



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE
HIDALGO

INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

FORMACIÓN DE BURBUJAS EN
SISTEMAS BIFÁSICOS USANDO UN
MEDIO POROSO

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
Maestra en Ciencias en el Área de Física

PRESENTA:

Itzayana del Carmen Izquierdo Guzmán

DIRECTOR DEL TRABAJO:

Dr. Francisco S. Guzmán Murillo

Morelia, Michoacán. Agosto, 2019



Resumen

En este trabajo se describe el método de Lattice-Boltzmann y del modelo de Shan-Chen para estudiar la formación de burbujas en sistemas bifásicos. Se desarrolla la base matemática y los principios físicos detrás del método. Un algoritmo en 3D es descrito, el cual es sometido a distintas pruebas que describen la evolución de sistemas bifásicos. Además, se construye una configuración 3D que involucra un medio poroso jugando el papel de una interfaz que divide las dos fases. Finalmente, se realiza el estudio de algunos de los parámetros que afectan la formación de las burbujas, como la temperatura, el ángulo de contacto, el gradiente de presión y la geometría de la interfaz.

Palabras clave: Fluidos bifásicos, formación de burbujas con medios porosos, Método de Lattice-Boltzmann, estudio de parámetros.

Abstract

This thesis describes the Lattice-Boltzmann and the Shan-Chen model to study bubble generation on two-phase systems. The mathematical basis and the physical principles behind the methods are developed. An algorithm on 3D is described, which is submitted to several test that described the evolution of two-phase systems. Also, a 3D configuration that involves a porous medium as an interface that divides the two phases is developed. Finally, a study of some parameters that affect the bubble generation such as the temperature, contact angle, pressure gradient and the geometry of the interface is performed.

Key words: Two-phase fluids, bubble generation with porous medium, Lattice-Boltzmann Method, parameters study.

Índice general

1. Introducción	1
2. Hidrodinámica y Teoría Cinética	3
2.1. El estudio de un fluido considerando distintas escalas	3
2.2. Ecuación de continuidad	3
2.3. La ecuación de Euler	4
2.4. Las ecuaciones de Navier-Stokes	5
2.5. Ecuación de Estado	6
2.6. Teoría Cinética	7
2.7. Análisis de Chapman-Enskog	10
2.7.1. Ecuación de continuidad	12
2.7.2. Ecuaciones de Navier-Stokes	13
3. Método de Lattice-Boltzmann	14
3.1. Discretización en el espacio de velocidades	14
3.2. Discretización del espacio y del tiempo	19
3.3. De unidades físicas a unidades de código	21
3.3.1. Escalas de unidades y factores de conversión	21
3.4. Condiciones de Frontera	24
3.4.1. Condiciones de frontera periódicas	25
3.4.2. Condiciones de frontera de rebote	27
3.4.3. Condiciones de frontera abiertas	30
3.5. Implementación del Método de Lattice-Boltzmann	32
3.6. Pruebas básicas	33
3.6.1. Flujo de Couette 2D	33
3.6.2. Flujo de Poiseuille 2D	35
3.6.3. Flujo de Taylor-Green	36
3.6.4. Cavidad con una tapa deslizándose	37
4. Modelo de Shan-Chen	40
4.1. Fundamentos del modelo Shan-Chen	41
4.1.1. Incorporación del término de fuerza	41
4.1.2. Consistencia Termodinámica	43
4.1.3. Ecuaciones de Estado	43
4.1.4. Tensión superficial	45
4.2. Pruebas	46

4.2.1.	Ángulo de Contacto	46
4.2.2.	Choque de gotas y burbujas	48
4.3.	Medios porosos	49
4.3.1.	Configuración del sistema	50
4.3.2.	Caso 1: Geometría del medio poroso	51
4.3.3.	Caso 2: Fuerza aplicada	51
4.3.4.	Caso 3: Ángulos de contacto	52
4.3.5.	Caso 4: Temperaturas	53
5.	Conclusiones	64
	Bibliografía	65

Capítulo 1

Introducción

Durante las últimas décadas, el cambio climático que se presenta debido al calentamiento global provocado en su gran mayoría por grandes emisiones de gases de efecto invernadero a la atmósfera, se ha convertido en un problema alarmante. Estos gases se deben principalmente a las actividades humanas- quema de combustibles de fósiles, la deforestación, entre otras, y el principal de ellos es el Dióxido de Carbono (CO_2). Es por esta razón que se han buscado opciones tecnológicas para reducir las emisiones de CO_2 , y una de ellas es contenerlo en tierra mediante procesos químicos y físicos [1].

Una forma de retener el CO_2 es mediante la formación de burbujas de CO_2 en formaciones geológicas [2]. Existen experimentos realizados en laboratorios donde se ha logrado la formación de burbujas de CO_2 en agua [3]. Por otra parte, algunos de estos procesos de formación de burbujas de CO_2 se han podido simular numéricamente [4]. La simulación, a la vez que la experimentación del proceso, juega un papel relevante pues es posible determinar los parámetros y las condiciones mediante las cuales el proceso de formación puede lograrse de un modo eficiente, mediante la realización de experimentos numéricos que se pueden ejecutar en masa, y descartar los posibles experimentos que aportarán poco

En el ámbito numérico, simular la formación y evolución de burbujas de un gas en un líquido, como el CO_2 en agua, define un problema de fluidos con dos componentes en dos fases agua y vapor. Se trata de un problema que no es elemental, y requiere de la solución de la dinámica de fluidos gobernada por las ecuaciones de Navier-Stokes para dos fluidos viscosos e incompresibles.

De entre los métodos numéricos existentes para resolver este sistema de ecuaciones, existen los macroscópicos, que resuelven directamente las ecuaciones del fluido y extraen la evolución de las cantidades macroscópicas, a saber, la evolución de la densidad de los fluidos y su campo de velocidades. A la par, existe una clase de métodos que han adquirido la madurez necesaria para resolver este tipo de problemas. Se trata de métodos numéricos cuyo objetivo consiste en resolver la ecuación de Boltzmann para los fluidos en una escala mesoscópica. Se trata de los métodos de Lattice-Boltzmann, descritos en detalle en por ejemplo [5].

Dentro de este esquema es posible definir la interacción entre dos fluidos o entre dos fases, líquida y gaseosa, y además existen diversos métodos que permiten hacerlo [5, 6]. Entre los

más usados se encuentran: el método de gradiente de color [7], el modelo de Shan-Chen [8, 9], el modelo de energía libre [10], y algunos aún en fase de experimentación como el método simplificado *SMLBM* [11].

Sin perder el objetivo de lograr la simulación de la formación de burbujas de CO_2 en agua, esta Tesis representa un paso fundamental hacia lograr simular dicho proceso. Aquí se trata el problema de la formación de burbujas pero restringida al caso de un solo fluido con las dos fases. La estrategia consiste en que inicialmente se tienen separadas las dos fases con un medio poroso, cuya morfología es más bien irregular. Entonces, mediante la compresión de la fase gaseosa, se hace pasar el gas a través del medio poroso, el cual, debido a que presenta muchos obstáculos, fomenta la formación de burbujas que evolucionan y se insertan en la región donde solamente había líquido. Este proceso, estará restringido por el tipo de fluido del que se trate, de su viscosidad, la temperatura, de la razón de densidades entre la de la fase líquida y la gaseosa y finalmente por la estructura del medio poroso.

Finalmente, para estudiar el proceso de formación, de entre los varios métodos mencionado antes, se usó el de Shan-Chen [12], para el cual se presentan pruebas y elementos de diagnóstico a lo largo de este trabajo.

Este trabajo se dividió en 5 partes organizadas de la siguiente manera: en el capítulo 2 se hace una descripción de la dinámica que rige el comportamiento de los fluidos a un nivel macroscópico en donde las ecuaciones de Navier-Stokes son válidas, también se hace una descripción del comportamiento de las partículas que forman el fluido, usando para ello la Teoría Cinética donde la ecuación de Boltzmann es necesaria. Al final de este capítulo se establece la conexión entre la teoría cinética y las ecuaciones de Navier-Stokes a través del análisis de Chapman-Enskog. En el capítulo 3 se estudian las herramientas necesarias para establecer el método de Lattice-Boltzmann, es decir, se realiza la discretización de las ecuación de Boltzmann en el espacio físico y en el espacio de velocidades, se establecen distintas condiciones de frontera, así como la implementación numérica del método. En el capítulo 4 se presenta el modelo de Shan-Chen en donde las fuerzas intermoleculares juegan un papel muy importante en la dinámica de fluidos multi-fase, utilizado para la simulación de formación de burbujas de gas en medio del líquido, empleando para ello una interfaz porosa, en este capítulo se presentan los resultados obtenidos para la formación de dichas burbujas. En el capítulo 5 se presentan las conclusiones de este trabajo.

Capítulo 2

Hidrodinámica y Teoría Cinética

La Hidrodinámica es la ciencia que estudia el movimiento y las propiedades físicas de un fluido usando para esto ecuaciones matemáticas.

En este capítulo se estudian los conceptos fundamentales de la Hidrodinámica y de la Teoría cinética que permitirán establecer una conexión entre las variables macroscópicas de un fluido, como lo son la densidad ρ , la velocidad \vec{u} , etc., y las funciones de distribución a través del análisis Chapman-Enskog.

2.1. El estudio de un fluido considerando distintas escalas

El estudio de la dinámica de un fluido se puede realizar empleando distintas perspectivas, es decir, se puede pensar al fluido como un medio continuo con cantidades observables y que se pueden medir directamente en una escala macroscópica; también se puede considerar como un sistema formado por N moléculas en una escala microscópica o como distribuciones en una escala mesoscópica.

Para cada una de las descripciones anteriores se emplean distintos modelos matemáticos, en la escala macroscópica la dinámica y propiedades del fluido quedarán determinadas por las ecuaciones de Navier-Stokes y en la escala microscópica la dinámica será descrita por las ecuaciones de Newton en un régimen de N cuerpos. Por otro lado, la descripción de un fluido en la escala mesoscópica, la cual será la más relevante para los fines de este trabajo, se basa en la Teoría Cinética.

2.2. Ecuación de continuidad

Consideremos un elemento de un fluido, el cual se considera pequeño en comparación con el espacio que ocupa el dominio donde está el fluido pero es mucho más grande que el tamaño de las moléculas y la distancia que las separa, dicho elemento tiene una densidad ρ y ocupa un volumen V_0 y por lo tanto su masa es $\int_{V_0} \rho dV$. Ahora, consideremos una variación en la masa en cada unidad de tiempo. El cambio de la masa con respecto al tiempo es proporcional al flujo de masa que atraviesa una superficie $d\vec{A}$, cuya dirección normal apunta hacia afuera de V_0 , a una velocidad \vec{u} , lo cual se expresa como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_0} \rho dV = - \oint_{\partial V_0} \rho \vec{u} \cdot d\vec{A}, \quad (2.1)$$

donde la integral cerrada es tomada sobre la frontera de V_0 y el signo negativo indica que el flujo esta saliendo del volumen. Usando el Teorema de la Divergencia sobre la parte derecha de la ecuación (2.1),

$$\oint_{\partial V_0} \rho \vec{u} \cdot d\vec{A} = \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \vec{u}) dV, \quad (2.2)$$

sustituyendo la ecuación (2.2) en (2.1) tenemos que,

$$\int_{V_0} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) \right] dV = 0, \quad (2.3)$$

la única forma en que la ecuación se satisfaga es que el integrando sea igual a cero,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (2.4)$$

esta ecuación recibe el nombre de **ecuación de continuidad** y es importante porque indica la conservación de la masa.

2.3. La ecuación de Euler

La ecuación de Euler indica cómo cambia el momento dentro y fuera de un elemento de volumen de un fluido y además expresa la conservación de dicho momento. Esta ecuación es válida para fluidos ideales, es decir, las transferencias de momento entre los elementos de volumen vecinos son reversibles. Para obtener la expresión consideramos el cambio de momento neto con respecto al tiempo de un elemento de fluido que ocupa un volumen arbitrario V_0 , tiene densidad ρ y se mueve con velocidad \vec{u} , $\frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho \vec{u} dV$. Para un fluido ideal simple este cambio en el momento se debe a tres razones:

1. El flujo de momento que entra o sale del elemento del fluido a través de su frontera.
2. Diferencias en la presión p .
3. Intervención de fuerzas externas \vec{F} que actúan sobre el elemento del fluido, por ejemplo la gravedad.

Dichas contribuciones se traducen en los términos contenidos en el lado derecho de la ecuación de balance de momento:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho \vec{u} dV = - \oint_{\partial V_0} \rho \vec{u} \vec{u} \cdot d\vec{A} - \oint_{\partial V_0} p d\vec{A} + \int_{V_0} \vec{F} dV, \quad (2.5)$$

donde $\vec{u} \vec{u}$ es un tensor cuyas componentes son $u_i u_j$. Usando nuevamente el Teorema de la Divergencia sobre las integrales de superficie de la Ecuación (2.5), éstas toman la siguiente forma,

$$\oint_{\partial V_0} \rho \vec{u} \vec{u} \cdot d\vec{A} = \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) dV, \quad (2.6)$$

$$\oint_{\partial V_0} p d\vec{A} = \int_{V_0} \nabla p dV, \quad (2.7)$$

sustituyendo las ecuaciones (2.6) y (2.7) en (2.5) se tiene:

$$\int_{V_0} \left[\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) + \nabla p - \vec{F} \right] dV = 0, \quad (2.8)$$

nuevamente para que la ecuación se cumpla el integrando debe ser igual a cero y por lo tanto se obtiene la ecuación de Euler:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) + \nabla p - \vec{F} = 0. \quad (2.9)$$

Es posible escribir la Ecuación (2.9) de manera más general introduciendo el tensor de densidad de flujo de momento, $\vec{\Pi}$, el cual se define como,

$$\Pi_{ij} = \rho u_i u_j + p \delta_{ij}, \quad (2.10)$$

sustituyendo esta expresión en la Ecuación (2.10) tenemos:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{\Pi} = \vec{F}, \quad (2.11)$$

y se conoce como ecuación de momento de Cauchy.

2.4. Las ecuaciones de Navier-Stokes

Cuando se pasa del estudio de un fluido ideal al estudio de un fluido real se tiene que considerar la disipación de la energía debido a la viscosidad y a la fricción generada por el contacto de un elemento del fluido con sus vecinos, lo cual se traduce en una transferencia de momento irreversible. Para obtener las ecuaciones que describan correctamente la evolución del fluido se requiere hacer modificaciones a la ecuación de Euler para que incluya ambas transferencias de momento, reversible e irreversible.

