieros. Catalonia: Edicions UPC.
- Serway, R., & Jewett, J. (2008). Física para ciencias e ingeniería. México D.F.: Cengage Learning Editores.
- Shames, I. H. (1995). Mecánica de Fluidos. Bogotá: McGRAW-HILL.
- Thorne, D. T., & Sukop, M. C. (2007). Lattice Boltzmann Modeling An Introduction for Geoscientists and Engineers. 2006: Springer.
- White, F. M. (2004). Mecánica de Fluidos. Madrid: McGrawHill.
- Wolf-Gladrow, D., & Alfred , W. (2005). Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models - An Introduction. Berlin: Springer.
- Wolfram, S. (Diciembre de 2002). A new kind of science. USA: Wolfram Media Inc.
- Younsi, R. (2012). Navier-Stokes Equations Properties, Description And Applications. New York: NOVA Science Publishers.