Para obtener dichas ecuaciones considerando la viscosidad (fricción interna) y la conducción térmica del fluido se agrega un término $-\sigma'_{ij}$ en la Ecuación (2.10) [13] de la siguiente manera:

$$\Pi_{ij} = \rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \sigma'_{ij}, \quad (2.12)$$

donde σ'_{ij} es llamado tensor de esfuerzo viscoso y es un tensor de rango dos cuya forma general esta dada por la siguiente expresión:

$$\sigma'_{ij} = \eta \left[\frac{\partial u_i}{\partial u_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] + \zeta \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}, \quad (2.13)$$

donde η se conoce como coeficiente de viscosidad cortante y se define a $\zeta = \eta_B - \frac{2\eta}{3}$ (ζ es llamado segundo coeficiente de viscosidad y representa las tensiones normales de un elemento de fluido); ambos coeficientes son considerados positivos, isotrópicos e independientes de la

velocidad.

Sustituyendo ζ en la Ec. (2.13) y reagrupando, σ'_{ij} se separa de la siguiente manera,

$$\sigma'_{ij} = \eta \left[\frac{\partial u_i}{\partial u_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] + \eta_B \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}. \quad (2.14)$$

Finalmente, el tensor de esfuerzos total esta dado como la suma de la contribución de la presión y de la viscosidad y se puede escribir como

$$\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} - p \delta_{ij}. \quad (2.15)$$

Sustituyendo la Ec. (2.14) en la ecuación de Cauchy (Ec. (2.11)) se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\eta_B - \frac{2\eta}{3} \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + F_i, \quad (2.16)$$

a esta expresión se le conoce como **ecuación de Navier-Stokes**. Una forma de simplificar esta ecuación es considerando un fluido incompresible, es decir $\nabla \cdot \vec{u} = 0$, esto implica que el último término dentro del paréntesis se cancela y así se tiene la **ecuación de Navier-Stokes incompresible** [5],

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \right) \vec{u} = -\nabla p + \eta \Delta \vec{u} + \vec{F}, \quad (2.17)$$

donde $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j}$.

2.5. Ecuación de Estado

Para conocer el comportamiento de un fluido se necesita resolver el sistema de cuatro ecuaciones que cumplan con los principios de conservación de masa (ecuación de continuidad) y de momento (ecuación de Cauchy o la ecuación de Navier-Stokes, a cada componente espacial corresponde una ecuación), sin embargo, se tienen 5 variables desconocidas (ρ , p , u_x , u_y , u_z), por consecuencia el sistema de ecuaciones no tiene una solución única, por esta razón se requiere considerar una quinta ecuación al sistema.

La **ecuación de estado** del sistema relaciona cualquier variable de estado como la densidad, la presión, la temperatura, etc., con otras dos de estas variables.

Para incorporar dicha ecuación se utiliza el principio de estado de equilibrio termodinámico, el cual permite relacionar variables de estado del sistema a través de la **ecuación de estado**. Cada sistema termodinámico tiene asociado una ecuación de estado, sin embargo, la ecuación de estado para un gas ideal es muy común.

Si consideramos que el fluido se encuentra a una temperatura constante T_0 , se tiene que la ecuación de estado isotérmica tiene la forma:

$$p = \rho R T_0, \quad (2.18)$$

donde R es la constante específica del gas. La relación

$$c_s^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s, \quad (2.19)$$

considerando un proceso isentrópico ($s = cte$) se define la velocidad del sonido como:

$$c_s = \sqrt{RT_0}, \quad (2.20)$$

por lo tanto, la ecuación de estado que relaciona la densidad y la presión es:

$$p = c_s^2 \rho. \quad (2.21)$$

Finalmente, la Ecuación (2.21) y las Ecuaciones (2.11) y (2.17) forman un sistema de ecuaciones bien determinado que permitirá conocer la evolución de un fluido en cualquier punto del dominio.

2.6. Teoría Cinética

En la época actual, cada día surgen nuevos problemas y retos tecnológicos que involucran fluidos, por lo que, describir un fluido estudiando únicamente la dinámica no es suficiente, ya que observables como la viscosidad y la conducción del calor (coeficientes de transporte) se convierten en cantidades difíciles de calcular debido a que el estado interno del fluido se vuelve más complicado. Es por ello que, se requiere de otra herramienta para poder describir con mayor exactitud el fluido en cuestión.

Así que el siguiente paso es estudiar a los líquidos y gases como conjuntos finitos de átomos distribuidos de manera regular (moléculas) los cuales se encuentran en distintos estados de movimiento y para ello se emplea la **Teoría Cinética**.

La Teoría Cinética es la rama de la física estadística que estudia la dinámica de los procesos que se encuentran en estado de no equilibrio y el tiempo que tardan en alcanzar el equilibrio [14], a través de la función de distribución.

La función de distribución, $f(\vec{x}, \vec{\eta}, t)$, representa la densidad de probabilidad de encontrar una partícula que viaja con velocidad $\vec{\eta}$ alrededor de un punto \vec{x} al tiempo t . La función f tiene unidades

$$[f] = \frac{kg s^3}{m^6}.$$

Al considerar que la función f depende de la posición y de la velocidad de la partícula y que estas variables se pueden medir en cualquier instante de tiempo, entonces la partícula puede ser representada por un punto $(\vec{x}, \vec{\eta})$ en el *espacio fase*, se muestra un esquema considerando una coordenada espacial en la figura 2.1.

En principio la Teoría cinética es capaz de describir cualquier fluido, sin embargo, es más común su uso en la descripción de gases diluidos, es decir, se considera que la colisión simultánea de tres partículas no puede ocurrir. El estudio de la teoría cinética establece las relaciones necesarias para calcular las variables hidrodinámicas (ρ , \vec{v} , etc.) a través de integrales de f pesadas con alguna función que depende de $\vec{\eta}$ sobre todo el espacio de velocidades, estas integrales se conocen como momentos [5].

Así las las variables macroscópicas quedan establecidas de la siguiente manera:

- **DENSIDAD DE MASA** (momento cero):

$$\rho(\vec{x}, t) = \int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3 \xi. \quad (2.22)$$

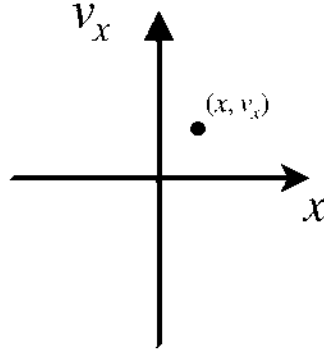


Figura 2.1: Estado en el espacio fase de una partícula que se mueve en una dimensión.

- **DENSIDAD DE MOMENTO** (primer momento):

$$\rho(\vec{x}, t)\vec{u}(\vec{x}, t) = \int \vec{\xi} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3\xi. \quad (2.23)$$

- **DENSIDAD DE ENERGÍA TOTAL** (segundo momento):

$$\rho(\vec{x}, t)E(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \int |\vec{\xi}|^2 f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3\xi. \quad (2.24)$$

La ecuación que permite conocer la forma como evoluciona la función de distribución en cada instante de tiempo fue establecida en 1872 por Ludwig Boltzmann. Esta ecuación describe la redistribución local de f debido a las colisiones ocasionadas por fuerzas externas que afectan la velocidad de las partículas $\vec{\xi}$ haciendo que las partículas colisionen entre sí,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\beta \frac{\partial f}{\partial x_\beta} + \frac{F_\beta}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} = \Omega(f), \quad (2.25)$$

donde el operador Ω se conoce como operador de colisión. En general, la forma de Ω considera todas las posibles colisiones entre dos partículas considerando fuerzas inter-moleculares y además debe satisfacer la conservación de la masa, del momento y de la energía total del sistema, es decir, se deben satisfacer las siguientes ecuaciones:

$$\int \Omega(f) d\xi = 0, \quad (2.26)$$

$$\int \vec{\xi} \Omega(f) d\xi = \vec{0}, \quad (2.27)$$

$$\int |\vec{\xi}|^2 \Omega(f) d\xi = 0. \quad (2.28)$$

Así, se tiene que Ω además de garantizar la conservación de las variables macroscópicas del sistema, asegura que f llegará a su estado de equilibrio durante la evolución del sistema. El operador de colisión más simple que cumple con estas características y que en el más usado

es el método de Lattice-Boltzmann fue propuesto por Bhatnagar, Gross and Krook in 1954. Este operador se conoce como *operador BGK*,

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \quad (2.29)$$

donde τ se conoce como *tiempo de relajación* y determina la rapidez con la que la función de distribución llega al equilibrio (τ es importante en este estudio porque a partir de él se calcula la viscosidad del fluido). Por otro lado, f^{eq} es la función de distribución de las partículas cuando llegan al equilibrio termodinámico y es de la forma,

$$f^{eq}(\vec{x}, |\vec{v}|, t) = \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-|\vec{u}|^2/(2RT)}, \quad (2.30)$$

esta distribución se conoce como *distribución de Maxwell-Boltzmann* y satisface las ecuaciones (2.22), (2.23) y (2.24).

El equilibrio termodinámico de la función de distribución se logra de manera local en escalas de tiempo pequeñas, mientras que, para lograr un estado de equilibrio termodinámico global del sistema se requiere considerar una escala mucho más grande de tiempo y de longitud, por lo que se busca encontrar conexiones que permitan relacionar las diferentes escalas. Por un lado se encuentran las escalas de longitud, existen diferentes escalas empezando de lo más grande a lo más pequeño (una ilustración de esto se muestra en la Figura 2.2):

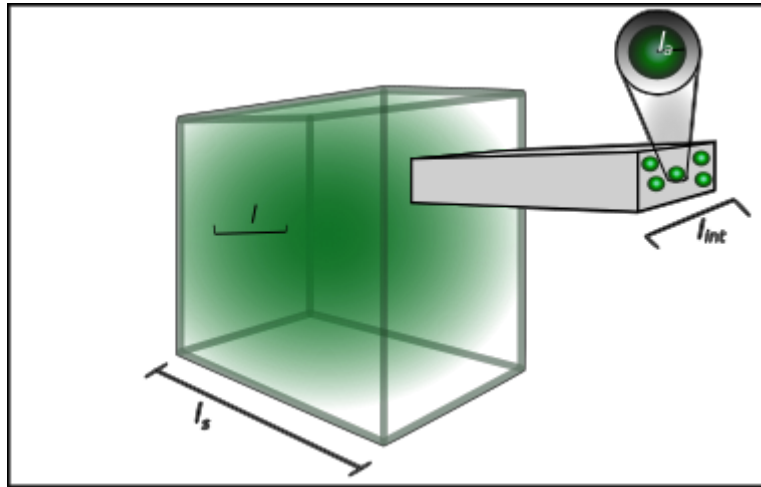


Figura 2.2: Se muestra un esquema de las diferentes escalas de longitud, l_s y l representa el tamaño del sistema completo (escala macroscópica y es aquí donde gobiernan las ecuaciones de Navier-Stokes, l_{int} describe el espacio que ocupan las distribuciones de moléculas (escala mesoscópica) y es donde la Teoría Cinética es válida y finalmente l_a representa el tamaño de una molécula y valen las leyes de Newton.

- El tamaño del sistema, l_s .
- La escala donde se calculan los gradientes de algunas propiedades macroscópicas, l .
- La distancia de interacción, es decir, cuando dos partículas colisionan cada una de ellas viaja una distancia antes de colisionar nuevamente con otra partícula, l_{int} .

- El tamaño de los átomos o moléculas, l_a .

También se puede hacer un análisis del tiempo donde ocurren diferentes eventos.

- Escalas de tiempo hidrodinámico: Aquí existen flujos de elementos de volumen que se mueven de una región a otra y dependiendo de si el fluido se estudia en un régimen inercial (donde es válida la primera ley de Newton) o un régimen viscoso (existen fuerzas actuando en el sistema y la primera ley de Newton ya no es válida) se tienen dos escalas de tiempo: (i) $t_{ine} \sim l/u$ y (ii) $t_{vis} \sim l^2/\nu$, donde $t_{ine} < t_{vis}$. La razón entre estas dos escalas de tiempo definen un número sin dimensiones conocido como **número de Reynolds**:

$$Re = \frac{t_{vis}}{t_{ine}} = \frac{ul}{\underbrace{\nu}_{\nu=\eta/\rho}} = \frac{\rho ul}{\eta}. \quad (2.31)$$

- Escala de tiempo acústica: determina qué tan rápido las ondas de compresión se propagan en el fluido, $t_{sonido} \sim l/c_s$ donde c_s es la velocidad del sonido en el fluido. Un factor importante en el estudio de fluidos es la capacidad que tiene de ser comprimido. La razón entre la velocidad de las ondas en un fluido y la velocidad macroscópica del fluido determina el coeficiente de compresibilidad (o incompresibilidad) de dicho fluido y se conoce como **número de Mach**:

$$Ma = \frac{u}{c_s}. \quad (2.32)$$

- Tiempo promedio de vuelo entre dos colisiones sucesivas: en esta escala de tiempo el sistema alcanza el equilibrio termodinámico localmente debido a las colisiones, $t_{int} = l_{int}/v_T$ donde $v_T = (k_B T/m)^{1/2}$ es la velocidad térmica de las moléculas.
- El tiempo de colisión: es el tiempo que dura una colisión entre dos partículas y se define como $t_c \sim l_a/v_T$.

2.7. Análisis de Chapman-Enskog

Para establecer la conexión entre la teoría cinética y las ecuaciones de Navier-Stokes se utiliza una herramienta conocida como *análisis de Chapman-Enskog* el cual utiliza un parámetro importante, este parámetro es conocido como **número de Knudsen** y se define como la razón entre la escala donde se desarrolla la teoría cinética (la distancia de interacción, l_{int}) y la escala macroscópica (el tamaño del sistema físico, l):

$$Kn = \frac{l_{int}}{l}, \quad (2.33)$$

si $Kn \ll 1$ las ecuaciones de Navier-Stokes son válidas, por otro lado, si $Kn > 1$ o $Kn \approx 1$ entonces la ecuación de Boltzmann es válida. La expansión hecha en el análisis de Chapman-Enskog se realiza alrededor de este parámetro.

Este análisis fue desarrollado en 1917 de manera independiente por Sydney Chapman y David Enskog. Cada uno desarrolló métodos para calcular las ecuaciones macroscópicas del

fluido partiendo de la ecuación de Boltzmann con el operador de colisión original. Finalmente, tiempo después Chapman desarrolló el análisis de Chapman-Enskog haciendo una combinación de las dos aproximaciones.

El análisis parte de hacer una expansión de perturbación de la función de distribución f_i alrededor de la distribución de equilibrio f_i^{eq} cuyo parámetro de expansión es Kn :

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \dots \quad (2.34)$$

donde ϵ^n representa los términos de orden Kn^n ; se consideran sólo los dos ordenes más bajos, debido a que a segundo orden se recuperan las ecuaciones de Navier-Stokes. Por otra parte es necesario hacer una expansión de las derivadas temporal y espacial en términos que abarcan algunos ordenes de Kn , a estas expansiones se les conocen como *expansiones multi-escala*:

$$\partial_t f_i = \epsilon \partial_t^{(1)} f_i + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} f_i + \dots, \quad (2.35)$$

$$\partial_\alpha f_i = \epsilon \partial_\alpha^{(1)} f_i, \quad (2.36)$$

no se debe considerar a los términos de la expansión hecha en la Ec. (2.35) como derivadas temporales sino como términos a diferentes ordenes en Kn que al ser sumados deben dar como resultado la derivada temporal. La ecuación de Boltzmann discretizada en el espacio físico, en el tiempo y en el espacio de velocidades se escribe como:

$$f_i(x_\alpha + c_{i\alpha} \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x_\alpha, t) - \Delta t \frac{f(x_\alpha, t) - f_i^{eq}(x_\alpha, t)}{\tau}, \quad (2.37)$$

donde haciendo una expansión en serie de Taylor de $f_i(x_\alpha + c_{i\alpha} \Delta t, t + \Delta t)$ como sigue:

$$f_i(x_\alpha + c_{i\alpha} \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x_\alpha, t) + \Delta t (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i + \frac{\Delta t^2}{2} (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha)^2 f_i + O(\Delta t^3), \quad (2.38)$$

igualando las Ecs. (2.37) y (2.38),

$$(\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha)^2 f_i = - \frac{f(x_\alpha, t) - f_i^{eq}(x_\alpha, t)}{\tau}, \quad (2.39)$$

sustituyendo las Ecs. (2.34), (2.35) y (2.36) y teniendo en cuenta que sólo los dos ordenes más bajos son importantes en el análisis tenemos:

$$\begin{aligned} & \epsilon \partial_t^{(1)} f_i^{(0)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} f_i^{(0)} + \epsilon^2 \partial_t^{(1)} f_i^{(1)} + c_{i\alpha} \epsilon \partial_\alpha^{(1)} f_i^{(0)} + c_{i\alpha} \epsilon^2 \partial_\alpha^{(1)} f_i^{(1)} \\ & + \frac{\Delta t}{2} \left(\epsilon \partial_t^{(1)} f_i^{(0)} + c_{i\alpha} \epsilon \partial_\alpha^{(1)} f_i^{(0)} \right)^2 = \frac{-1}{\tau} (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} - f_i^{eq}), \end{aligned} \quad (2.40)$$

agrupando los términos se tiene que:

- $O(\epsilon^0)$:

$$f_i^{(0)} = f_i^{eq}, \quad (2.41)$$

- $O(\epsilon^1)$:

$$(\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}) f_i^{(0)} = - \frac{1}{\tau} f_i^{(1)}, \quad (2.42)$$

▪ $\mathcal{O}(\epsilon^2)$:

$$\partial_t^{(2)} f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) (\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}) f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}. \quad (2.43)$$

Por otra parte, se deben satisfacer las siguientes relaciones, debido a que se cumple la conservación de masa, de momento y de energía:

$$\sum_i f_i^{(0)} = \rho, \quad (2.44)$$

$$\sum_i c_{i\alpha} f_i^{(0)} = \rho u_\alpha, \quad (2.45)$$

$$\sum_i f_i^{(n)} = 0, \forall n > 1, \quad (2.46)$$

$$\sum_i c_{i\alpha} f_i^{(n)} = 0, \forall n > 1, \quad (2.47)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i f_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} = \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \quad (2.48)$$

$$\Pi_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} = \sum_i f_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = \rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}), \quad (2.49)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)} \quad (2.50)$$

2.7.1. Ecuación de continuidad

Para recuperar la ecuación de continuidad se toma la suma de cada elemento de la Ecuación (2.42) y se usan las Ecs. (2.44), (2.45) y (2.46),

$$\cancel{\partial_t^{(1)} \sum_i f_i^{(0)}}^{\rho} + \cancel{\partial_\alpha^{(1)} \sum_i c_{i\alpha} f_i^{(0)}}^{\rho u_\alpha} + \frac{1}{\tau} \cancel{\sum_i f_i^{(1)}}^0 = 0,$$

reescribiendo se obtiene la ecuación:

$$\partial_t^{(1)} \rho + \partial_\alpha^{(1)} (\rho u_\alpha) = 0. \quad (2.51)$$

Por otra parte, sustituyendo la Ec. (2.42) en la Ec. (2.43), tomando la suma sobre i y usando las Ecuaciones (2.44)-(2.48) se tiene:

$$\begin{aligned} \cancel{\partial_t^{(2)} \sum_i f_i^{(0)}}^{\rho} - \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right) \left(\cancel{\partial_t^{(1)} \partial_t^{(1)} \sum_i f_i^{(0)}}^{\rho} + \cancel{\partial_t^{(1)} \partial_\alpha^{(1)} \sum_i c_{i\alpha} f_i^{(0)}}^{\rho u_\alpha} \right. \\ \left. + \cancel{\partial_t^{(1)} \partial_\beta^{(1)} \sum_i c_{i\beta} f_i^{(0)}}^{\rho u_\beta} + \cancel{\partial_\alpha^{(1)} \partial_\beta^{(1)} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)}}^{\rho u_\alpha u_\beta} + \frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(2)} \right) = 0, \end{aligned}$$

por lo que la ecuación resultante es de la forma:

$$\partial_t^{(2)}\rho - \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right) \left(\partial_t^{(1)}\partial_t^{(1)}\rho + 2\partial_t^{(1)}\partial_\alpha^{(1)}(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha^{(1)}\partial_\beta^{(1)}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}\right) = 0. \quad (2.52)$$

Multiplicando Ec. (2.51) por ϵ y la Ec. (2.52) por ϵ^2 y sumándolas se tiene la expresión:

$$\partial_t\rho + \partial_\alpha(\rho u_\alpha) - \epsilon^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right) \left(\partial_t^{(1)}\partial_t^{(1)}\rho + 2\partial_t^{(1)}\partial_\alpha^{(1)}(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha^{(1)}\partial_\beta^{(1)}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}\right) = 0, \quad (2.53)$$

si se toma la Ec. (2.42), se multiplica por $c_{i\beta}$ y se toma la suma sobre i , se tiene que:

$$\partial_t^{(1)}(\rho u_\alpha) = -\partial_\alpha^{(1)}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}, \quad (2.54)$$

sustituyendo esta ecuación y la Ec. (2.51) en la Ec. (2.53) el tercer término se elimina y finalmente se tiene:

$$\partial_t\rho + \partial_\alpha(\rho u_\alpha) = 0 \quad (2.55)$$

que es la **ecuación de continuidad** del sistema con un error de segundo orden $O(\epsilon^2)$.

2.7.2. Ecuaciones de Navier-Stokes

Para recuperar las ecuaciones de Navier-Stokes el primer paso es multiplicar la Ec. (2.42) por $c_{i\alpha}$ y $c_{i\alpha}c_{i\beta}$ y sumar sobre i , respectivamente, de donde se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\partial_t^{(1)}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta^{(1)}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = 0. \quad (2.56)$$

$$\partial_t^{(1)}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma^{(1)}\Pi_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} = -\frac{1}{\tau}\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}, \quad (2.57)$$

Por otra parte, se multiplica la Ec. (2.43) por $c_{i\alpha}$ y se suma sobre i , de donde se obtiene la siguiente expresión,

$$\partial_t^{(2)}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta^{(1)}\left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right)\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0, \quad (2.58)$$

multiplicando (2.57) por ϵ y (2.58) por ϵ^2 , y sumando ambas expresiones se tiene,

$$\underbrace{(\epsilon\partial_t^{(1)} + \epsilon^2\partial_t^{(2)})}_{\partial_t}(\rho u_\alpha) + \underbrace{\epsilon\partial_\beta^{(1)}}_{\partial_\beta}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = -\epsilon^2\partial_\beta^{(1)}\left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right)\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}, \quad (2.59)$$

donde todos los términos son conocidos excepto $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$. Para calcular este término partimos de la Ecuación (2.57). Haciendo el calculo para cada término de forma separada se tiene que:

$$\partial_t^{(1)}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = -\partial_\gamma^{(1)}(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) - c_s^2(u_\alpha\partial_\beta^{(1)}\rho + u_\beta\partial_\alpha^{(1)}\rho) - c_s^2\delta_{\alpha\beta}\partial_\gamma^{(1)}(\rho u_\gamma), \quad (2.60)$$

$$\partial_\gamma^{(1)}\Pi_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} = c_s^2(\partial_\beta^{(1)}\rho u_\alpha + \partial_\alpha^{(1)}\rho u_\beta) + c_s^2\delta_{\alpha\beta}\partial_\gamma^{(1)}(\rho u_\gamma), \quad (2.61)$$

sustituyendo estas dos ecuaciones en (2.57) se encuentra que,

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \tau\partial_\gamma^{(1)}(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) - \tau\rho c_s^2(\partial_\beta^{(1)}u_\alpha + \partial_\alpha^{(1)}u_\beta) \quad (2.62)$$

sustituyendo esta ecuación y la expresión para $\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}$ dada en (2.48); despreciando el término error $O(u^3)$ y realizando el álgebra correspondiente, finalmente se tiene la ecuación de *Navier-Stokes*:

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta[\eta(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)], \quad (2.63)$$

donde $p = c_s^2\rho$ y $\eta = \rho c_s^2(\tau - \frac{\Delta t}{2})$.

Capítulo 3

Método de Lattice-Boltzmann

Históricamente, el Método de Lattice Boltzmann (**LBM**) fue propuesto en 1988 por McNamara y Zanetti, quienes propusieron el *LBM* como un método numérico capaz de realizar simulaciones que describían la hidrodinámica de un fluido.

El método de Lattice Boltzmann, al igual que los modelos de malla, considera una ecuación cinética para describir el comportamiento de las funciones de distribución de las partículas, esta ecuación es conocida como la *ecuación de Lattice-Boltzmann* y es de la forma:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Omega_i(\vec{x}, t). \quad (3.1)$$

Esta ecuación describe la forma en la que un conjunto de partículas descritas por $f_i(\vec{x}, t)$ se mueve con una velocidad \vec{c}_i hacia un punto vecino $\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t$ en el lapso de tiempo $t + \Delta t$. Por otra parte, en el mismo instante de tiempo, las colisiones entre partículas son descritas por el operador de colisión, Ω_i , el cual redistribuye las partículas entre las poblaciones de f_i en cada sitio de la malla.

La conservación de ciertos momentos de $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ debido al operador de colisión tiene como consecuencia importante que los momentos de f^{eq} y los momentos de f coincidan, esto es:

$$\int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3 \xi = \int f^{eq}(\rho, \vec{u}, \theta, \vec{\xi}) d^3 \xi = \rho(\vec{x}, t), \quad (3.2)$$

$$\int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \vec{\xi} d^3 \xi = \int f^{eq}(\rho, \vec{u}, \theta, \vec{\xi}) \vec{\xi} d^3 \xi = \rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t), \quad (3.3)$$

$$\int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \frac{|\vec{\xi}|^2}{2} d^3 \xi = \int f^{eq}(\rho, \vec{u}, \theta, \vec{\xi}) \frac{|\vec{\xi}|^2}{2} d^3 \xi = \rho(\vec{x}, t) \vec{E}(\vec{x}, t), \quad (3.4)$$

$$\int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \frac{|\vec{\xi} - \vec{u}|^2}{2} d^3 \xi = \int f^{eq}(\rho, \vec{u}, \theta, \vec{\xi}) \frac{|\vec{\xi} - \vec{u}|^2}{2} d^3 \xi = \rho(\vec{x}, t) e(\vec{x}, t), \quad (3.5)$$

donde $\theta = RT/V^2$. La Ecuación (3.1) se obtiene al discretizar la ecuación de Boltzmann (2.25) en el espacio físico, en el espacio de velocidades y en el tiempo.

3.1. Discretización en el espacio de velocidades

El primer paso en la discretización de la ecuación de Boltzmann es discretizar el espacio de velocidades. Esto es necesario debido a que la función de distribución $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ depende

de siete parámetros $x, y, z, \xi_x, \xi_y, \xi_z$ y t . La discretización del espacio de velocidades permite pasar del espacio de velocidades 3D continuo a un conjunto pequeño de velocidades discretas en el cual las ecuaciones macroscópicas siguen siendo validas [5].

La expansión en la base de los polinomios de Hermite es una poderosa herramienta matemática que proporciona las bases para realizar la discretización del espacio de velocidades. La idea básica es usar la expansión en la base de los polinomios de Hermite para pasar del espacio continuo donde las integrales (3.2)- (3.5) están definidas a un espacio discreto donde las integrales son equivalentes a sumas discretas evaluadas en puntos específicos del espacio de velocidades.

Considere cualquier función $f(\vec{x})$ continua y bien comportada en \mathbb{R} . Esta función puede ser escrita como una serie de polinomios de Hermite en el espacio d-dimensional como sigue:

$$f(\vec{x}) = \omega(\vec{x}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)} \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\vec{x}) \quad (3.6)$$

donde $\mathbf{a}^{(n)}$ es un tensor de rango n y se expresa como:

$$\mathbf{a}^{(n)} = \int f(\vec{x}) \mathbf{H}^{(n)}(\vec{x}) d^d x,$$

y $\mathbf{H}^{(n)}$ es de la forma:

$$\mathbf{H}^{(n)}(\vec{x}) = (-1)^n \frac{1}{\omega(\vec{x})} \nabla^{(n)} \omega(\vec{x}), \quad \omega(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{-\vec{x}^2/2}. \quad (3.7)$$

Aplicando la Ecuación (3.6) a la función de equilibrio f^{eq} en el espacio de velocidades hasta orden N , se tiene que:

$$f^{eq}(\rho, \vec{u}, \theta, \vec{\xi}) = \omega(\vec{\xi}) \sum_0^N \mathbf{a}^{(n),eq}(\rho, \vec{u}, \theta) \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\vec{\xi}), \quad (3.8)$$

$$\mathbf{a}^{(n),eq}(\rho, \vec{u}, \theta) = \int f^{eq}(\rho, \vec{u}, \theta, \vec{\xi}) \mathbf{H}^{(n)}(\vec{\xi}) d^d \xi. \quad (3.9)$$

La función de distribución en el equilibrio se escribe en términos de la función de peso $\omega(\xi)$ tomando la forma:

$$f^{eq}(\rho, \vec{u}, \theta, \vec{\xi}) = \frac{\rho}{\theta^{d/2}} \omega\left(\frac{\vec{\xi} - \vec{u}}{\sqrt{\theta}}\right), \quad (3.10)$$

sustituyendo la Ec. (3.10) en la Ec. (3.9) se tiene la siguiente expresión para $\mathbf{a}^{(n),eq}$:

$$\mathbf{a}^{(n),eq}(\rho, \vec{u}, \theta) = \rho \int \omega(\vec{z}) \mathbf{H}^{(n)}(\sqrt{\theta} \vec{z} + \vec{u}) d^d z, \quad \vec{z} = \frac{\vec{\xi} - \vec{u}}{\sqrt{\theta}}, \quad (3.11)$$

Los primeros tres coeficientes en la serie de Hermite están conectados a la densidad, ρ , al momento, $\rho \vec{u}$, y a la energía, \vec{E} . De aquí se llega a que para que las ecuaciones macroscópicas se recuperen y las leyes de conservación sigan siendo válidas es suficiente considerar sólo los primeros tres coeficientes de la expansión. Por lo tanto, la expresión de la función de

distribución en el equilibrio haciendo la expansión de la serie de Hermite hasta orden $N = 2$ es:

$$\begin{aligned} f^{eq}(\rho, \vec{u}, \theta, \vec{\xi}) &= \omega(\vec{\xi}) \rho \underbrace{\left[1 + u_\alpha \xi_\alpha + \frac{1}{2}(u_\alpha u_\beta + (\theta - 1)\delta_{\alpha\beta})(\xi_\alpha \xi_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \right]}_{Q(\vec{u}, \theta, \vec{\xi})} \\ &= \omega(\vec{\xi}) \rho Q(\vec{u}, \theta, \vec{\xi}), \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde $Q(\vec{u}, \theta, \vec{\xi})$ es un polinomio multidimensional. Para llevar a cabo la discretización de f^{eq} se emplea la *regla de cuadratura de Gauss-Hermite*.

La regla de cuadratura de Gauss-Hermite consiste en lo siguiente: al multiplicar la integral de cualquier función definida en el espacio d -dimensional $f(\vec{x})$ por una función de peso $\omega(\vec{x})$, dicha integral se puede aproximar por una serie finita de funciones evaluadas en puntos específicos \vec{x}_i (se conocen como *absisas*) de la siguiente manera:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\vec{x}) f(\vec{x}) d^d x \approx \sum_{k=1}^q w_k f(\vec{x}_k), \quad w_k = \frac{n!}{(nH^{(n-1)}(x_k))^2} \quad (3.13)$$

si se cumple que $\mathbf{H}^{(n)}(x_k) = 0$, $k = 1, \dots, d$ y $q = n$, se tiene que cualquier polinomio $P^{(N)}(\vec{x})$ de orden $N = 2n - 1$ cumple la siguiente igualdad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\vec{x}) P^{(N)}(\vec{x}) d^d x = \sum_{k=1}^n w_k P^{(N)}(\vec{x}_k), \quad (3.14)$$

comparando la Ec. (3.11) con la Ec. (3.14) se tiene que:

$$\mathbf{a}^{(n),eq} = \rho \int \omega(\vec{\xi}) Q(\vec{\xi}) \mathbf{H}^{(n)}(\vec{\xi}) d^d \xi = \rho \sum_{k=1}^n w_k Q(\vec{\xi}_k) \mathbf{H}^{(n)}(\vec{\xi}_k), \quad (3.15)$$

de donde se tiene un conjunto de N funciones de distribución en el equilibrio asociadas a cada $\vec{\xi}_k$

$$f_k^{eq}(\vec{x}, t) = w_i \rho Q(\vec{u}, \theta, \vec{\xi}_k), \quad (3.16)$$

por lo tanto, la Ec. (3.12) toma la forma:

$$f_k^{eq} = w_k \rho \left[1 + u_{\alpha k} \xi_{\alpha k} + \frac{1}{2}(u_{\alpha k} u_{\beta k} + (\theta - 1)\delta_{\alpha\beta})(\xi_{\alpha k} \xi_{\beta k} - \delta_{\alpha\beta}) \right]. \quad (3.17)$$

Por otra parte, de acuerdo con la regla de cuadratura de Gauss-Hermite se tiene que para que las leyes de conservación no sean violadas es necesario considerar los polinomios de Hermite hasta orden $n = 3$, es decir, $\mathbf{H}^{(3)}(x_{\alpha k}) = 0$. Por lo tanto los conjuntos de velocidades para dos y tres dimensiones, D2Q9 y D3Q19 son usados en este trabajo, que se muestran en la Tabla (3.1) contienen un factor de $\sqrt{3}$, lo que lleva a introducir un nuevo conjunto de velocidades para las partículas:

$$\vec{c}_k = \frac{\vec{\xi}_k}{\sqrt{3}}, \quad (3.18)$$

y si además consideramos que el sistema se encuentra en un proceso isotérmico, $\theta = 1$, la Ec. (3.17) se reduce a la siguiente expresión:

$$f_k^{eq} = w_i \rho \left[1 + \frac{c_{\alpha k} u_{\alpha}}{c_s^2} + \frac{u_{\alpha} u_{\beta} (c_{\alpha k} c_{\beta k} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^2} \right], \quad (3.19)$$

donde $c_s^2 = 1/\sqrt{3}$ es la velocidad del sonido en el caso isotérmico.

Notación	abscisas x_k	Pesos w_i
D2Q9	$(0, 0)$	4/9
	$(\pm\sqrt{3}, 0), (0, \pm\sqrt{3})$	1/9
	$(\pm\sqrt{3}, \pm\sqrt{3})$	1/36
D3Q19	$(0, 0, 0)$	1/3
	$(\pm\sqrt{3}, 0, 0), (0, \pm\sqrt{3}, 0), (0, 0, \pm\sqrt{3})$	1/18
	$(\pm\sqrt{3}, \pm\sqrt{3}, 0), (\pm\sqrt{3}, 0, \pm\sqrt{3}), (0, \pm\sqrt{3}, \pm\sqrt{3})$	1/36

Tabla 3.1: Se muestran las abscisas y los pesos para dos conjuntos de velocidades: D2Q9 y D3Q19.

La discretización de la función de distribución $f(\vec{x}, t)$ se hace siguiendo un procedimiento análogo al que se realizó para f^{eq} , debido a que el conjunto de velocidades \vec{c}_k se eligió de tal manera que los momentos se conserven. Usando la regla de la cuadratura de Gauss-Hermite se tiene que:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(n)}(\vec{x}, t) &= \int f(\vec{x}, \vec{c}, t) \mathbf{H}^{(n)}(\vec{c}) d^d c \\ &= \int \frac{\omega(\vec{c})}{\omega(\vec{c})} f(\vec{x}, \vec{c}, t) \mathbf{H}^{(n)}(\vec{c}) d^d c \\ &= \sum_{k=1}^q f_k(\vec{x}, t) \mathbf{H}^{(n)}(\vec{c}_k), \end{aligned} \quad (3.20)$$

de donde se tienen q funciones $f_k(\vec{x}, t)$ de la forma:

$$f_k(\vec{x}, t) = \frac{w_k}{\omega(\vec{c}_k)} f(\vec{x}, \vec{c}_k, t), \quad (3.21)$$

cada velocidad \vec{c}_k tiene asociada una función de distribución $f_k(\vec{x}, t)$. Con esta discretización la ecuación de Boltzmann sin considerar fuerzas en el espacio de velocidades discreto se escribe como:

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + c_{\alpha k} \frac{\partial f_k}{\partial x_{\alpha}} = \Omega(f_k), \quad k = 1, \dots, q. \quad (3.22)$$

y los momentos macroscópicos se calculan como:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_k f_k = \sum_k f_k^{eq} \\ \rho \vec{u} &= \sum_k f_k \vec{c}_k = \sum_k f_k^{eq} \vec{c}_k. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Existen diferentes formas de discretizar el espacio de velocidades, donde se tienen en cuenta dos cosas: la primera, se busca encontrar el conjunto con el menor número de velocidades que permita recuperar las propiedades físicas deseadas; la segunda, se requiere que todos los momentos de peso w_k hasta quinto orden sean isotrópicos, para que esto se cumpla las siguientes relaciones se deben satisfacer:

$$\begin{aligned}
\sum_k w_k &= 1, \\
\sum_k w_k c_{\alpha k} &= 0, \\
\sum_k w_k c_{\alpha k} c_{\beta k} &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta}, \\
\sum_k w_k c_{\alpha k} c_{\beta k} c_{\gamma k} &= 0, \\
\sum_k w_k c_{\alpha k} c_{\beta k} c_{\gamma k} c_{\mu k} &= c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\mu} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma}), \\
\sum_k w_k c_{\alpha k} c_{\beta k} c_{\gamma k} c_{\mu k} c_{\nu k} &= 0,
\end{aligned} \tag{3.24}$$

con w_k positivos. Además todas las velocidades \vec{c}_k conectan sitios de la malla. En la Figura 3.1 se muestra un esquematización de los conjuntos de velocidades D2Q9 y D3Q19; mientras que, en las Tablas 3.2 y 3.3 se muestran los valores de $c_{\alpha k}$ con sus pesos correspondientes.

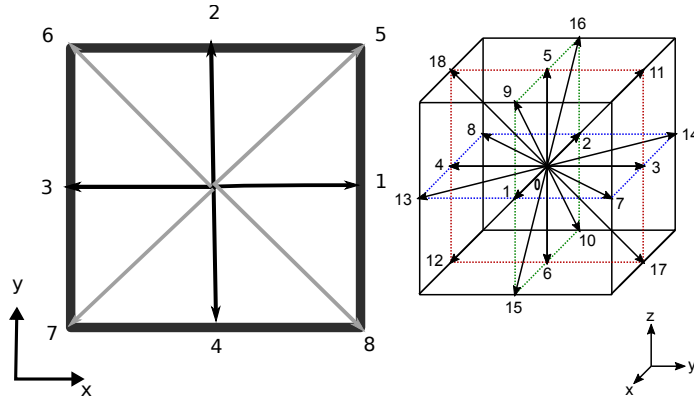


Figura 3.1: Conjunto de velocidades D2Q9 y D3Q19. La líneas que forman el cuadrado y el cubo representan líneas que definen la malla del dominio espacial en 2D y 3D respectivamente.

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
w_i	4/9	1/9	1/9	1/9	1/9	1/36	1/36	1/36	1/36
c_{xk}	0	+1	0	-1	0	+1	-1	-1	+1
c_{yk}	0	0	+1	0	-1	+1	+1	-1	-1

Tabla 3.2: D2Q9 escrito de forma explícita.

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
w_i	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$
c_{xk}	0	+1	-1	0	0	0	0	+1	-1	+1	-1	0	0	+1	-1	+1	-1	0	0
c_{yk}	0	0	0	+1	-1	0	0	+1	-1	0	0	+1	-1	-1	+1	0	0	+1	-1
c_{zk}	0	0	0	0	0	+1	-1	0	0	+1	-1	+1	-1	0	0	-1	+1	-1	+1

Tabla 3.3: D3Q19 escrito de forma explícita.

3.2. Discretización del espacio y del tiempo

La función de distribución depende además de la posición \vec{x} y del tiempo t y se define en el dominio discreto $[x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}] \times [z_{min}, z_{max}] \times [t_i, t_f]$, discretizado como:

$$\begin{aligned}
x_i &= x_{min} + i\Delta x, & i &= 0, \dots, N_x, \\
y_j &= y_{min} + j\Delta y, & j &= 0, \dots, N_y, \\
z_k &= z_{min} + k\Delta z, & k &= 0, \dots, N_z, \\
t_n &= t_i + n\Delta t, & n &= 0, \dots, N_t,
\end{aligned} \tag{3.25}$$

donde N_x , N_y , N_z y N_t representan el número de puntos que tendrá el dominio espacial y temporal, mientras que los índices i , j , k , n son enteros que etiquetan los puntos donde estará definida la ecuación de Boltzmann en el dominio discreto.

Al definir de esta manera el dominio se define una malla uniformemente espaciada con las siguientes resoluciones espaciales:

$$\begin{aligned}
\Delta x &= \frac{x_{max} - x_{min}}{N_x}, \\
\Delta y &= \frac{y_{max} - y_{min}}{N_y}, \\
\Delta z &= \frac{z_{max} - z_{min}}{N_z},
\end{aligned} \tag{3.26}$$

mientras que, la resolución temporal se define como:

$$\Delta t = \frac{t_f - t_i}{N_t}. \tag{3.27}$$

Ahora que ya se conoce la discretización del dominio espacio-tiempo, el siguiente paso es discretizar la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{\partial f_k(\vec{x}, t)}{\partial t} + c_{\alpha k} \frac{\partial f_k(\vec{x}, t)}{\partial x_\alpha} = -\frac{f_k(\vec{x}, t) - f_k^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau}. \tag{3.28}$$

Una manera de resolver esta ecuación consiste en asumir que la solución es de la forma $f_k = f_k(x(\zeta), t(\zeta)) = f_k(\zeta)$, donde ζ representa una parametrización de una trayectoria en el espacio [5]. Tomando la derivada total de f_k con respecto a ζ se tiene que:

$$\frac{df_k}{d\zeta} = \frac{\partial f_k}{\partial t} \frac{dt}{d\zeta} + \frac{\partial f_k}{\partial x_\alpha} \frac{dx_\alpha}{d\zeta} = -\frac{f_k(\zeta) - f_k^{eq}(\zeta)}{\tau}, \tag{3.29}$$

comparando las Ecs. (3.29) y (3.28) resulta que:

$$\frac{dt}{d\zeta} = 1, \quad \frac{dx_\alpha}{d\zeta} = c_{\alpha k}, \quad (3.30)$$

son dos ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden cuyas respectivas soluciones son:

$$t = \zeta + t_0, \quad \vec{x} = \vec{c}_k \zeta + \vec{x}_0, \quad (3.31)$$

donde $t_0 = t(\zeta = 0)$ y $\vec{x}_0 = \vec{x}(\zeta = 0)$ son constantes arbitrarias.

Por otra parte, reescribiendo la Ec. (3.29) y multiplicando por $e^{\zeta/\tau}$ se tiene que:

$$\underbrace{e^{\zeta/\tau} \frac{df_k}{d\zeta} + \frac{e^{\zeta/\tau}}{\tau} f_k}_{\frac{d(e^{\zeta/\tau} f_k)}{d\zeta}} = \frac{e^{\zeta/\tau}}{\tau} f_k^{eq}, \quad (3.32)$$

se integran ambos lados de la ecuación sobre un paso de tiempo de tamaño Δt :

$$\int_{\zeta_0}^{\zeta_0 + \Delta t} \frac{d}{d\zeta'} (e^{\zeta'/\tau} f_k) d\zeta' = \int_{\zeta_0}^{\zeta_0 + \Delta t} \frac{e^{\zeta'/\tau}}{\tau} f_k^{eq} d\zeta'. \quad (3.33)$$

La solución para la integral del lado izquierdo se calcula de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \int_{\zeta_0}^{\zeta_0 + \Delta t} \frac{d}{d\zeta'} (e^{\zeta'/\tau} f_k) d\zeta' &= e^{\zeta'/\tau} f_k(\zeta') \Big|_{\zeta_0}^{\zeta_0 + \Delta t} \\ &= e^{\zeta'/\tau} \underbrace{f_k(\vec{x}_0 + \vec{c}_k \zeta', t_0 + \zeta')}_{(3.31)} \Big|_{\zeta_0}^{\zeta_0 + \Delta t} \\ &= e^{(\zeta_0 + \Delta t)/\tau} f_k(\vec{x}_0 + \vec{c}_k(\zeta_0 + \Delta t), t_0 + \zeta_0 + \Delta t) \\ &\quad - e^{\zeta_0/\tau} f_k(\vec{x}_0 + \vec{c}_k(\zeta_0), t_0 + \zeta_0), \end{aligned}$$

si se elige $\zeta_0 = 0$ y se omite el índice 0 de las constantes \vec{x}_0 y t_0 entonces el resultado de la integral es:

$$\int_0^{\Delta t} \frac{d}{d\zeta'} (e^{\zeta'/\tau} f_k) d\zeta' = e^{\Delta t/\tau} f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t + \Delta t) - f_k(\vec{x}, t). \quad (3.34)$$

La parte derecha de (3.33) se discretiza usando una aproximación de *forward Euler* [5], la cual es una aproximación de primer orden, si se considera que f_k^{eq} es una función suave localmente. Haciendo un cambio de variable la integral toma la forma:

$$\int_t^{t + \Delta t} e^{(t'-t)/\tau} f_k^{eq}(\vec{x} + \vec{c}_k(t' - t)) dt' = f_k^{eq}(\vec{x}, t) \Delta t. \quad (3.35)$$

Finalmente, sustituyendo los resultados de (3.34) y (3.35) en (3.33) el resultado que se obtiene es:

$$f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = e^{-\Delta t/\tau} f_k(\vec{x}, t) + \frac{e^{\Delta t/\tau}}{\tau} f_k^{eq}(\vec{x}, t) \Delta t, \quad (3.36)$$

haciendo una expansión en serie de Taylor de la función exponencial (ya que Δt es pequeño) se tiene que:

$$\begin{aligned}
f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau} + O(\Delta t^2)\right) f_k(\vec{x}, t) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau} + O(\Delta t^2)\right) \frac{f_k^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau} \Delta t \\
&= f_k(\vec{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} f_k(\vec{x}, t) + \frac{f_k^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau} \Delta t + O(\Delta t^2) \\
&= f_k(\vec{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_k(\vec{x}, t) - f_k^{eq}(\vec{x}, t)) + O(\Delta t^2),
\end{aligned}$$

por lo tanto,

$$f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(\vec{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_k(\vec{x}, t) - f_k^{eq}(\vec{x}, t)). \quad (3.37)$$

Ésta es la ecuación de *Lattice-Boltzmann* para el operador de colisión **BGK**.

Ahora que ya se ha discretizado la ecuación de Boltzmann en el tiempo, en el espacio físico y en el espacio de velocidades es importante que las variables utilizadas en el código no tengan dimensiones, por lo que en la siguiente sección se mostrará una forma de pasar de unidades físicas a unidades de código.

3.3. De unidades físicas a unidades de código

En el método de Lattice-Boltzmann se busca estudiar la dinámica y las propiedades físicas de los fluidos que se encuentran en el mundo real por lo cual un punto crucial en las simulaciones es obtener los parámetros numéricos adecuados que correspondan a las cantidades físicas de cada sistema. En la siguiente sección se desarrollará una forma de pasar de cantidades con dimensiones a sus equivalentes en cantidades sin dimensiones.

3.3.1. Escalas de unidades y factores de conversión

Al implementar de forma apropiada combinaciones de unidades longitud l , de tiempo t y de masa m , se puede obtener la unidad de cualquier cantidad mecánica q . En la mayoría de los trabajos se emplea el sistema internacional de unidades *SI*, donde la longitud se mide en metros (m), el tiempo en segundos (s) y la masa en (Kg); por lo tanto, las unidades para q , $[q]$, son:

$$[q] = [l]^{q_l} [t]^{q_t} [m]^{q_m}, \quad (3.38)$$

donde q_l , q_t y q_m son números que se determinan para cada cantidad q . En la Tabla 3.4 se muestran diferentes cantidades físicas con el fin de ilustrar el funcionamiento de la Ec. (3.38).

Para obtener las cantidades en unidades de código, que son usadas en *LBM* es suficiente con dividir la cantidad con dimensiones entre un factor de conversión apropiado que tenga la misma dimensión. En lo siguiente, se usará C para denotar los factores de conversión y el apostrofe ' para las cantidades sin dimensiones.

Las cantidades que aparecen de forma natural en *LBM* son la densidad, la velocidad (la longitud) y el tiempo, es por ello que se busca determinar los factores de conversión para

Cantidad q	Símbolo	Unidad	q_l	q_t	q_m
Longitud	l	m	1	0	0
Tiempo	t	s	0	1	0
Masa	m	Kg	0	0	1
Velocidad	u	m/s	1	-1	0
Densidad	ρ	Kg/m^3	-3	0	1

Tabla 3.4: Se muestran los números q_l , q_t y q_m para distintas cantidades físicas.

estas cantidades.

Para obtener el factor de conversión de cualquier otra cantidad se emplea la **Ley de semejanza**: si dos sistemas que describen flujos en un régimen incompresible tienen el mismo número de Reynolds y la misma geometría se dice que son dinámicamente semejantes.

¿Qué significa que dos flujos tengan la misma geometría y el mismo número de Reynolds? Se dice que cuerpos que tienen la misma forma son geoméricamente semejantes si se pueden construir a partir de otro cambiando únicamente sus dimensiones lineales en la misma proporción.

Por otra parte, cualquier flujo puede ser determinado si se conocen tres parámetros: la viscosidad cinemática del fluido, ν (conocida), la velocidad \vec{u} (se obtiene al resolver las ecuaciones de Navier-Stokes) y las propiedades geométricas de la región por la que atraviesa el flujo, las cuales son determinadas por una longitud lineal que se denota como l . Por lo que, sólo una cantidad sin dimensiones se puede construir a partir de los tres parámetros antes mencionados y corresponde al número de Reynolds:

$$Re = \frac{ul}{\nu},$$

así, cualquier otro parámetro sin dimensiones puede ser escrito en función del número de Reynolds.

Lo anterior proporciona una herramienta poderosa a la hora de realizar simulaciones numéricas, ya que permite realizar simulaciones que corresponden a sistemas físicos, ya que los números de Reynolds en ambos sistemas (sistema con dimensiones, u , ν y l , y sistemas sin dimensiones, u' , ν' y l') son iguales debido a ley de semejanza:

$$\frac{lu}{\nu} = \frac{l'u'}{\nu'}, \quad (3.39)$$

o de forma equivalente,

$$\frac{C_l C_u}{C_\nu} = 1, \quad (3.40)$$

ya que $l' = l/C_l$, $u' = u/C_u$ y $\nu' = \nu/c_\nu$.

La ley de semejanza para el número de Reynolds sólo define la relación de los factores de conversión de la viscosidad, la longitud y la velocidad y a partir de esto se encuentra que la expresión para cualquier otro factor de conversión es una combinación de estos tres factores y además es única.

Selección de parámetros en el *LBM*

El primer paso es relacionar los parámetros físicos con los parámetros numéricos. Los parámetros que son de interés son:

- La distancia entre un sitio de la malla al vecino más próximo, Δx , cuya unidad física es $[\Delta x] = m$.
- El tamaño del paso de tiempo, Δt , y el tiempo de relajación, τ , la unidad física que los describe es $([\Delta t] = [\tau] = s)$.
- La densidad del fluido, $[\rho] = Kg/m^3$.
- La velocidad u se requiere conocer cuando se emplean ciertas condiciones de frontera, $[u] = m/s$.

Usualmente, se fijan $\Delta x' = \Delta t' = \rho'_o = 1$, de tal manera que los factores de conversión sean iguales a los valores físicos:

$$\begin{aligned} C_l &= \frac{\Delta x}{\Delta x'} = \Delta x, \\ C_t &= \frac{\Delta t}{\Delta t'} = \Delta t, \\ C_\rho &= \frac{\rho}{\rho'} = \rho, \end{aligned} \tag{3.41}$$

$$C_u = \frac{C_l}{C_t} = \Delta x / \Delta t. \tag{3.42}$$

Por otra parte, como el tiempo de relajación tiene unidades de tiempo, se puede relacionar con su correspondiente parámetro sin dimensiones τ' mediante el factor de conversión para Δt de la siguiente manera:

$$\tau = \tau' C_t = \tau' \Delta t. \tag{3.43}$$

La viscosidad también es un parámetro importante que se debe tener en cuenta cuando se realizan las simulaciones numéricas. Ésta está relacionada con el tiempo de relajación mediante la siguiente expresión:

$$\nu' = c_s'^2 \left(\tau' - \frac{1}{2} \right), \tag{3.44}$$

donde $c_s' = 1/\sqrt{3} \approx 0.577$ es la velocidad del sonido en la malla. Si se consideran las unidades físicas de ν , $[\nu] = m^2/s$, se tiene que el factor de conversión que le corresponde es $C_\nu = C_l^2/C_t$ y por consiguiente, la viscosidad cinemática se relaciona con los parámetros de la simulación mediante la siguiente expresión:

$$\nu = c_s'^2 \left(\tau' - \frac{1}{2} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t}. \tag{3.45}$$

Adicionalmente, en el método de *LB* se pueden encontrar otras cantidades tales como: la presión p , esfuerzos σ y fuerza F . La presión se relaciona con las variables en el sistema sin unidades mediante la siguiente relación:

$$p = p_0 + p^* C_p, \tag{3.46}$$

con p_0 una presión física de referencia que se elige arbitrariamente, $C_p = C_\rho C_l^2 / C_t^2$ y $p^* = c_s'^2 \rho^*$, donde ρ^* son las fluctuaciones de la densidad $\rho^* = \rho' - \rho'_0$.

El tensor de esfuerzo tiene las mismas unidades físicas que la presión, $C_\sigma = C_p$, por lo tanto la relación que se tiene para el tensor de esfuerzos pasar de un sistema a otro es $\sigma = \sigma' C_p$.

Además, el factor de conversión para cualquier fuerza es: $C_F = C_\rho C_l^4 / C_t^2$.

3.4. Condiciones de Frontera

Imponer condiciones de frontera es uno de los pasos más importantes durante el estudio de problemas que incluyan flujos, ya que afectan su comportamiento.

En el marco de *LBM*, las condiciones de frontera se aplican en los sitios de la malla que por lo menos conectan un nodo definido como sólido con un nodo definido como fluido \vec{x}_b , una esquematización de lo anterior se encuentra en la Figura 3.2. Al resolver la ecuaciones

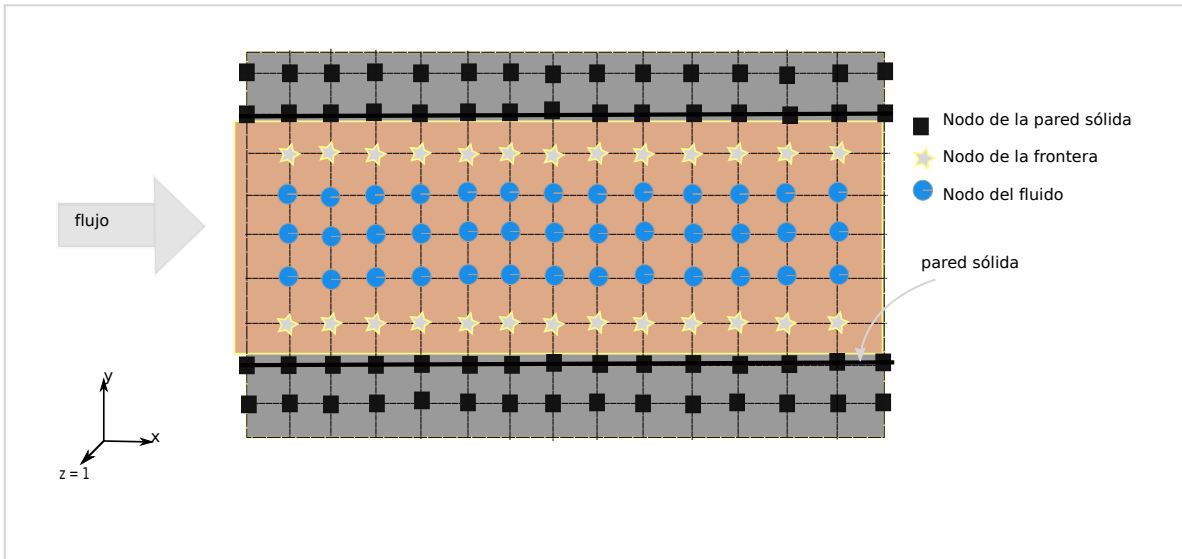


Figura 3.2: Se muestra un plano del dominio 3D. Aquí se presentan tres clases de nodos que se consideran cuando se habla de condiciones de frontera. En un nodo que se encuentra en la pared sólida no es posible resolver la ecuación de Lattice-Boltzmann, mientras que, en un nodo que pertenece al fluido es posible resolver dicha ecuación. Por otra parte, un nodo en la frontera es aquel que sirve como conexión entre los nodos que pertenecen al fluido y los que se encuentran en el objeto sólido y se rigen por reglas especiales [5]

de Navier-Stokes se requiere imponer las condiciones de frontera sobre las variables macroscópicas tales como la densidad y la velocidad, sin embargo, al resolver la ecuación de Lattice-Boltzmann las condiciones de frontera se imponen sobre las funciones de distribución f_i definidas en \vec{x}_b donde las condiciones de frontera macroscópicas surgen implícitamente. Existen diferentes tipos de condiciones de frontera:

- Condiciones de frontera periódicas.
- Condiciones de frontera de rebote (*bounce back* o *non-slip* por sus siglas en inglés).
- Condiciones de frontera abiertas (*inflow/outflow*).

3.4.1. Condiciones de frontera periódicas

Las condiciones de frontera periódicas surgen a partir de que se busca aislar un patrón de flujo repetitivo dentro de un sistema de flujo que tiene simetrías.

En la escala mesoscópica, que es donde es válida la ecuación de Lattice-Boltzmann, las condiciones periódicas se aplican a las funciones de distribución que se encuentran en los nodos situados en las fronteras del dominio. La información que entra por una frontera del dominio se determina por la información que esta saliendo del dominio en el lado opuesto:

$$f_i(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x} + \vec{L}, t),$$

para problemas donde se estudian fluidos en dos y tres dimensiones las condiciones de frontera periódicas son:

- Condiciones de frontera 2D:

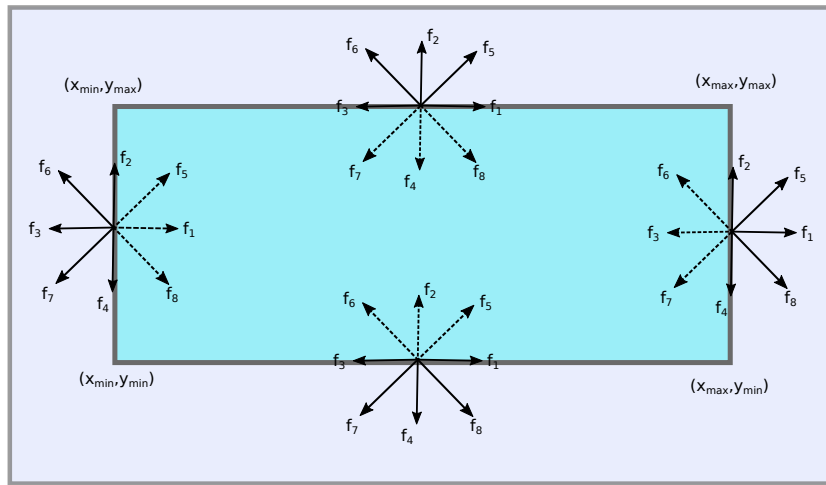


Figura 3.3: Se muestran las funciones de distribución en las fronteras del dominio.

- En el eje x:

$$\begin{aligned} f_1(x_{min}, y, t) &= f_1(x_{max}, y, t), \\ f_5(x_{min}, y, t) &= f_5(x_{max}, y, t), \\ f_8(x_{min}, y, t) &= f_8(x_{max}, y, t), \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned} f_3(x_{max}, y, t) &= f_3(x_{min}, y, t), \\ f_6(x_{max}, y, t) &= f_6(x_{min}, y, t), \\ f_7(x_{max}, y, t) &= f_7(x_{min}, y, t), \end{aligned} \quad (3.48)$$

- En el eje y:

$$\begin{aligned} f_2(x, y_{min}, t) &= f_2(x, y_{max}, t), \\ f_5(x, y_{min}, t) &= f_5(x, y_{max}, t), \\ f_6(x, y_{min}, t) &= f_6(x, y_{max}, t), \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned}
f_4(x, y_{max}, t) &= f_4(x, y_{min}, t), \\
f_7(x, y_{max}, t) &= f_7(x, y_{min}, t), \\
f_8(x, y_{max}, t) &= f_8(x, y_{min}, t),
\end{aligned} \tag{3.50}$$

- Condiciones de frontera en 3D usando el modelo D3Q19:

- Componentes en el plano $y - z$:

$$\begin{aligned}
f_1(x_{min}, y, z, t) &= f_1(x_{max}, y, z, t), \\
f_7(x_{min}, y, z, t) &= f_7(x_{max}, y, z, t), \\
f_9(x_{min}, y, z, t) &= f_9(x_{max}, y, z, t), \\
f_{13}(x_{min}, y, z, t) &= f_{13}(x_{max}, y, z, t), \\
f_{15}(x_{min}, y, z, t) &= f_{15}(x_{max}, y, z, t),
\end{aligned} \tag{3.51}$$

$$\begin{aligned}
f_2(x_{max}, y, z, t) &= f_2(x_{min}, y, z, t), \\
f_8(x_{max}, y, z, t) &= f_8(x_{min}, y, z, t), \\
f_{10}(x_{max}, y, z, t) &= f_{10}(x_{min}, y, z, t), \\
f_{14}(x_{max}, y, z, t) &= f_{14}(x_{min}, y, z, t), \\
f_{16}(x_{max}, y, z, t) &= f_{16}(x_{min}, y, z, t),
\end{aligned} \tag{3.52}$$

- Componentes en el plano $x - z$:

$$\begin{aligned}
f_3(x, y_{min}, z, t) &= f_3(x, y_{max}, z, t), \\
f_7(x, y_{min}, z, t) &= f_7(x, y_{max}, z, t), \\
f_{11}(x, y_{min}, z, t) &= f_{11}(x, y_{max}, z, t), \\
f_{14}(x, y_{min}, z, t) &= f_{14}(x, y_{max}, z, t), \\
f_{17}(x, y_{min}, z, t) &= f_{17}(x, y_{max}, z, t),
\end{aligned} \tag{3.53}$$

$$\begin{aligned}
f_4(x, y_{max}, z, t) &= f_4(x, y_{min}, z, t), \\
f_8(x, y_{max}, z, t) &= f_8(x, y_{min}, z, t), \\
f_{12}(x, y_{max}, z, t) &= f_{12}(x, y_{min}, z, t), \\
f_{13}(x, y_{max}, z, t) &= f_{13}(x, y_{min}, z, t), \\
f_{18}(x, y_{max}, z, t) &= f_{18}(x, y_{min}, z, t),
\end{aligned} \tag{3.54}$$

- Componentes en el plano $x - y$

$$\begin{aligned}
f_5(x, y, z_{min}, t) &= f_5(x, y, z_{max}, t), \\
f_9(x, y, z_{min}, t) &= f_9(x, y, z_{max}, t), \\
f_{11}(x, y, z_{min}, t) &= f_{11}(x, y, z_{max}, t), \\
f_{16}(x, y, z_{min}, t) &= f_{16}(x, y, z_{max}, t), \\
f_{18}(x, y, z_{min}, t) &= f_{18}(x, y, z_{max}, t),
\end{aligned}
\tag{3.55}$$

$$\begin{aligned}
f_6(x, y, z_{max}, t) &= f_6(x, y, z_{min}, t), \\
f_{10}(x, y, z_{max}, t) &= f_{10}(x, y, z_{min}, t), \\
f_{12}(x, y, z_{max}, t) &= f_{12}(x, y, z_{min}, t), \\
f_{15}(x, y, z_{max}, t) &= f_{15}(x, y, z_{min}, t), \\
f_{17}(x, y, z_{max}, t) &= f_{17}(x, y, z_{min}, t).
\end{aligned}
\tag{3.56}$$

3.4.2. Condiciones de frontera de rebote

Al estudiar los flujos de algunos fluidos es común realizar simulaciones donde el fluido esta rodeado por un paredes paredes sólidas o al fluido rodeando algún obstáculo, es ahí donde se requiere estudiar como se comportan las partículas cuando interactúan con dichas paredes u obstáculos, para lo cual se emplean condiciones de frontera de rebote.

La esencia de estas condiciones de frontera consiste en suponer que las partículas que viajan a un velocidad determinada pueden chocar con las paredes sólidas mientras se propagan por el dominio espacial, al chocar dichas partículas serán reflejadas con la misma velocidad de la cual originalmente venían pero en sentido opuesto, esta idea es presentada en la Figura 3.4. En la Fig. 3.4 se considera que la velocidad de la partícula tiene componentes tangencial y transversal, sin embargo al considerar que las partículas son reflejadas en dirección opuesta, se tiene que el fluido no se desliza sobre la pared, es decir, no hay movimiento transversal relativo entre la pared y el fluido. Por otra parte, al considerar que las partículas se reflejan al golpear la pared sólida inmediatamente se tiene que no puede haber flujo a través de las fronteras y por lo tanto se dice que la pared es impermeable.

Existen distintas estrategias para implementar estas condiciones, en este trabajo se emplea la que es conocida como *halfway bounce-back* donde se considera que las partículas viajan la mitad de la distancia que une un nodo de fluido y un nodo del objeto sólido antes de que la inversión de la velocidad de partícula ocurra durante el proceso de propagación. Una observación importante es que la frontera no se considera sobre los nodos sólidos de la malla sino que se define en justo a la mitad de la distancia que une los nodos en la frontera del dominio y los nodos que se encuentran a la mitad del objeto sólido. Sin embargo, la implementación de las fronteras siguiendo esta estrategia se logra sin recurrir a nodos dentro de la frontera definida como sólida.

Las distribuciones de partículas que salen del nodo \vec{x}_b al tiempo t llegan a la pared (frontera) al tiempo $t + \Delta t/2$ donde son reflejadas de vuelta con una velocidad $c_i = -c_i$,

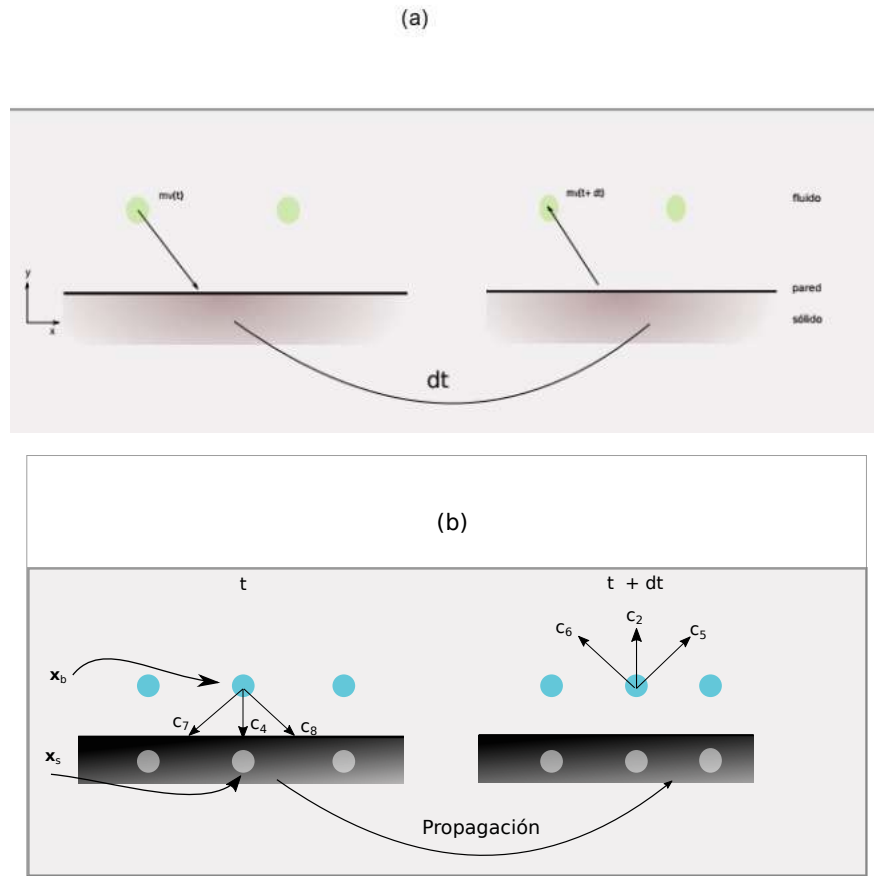


Figura 3.4: (a) Se ilustra de manera general una partícula de masa m que se mueve con una velocidad $v(t)$. La partícula choca con una pared rígida durante su propagación; después de que choca la partícula ahora tiene velocidad $v(t + \Delta t) = -v(t)$. Este proceso ocurre en un paso de tiempo Δt . (b) La evolución en el tiempo del proceso que se lleva a cabo al usar la condición de rebote en la pared inferior del dominio es presentada. Las flechas representan las direcciones de la distribución $f_i^*(\vec{x}_b, t)$.

llegando al mismo nodo \vec{x}_b de donde originalmente había salido al tiempo $t + \Delta t$, para ilustrar lo que se ha dicho se muestra la Fig. 3.4. Así, se tiene la siguiente relación:

$$f_i(\vec{x}_b, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x}_b, t), \quad (3.57)$$

donde f_i^* es la distribución de las partículas después del paso de propagación. Las condiciones de frontera de rebote para problemas en dos y tres dimensiones se presentan en la siguiente tabla:

- Caso 2D usando el modelo D2Q9:

- A los largo del eje x :

$$\begin{aligned}
f_2(x, y_{min}, t + \Delta t) &= f_4^*(x, y_{min}, t), \\
f_5(x, y_{min}, t + \Delta t) &= f_7^*(x, y_{min}, t), \\
f_6(x, y_{min}, t + \Delta t) &= f_8^*(x, y_{min}, t),
\end{aligned}
\tag{3.58}$$

$$\begin{aligned}
f_4(x, y_{max}, t + \Delta t) &= f_2^*(x, y_{max}, t), \\
f_7(x, y_{max}, t + \Delta t) &= f_5^*(x, y_{max}, t), \\
f_8(x, y_{max}, t + \Delta t) &= f_6^*(x, y_{max}, t),
\end{aligned}
\tag{3.59}$$

- A lo largo del eje y

$$\begin{aligned}
f_1(x_{min}, y, t + \Delta t) &= f_3^*(x_{min}, y, t), \\
f_5(x_{min}, y, t + \Delta t) &= f_7^*(x_{min}, y, t), \\
f_8(x_{min}, y, t + \Delta t) &= f_6^*(x_{min}, y, t),
\end{aligned}
\tag{3.60}$$

$$\begin{aligned}
f_3(x, y_{max}, t + \Delta t) &= f_1^*(x_{max}, y, t), \\
f_6(x_{max}, y, t + \Delta t) &= f_8^*(x_{max}, y, t), \\
f_7(x_{max}, y, t + \Delta t) &= f_5^*(x_{max}, y, t),
\end{aligned}
\tag{3.61}$$

- Caso 3D usando el modelo D3Q19:

- En el plano $x - y$:

$$\begin{aligned}
f_5(x, y, z_{min}, t + \Delta t) &= f_6^*(x, y, z_{min}, t), \\
f_9(x, y, z_{min}, t + \Delta t) &= f_{10}^*(x, y, z_{min}, t), \\
f_{11}(x, y, z_{min}, t + \Delta t) &= f_{12}^*(x, y, z_{min}, t), \\
f_{16}(x, y, z_{min}, t + \Delta t) &= f_{15}^*(x, y, z_{min}, t), \\
f_{18}(x, y, z_{min}, t + \Delta t) &= f_{17}^*(x, y, z_{min}, t),
\end{aligned}
\tag{3.62}$$

$$\begin{aligned}
f_6(x, y, z_{max}, t + \Delta t) &= f_5^*(x, y, z_{max}, t), \\
f_{10}(x, y, z_{max}, t + \Delta t) &= f_9^*(x, y, z_{max}, t), \\
f_{12}(x, y, z_{max}, t + \Delta t) &= f_{11}^*(x, y, z_{max}, t), \\
f_{15}(x, y, z_{max}, t + \Delta t) &= f_{16}^*(x, y, z_{max}, t), \\
f_{17}(x, y, z_{max}, t + \Delta t) &= f_{18}^*(x, y, z_{max}, t),
\end{aligned}
\tag{3.63}$$

- En el plano $x - z$:

$$\begin{aligned}
f_3(x, y_{min}, z, t + \Delta t) &= f_4^*(x, y_{min}, z, t), \\
f_7(x, y_{min}, z, t + \Delta t) &= f_8^*(x, y_{min}, z, t), \\
f_{11}(x, y_{min}, z, t + \Delta t) &= f_{12}^*(x, y_{min}, z, t), \\
f_{14}(x, y_{min}, z, t + \Delta t) &= f_{13}^*(x, y_{min}, z, t), \\
f_{17}(x, y_{min}, z, t + \Delta t) &= f_{18}^*(x, y_{min}, z, t),
\end{aligned} \tag{3.64}$$

$$\begin{aligned}
f_4(x, y_{max}, z, t + \Delta t) &= f_3^*(x, y_{max}, z, t), \\
f_8(x, y_{max}, z, t + \Delta t) &= f_7^*(x, y_{max}, z, t), \\
f_{12}(x, y_{max}, z, t + \Delta t) &= f_{11}^*(x, y_{max}, z, t), \\
f_{13}(x, y_{max}, z, t + \Delta t) &= f_{14}^*(x, y_{max}, z, t), \\
f_{18}(x, y_{max}, z, t + \Delta t) &= f_{17}^*(x, y_{max}, z, t),
\end{aligned} \tag{3.65}$$

- En el plano $y - z$:

$$\begin{aligned}
f_1(x_{min}, y, z, t + \Delta t) &= f_2^*(x_{min}, y, z, t), \\
f_7(x_{min}, y, z, t + \Delta t) &= f_8^*(x_{min}, y, z, t), \\
f_9(x_{min}, y, z, t + \Delta t) &= f_{10}^*(x_{min}, y, z, t), \\
f_{13}(x_{min}, y, z, t + \Delta t) &= f_{14}^*(x_{min}, y, z, t), \\
f_{15}(x_{min}, y, z, t + \Delta t) &= f_{16}^*(x_{min}, y, z, t),
\end{aligned} \tag{3.66}$$

$$\begin{aligned}
f_2(x_{max}, y, z, t + \Delta t) &= f_1^*(x_{max}, y, z, t), \\
f_8(x_{max}, y, z, t + \Delta t) &= f_7^*(x_{max}, y, z, t), \\
f_{10}(x_{max}, y, z, t + \Delta t) &= f_9^*(x_{max}, y, z, t), \\
f_{14}(x_{max}, y, z, t + \Delta t) &= f_{13}^*(x_{max}, y, z, t), \\
f_{16}(x_{max}, y, z, t + \Delta t) &= f_{15}^*(x_{max}, y, z, t),
\end{aligned} \tag{3.67}$$

3.4.3. Condiciones de frontera abiertas

Las fronteras abiertas consisten de paredes de entrada y salida de flujo donde se imponen perfiles de velocidad o presión. Durante el estudio de la dinámica de fluidos surgen muchos problemas que requieren esta clase de fronteras. De acuerdo al problema que se desea estudiar se impone un perfil de presión ó un perfil de velocidad.

Usando el modelo de D2Q9 se revisará a detalle la condición de frontera para la **frontera inferior** ($y = y_{min}$). Como se vio en el Capítulo 2 se debe de cumplir la conservación de la masa y la conservación del momento:

$$\rho_s = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8, \tag{3.68}$$

$$\rho_s u_s = f_1 + f_5 + f_8 - f_3 - f_6 - f_7, \quad (3.69)$$

$$\rho_s v_s = f_2 + f_5 + f_6 - f_4 - f_8 - f_7, \quad (3.70)$$

donde $u_s = u_x(x, y_{min})$ y $v_s = u_y(x, y_{min})$; suponiendo que se conocen las velocidades u_s y v_s y de acuerdo a la Fig. 3.3 las incógnitas son ρ_s , f_2 , f_5 y f_6 . La condición de equilibrio normal a la frontera sigue siendo válida, es decir:

$$f_2 - f_2^{(eq)} = f_4 - f_4^{(eq)}, \quad (3.71)$$

donde:

$$\begin{aligned} f_2^{(eq)} &= w_2 \rho_s \left[1 + 3v_s + \frac{9}{2}v_s^2 - \frac{3}{2}(u_s^2 + v_s^2) \right], \\ f_4^{(eq)} &= w_4 \rho_s \left[1 - 3v_s + \frac{9}{2}v_s^2 - \frac{3}{2}u_s^2 + v_s^2 \right], \end{aligned} \quad (3.72)$$

sustituyendo estas expresiones en (3.71) y haciendo un poco de álgebra se obtiene la primera de las incógnitas:

$$f_2 = f_4 + \frac{2}{3}\rho_s v_s. \quad (3.73)$$

Por otra parte, sustituyendo (3.68) en la Ec. (3.70) se tiene el valor de la densidad en la frontera:

$$\rho_s = \frac{1}{1 - v_s} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_4 + f_7 * f_8)], \quad (3.74)$$

Finalmente, para las dos incógnitas restantes se toman las Ecs. (3.69) y (3.70) y realizando el álgebra necesaria se tienen las siguientes ecuaciones:

$$f_5 = f_7 - \frac{1}{2}(f_1 - f_3) + \frac{1}{6}\rho_s v_s + \frac{1}{2}\rho_s u_s, \quad (3.75)$$

$$f_6 = f_8 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) + \frac{1}{6}\rho_s v_s - \frac{1}{2}\rho_s u_s. \quad (3.76)$$

El procedimiento para determinar las funciones de distribución en las fronteras restantes es análogo, por ello sólo se mostrarán los resultados que corresponden a cada una de ellas.

Frontera superior ($y = y_{max}$):

$$\rho_n = \frac{1}{1 + v_n} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 * f_6)], \quad (3.77)$$

las funciones de distribución desconocidas en esta frontera están determinadas por las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} f_4 &= f_2 - \frac{2}{3}\rho_n v_n, \\ f_7 &= f_5 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{6}\rho_n v_n - \frac{1}{2}\rho_n u_n, \\ f_8 &= f_6 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{6}\rho_n v_n + \frac{1}{2}\rho_n u_n, \end{aligned} \quad (3.78)$$

Frontera Oeste ($x = x_{min}$):

$$\rho_o = \frac{1}{1 - u_o} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 * f_6)], \quad (3.79)$$

las funciones de distribución desconocidas en esta frontera están determinadas por las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} f_1 &= f_3 + \frac{2}{3}\rho_o u_o, \\ f_5 &= f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_o u_o + \frac{1}{2}\rho_o v_o, \\ f_8 &= f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_o u_o - \frac{1}{2}\rho_o v_o, \end{aligned} \quad (3.80)$$

Frontera Este ($x = x_{max}$):

$$\rho_e = \frac{1}{1 + u_e} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 * f_6)], \quad (3.81)$$

las funciones de distribución son:

$$\begin{aligned} f_3 &= f_1 - \frac{2}{3}\rho_e u_e, \\ f_7 &= f_5 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{1}{6}\rho_e u_e - \frac{1}{2}\rho_e v_e, \\ f_6 &= f_8 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{1}{6}\rho_e u_e + \frac{1}{2}\rho_e v_e, \end{aligned} \quad (3.82)$$

En este trabajo únicamente se utilizaron estas condiciones para el caso 2D, sin embargo el procedimiento para determinar estas condiciones en 3D es análogo.

3.5. Implementación del Método de Lattice-Boltzmann

Ahora que ya se conocen a detalle los elementos necesarios para la implementación del método, en resumen se tiene lo siguiente:

- Conservación de masa y momento:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{x}, t) &= \sum_k f_k(\vec{x}, t), \\ \rho\vec{u}(\vec{x}, t) &= \sum_k \vec{c}_k f_k(\vec{x}, t). \end{aligned}$$

- Discretización del tiempo, el espacio físico y el espacio de velocidades para obtener la ecuación de Lattice-Boltzmann:

$$f_k = (\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(\vec{x}, t) + \Omega_k(\vec{x}, t),$$

donde Ω_k es el operador de colisión BGK.

- Durante cada paso de tiempo la ecuación anterior se descompone en dos partes:

1. El paso de colisión:

$$f_k^*(\vec{x}, t) = f_k(\vec{x}, t) - \underbrace{\frac{\Delta t}{\tau} (f_k(\vec{x}, t) - f_k^{(eq)}(\vec{x}, t))}_{\Omega_k(\vec{x}, t)}. \quad (3.83)$$

2. El paso de propagación:

$$f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k^*(\vec{x}, t). \quad (3.84)$$

- Pasar las variables involucradas a unidades de código.
- Condiciones de frontera.

El primer paso para la implementación del método es la inicialización de las funciones de distribución. Al inicio de la simulación se fijan las funciones de distribución a $f_k^{(eq)}(\vec{x}, t = 0) = f_k^{(eq)}(\rho(\vec{x}, t = 0), \vec{u}(\vec{x}, t = 0))$; además se da una densidad inicial $\rho(\vec{x}, t = 0) = \rho_{in}$ y un perfil de velocidad $\vec{u}(\vec{x}, t = 0) = \vec{u}_{in}$.

El algoritmo en un paso de tiempo es el siguiente:

1. Se calculan las variables macroscópicas $\rho(\vec{x}, t)$ y $\vec{u}(\vec{x}, t)$.
2. Se obtienen las funciones de distribución en el equilibrio $f_k^{(eq)}$.
3. Se implementa el paso de colisión, Ec. (3.83).
4. Se implementa el paso de propagación, Ec. (3.84).
5. Se aplican condiciones de frontera.
6. Se incrementa el paso de tiempo, $t \rightarrow t + \Delta t$ y se repite de nuevo desde el paso 1 hasta que se alcanza el último paso de tiempo.

Una visualización del algoritmo se muestra en la Figura 3.5.

En la siguiente sección se presentan algunas pruebas básicas, con el fin de verificar la validez del código implementado.

3.6. Pruebas básicas

3.6.1. Flujo de Couette 2D

El problema de flujo de Couette consiste en un fluido que se encuentra entre dos placas paralelas como se muestra en la Figura 3.6. La placa inferior se encuentra fija de tal manera que $\vec{u} = \vec{0}$, mientras que, la placa superior se mueve con velocidad $\vec{u} = u\hat{x}$. Además no hay ninguna fuerza externa afectando el sistema.

El fluido obedece las ecuaciones de Navier-Stokes:

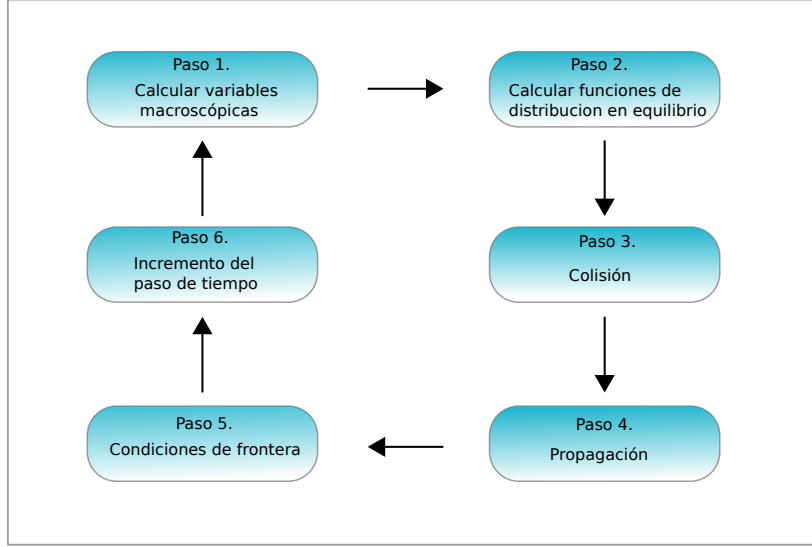


Figura 3.5: Se presenta una perspectiva general de un ciclo del algoritmo implementado. Es un ciclo cerrado que se detiene cuando se llega al último paso de tiempo.

- Para la dirección x

$$\rho \underbrace{\frac{\partial \psi_x}{\partial t}}_{u_x=cte} + \rho \underbrace{\left(u_x \frac{\partial \psi_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial \psi_x}{\partial y} \right)}_{u_x=cte} = \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x}}_{p=cte} + \eta \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial y^2} \right)}_{u_x=cte}. \quad (3.85)$$

- Para la dirección y

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \psi_y}{\partial t} + \rho \left(u_x \frac{\partial \psi_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial \psi_y}{\partial y} \right)}_{u_y=0} = \frac{\partial p}{\partial y} + \eta \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \psi_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} \right)}_{u_y=0}. \quad (3.86)$$

De la Ec. (3.25) se tiene que:

$$\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = 0 \rightarrow u_x(y) = C_1 y + C_2 \quad (3.87)$$

Usando las condiciones de frontera $u_x(0) = 0$ y $u_x(d) = u$, se tiene que $C_2 = 0$ y $C_1 = u/d$. Por lo tanto, la solución analítica del flujo de Couette es de la siguiente forma:

$$u_x(y) = \frac{u}{d} y, \quad (3.88)$$

que es la ecuación de una recta con pendiente $m = u/d$.

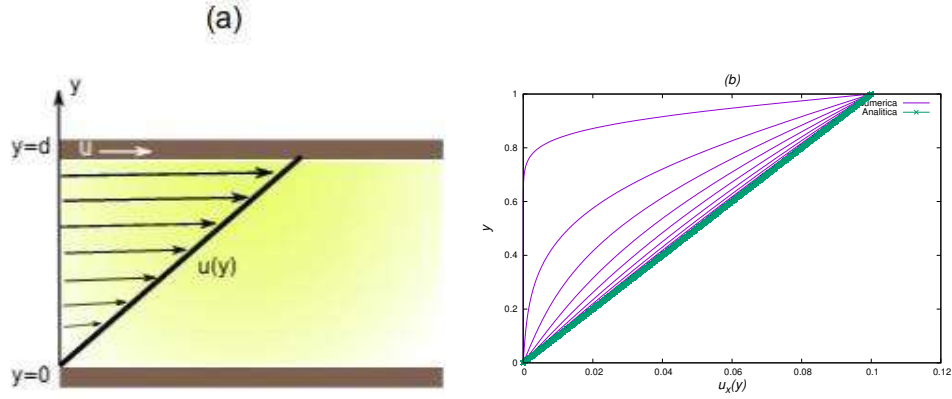


Figura 3.6: (a) Representa un esquema del sistema que describe el flujo de Couette en dos dimensiones, no hay ninguna fuerza actuando sobre el sistema. La placa superior situada en $y = d$ se mueve hacia la derecha con una velocidad $\vec{u} = (u, 0)$. (b) Muestra la solución numérica. Conforme evoluciona en el tiempo se aprecia que la solución numérica se aproxima a la solución analítica.

3.6.2. Flujo de Poiseuille 2D

Consiste en poner un fluido que se mueve en la dirección x entre dos placas paralelas separadas una distancia d como se muestra en el inciso (b) de la Fig. 3.7. El flujo se considera estacionario e incompresible. En esta prueba, el flujo de Poiseuille se consigue poniendo un gradiente de presión constante $\nabla p = (dp/dx, 0)$.

Las ecuaciones de Navier-Stokes son de la siguiente forma:

- Para la dirección x

$$\rho \frac{\partial u_x}{\partial t} + \rho \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right). \quad (3.89)$$

- Para la dirección y

$$\rho \frac{\partial u_y}{\partial t} + \rho \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = \frac{\partial p}{\partial y} + \eta \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right). \quad (3.90)$$

Por lo que el sistema que se debe resolver se reduce a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = \frac{1}{\eta} \frac{dp}{dx}, \quad (3.91)$$

Resolviendo la ecuación diferencial el perfil de la velocidad, u_x , que se obtiene es el siguiente:

$$u_x = \frac{1}{2\eta} \frac{dp}{dx} y^2 + C_1 y + C_2, \quad (3.92)$$

donde C_1 y C_2 son constantes a determinar. Usando las condiciones de frontera $u_x(0) = 0$ y $u_x(y = d) = 0$, se tiene que $C_1 = -\frac{1}{2\eta} \frac{dp}{dx} d$ y $C_2 = 0$; sustituyendo en la Ec. (3.92) se determina el perfil de velocidad correspondiente al flujo de Poiseuille:

$$u_x(y) = \frac{1}{2\eta} \frac{dp}{dx} y(y - d) \quad (3.93)$$

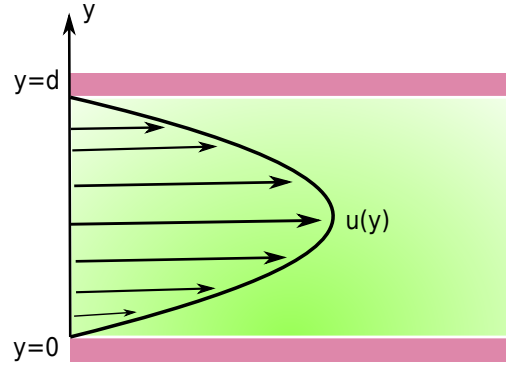


Figura 3.7: Muestra un esquema de la solución analítica del flujo de Poiseuille.

3.6.3. Flujo de Taylor-Green

Se eligió esta prueba debido a que, al igual que el Flujo de Couette y Poiseuille, tiene solución analítica conocida. El flujo de Taylor-Green es inestable y completamente periódico en un dominio de tamaño $Nx \times Ny$. El perfil de velocidad para el problema en 2D es de la forma:

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = u_0 \begin{pmatrix} \sqrt{k_y/k_x} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \\ \sqrt{k_x/k_y} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \end{pmatrix} e^{-t/t_d}, \quad (3.94)$$

donde $t_d = 1/\nu(k_x^2 + k_y^2)$ y $k_{xy} = 2\pi/N_{xy}$ son las componentes del vector de onda \vec{k} . Además se encuentra que la presión está dada por la siguiente expresión:

$$p(\vec{x}, t) = p_0 - \rho \frac{u_0^2}{4} \left[\frac{k_y}{k_x} \cos(2k_x x) + \frac{k_x}{k_y} \sin(2k_y y) \right] e^{-2t/t_d}. \quad (3.95)$$

La prueba se hizo en un dominio $[0, 1] \times [0, 1]$ con un número de Reynolds $Re = 10$, las condiciones iniciales se definen como $\vec{u}(\vec{x}, 0)$ y $p(\vec{x}, 0)$, donde $u_0 = 0.1$ y $p_0 = 0$.

La Figura 3.8 muestra la estructura de un flujo de Taylor-Green con $k_x = k_y = 2\pi$ que corresponde con el resultado presentado en [5]. Por otra parte, en la Ec. (3.95) se tiene que el perfil de velocidad decae exponencialmente con el tiempo manteniendo la misma estructura, lo anterior se ve en la figura.

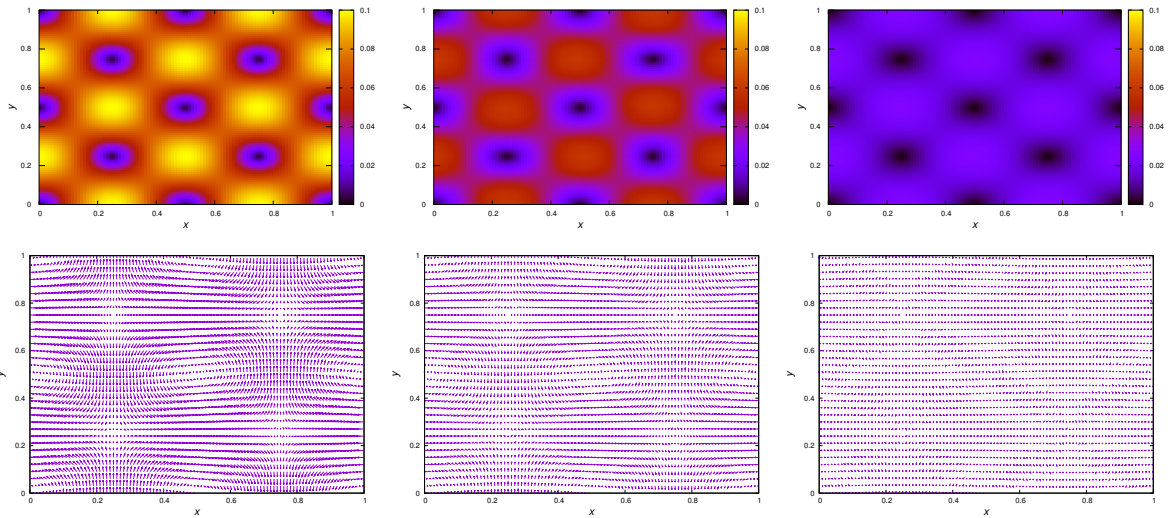


Figura 3.8: Estructura del flujo de Green-Taylor con $k_x = k_y = 2\pi$ en un dominio $[0, 1] \times [0, 1]$. Durante la evolución, la magnitud del campo vectorial disminuye pero se mantiene la misma estructura.

3.6.4. Cavity con una tapa deslizándose

El problema de la cavidad con tapa deslizándose se encuentra en un régimen de flujo complejo debido a los vórtices que se forman en las esquinas inferiores del dominio donde esta definida la cavidad. Este problema consiste en una cavidad cuadrada donde hay un flujo que no es estacionario. Para realizar la simulación se define un dominio de $[0, 1] \times [0, 1]$ el cual se llena con un fluido de densidad $\rho = 5$. Se imponen condiciones de frontera de rebote en las tapas laterales y en la tapa inferior, mientras que en la tapa superior se fija con una velocidad constante de $\vec{u} = (0.1, 0)$, condiciones de frontera abiertas. La simulación fue hecha para un número de Reynolds $Re = 10$. El campo de velocidades así como la norma de la velocidad, $|\vec{u}|$, se muestra en la Figura 3.9; se aprecia que los resultados obtenidos son consistentes con los presentados en [15]. Por otra parte, de acuerdo con [16], se aprecian los vórtices en las esquinas inferiores del dominio, tal como lo muestra la Fig. 3.10.

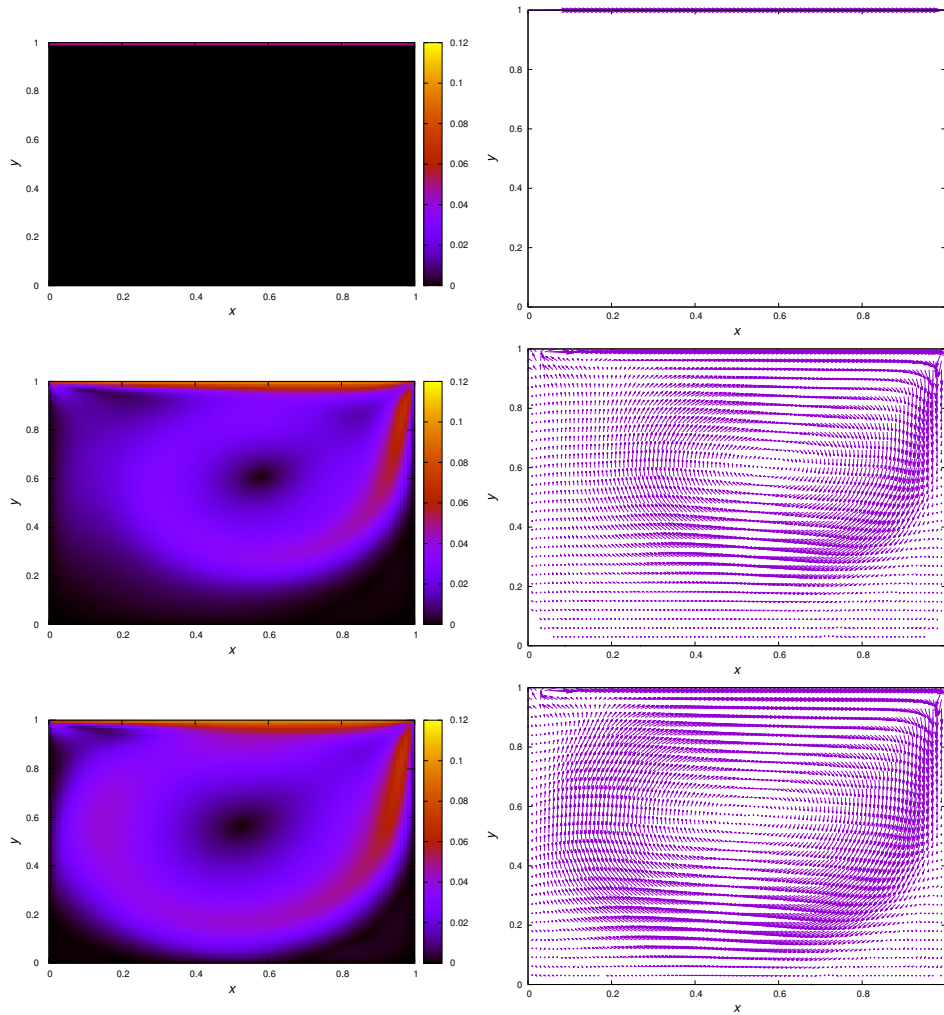


Figura 3.9: En la columna de la izquierda se muestra la norma de la velocidad, $|\vec{u}|$, mientras que del lado derecho se muestra su correspondiente campo de velocidades a distintos instantes de tiempo. En la primera línea se muestra la configuración inicial del sistema. Durante la evolución se aprecia la formación de vórtices.

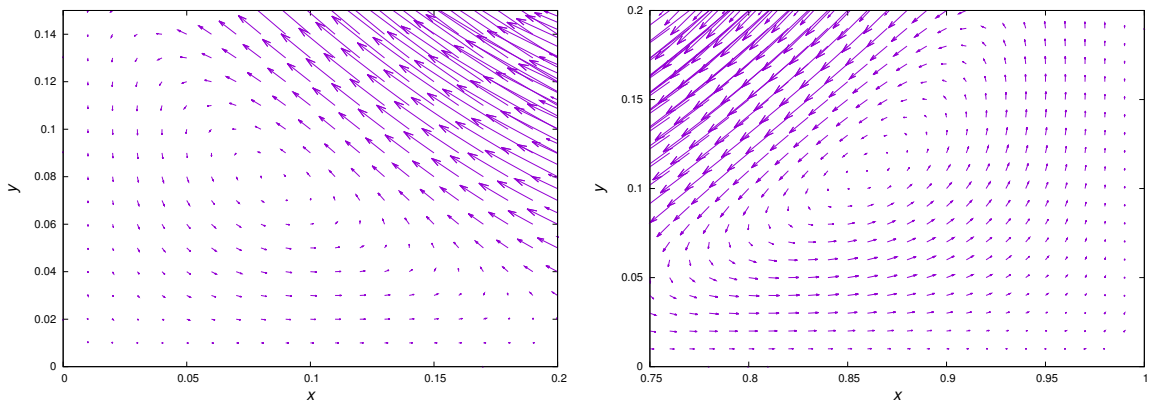


Figura 3.10: Muestra un acercamiento a cada una de las esquinas inferiores del dominio, donde se puede apreciar la existencia de vórtices. El acercamiento corresponde al último campo de velocidades presentado en la Fig. 3.9.

Capítulo 4

Modelo de Shan-Chen

Un fluido *multi-fase* de una componente es aquel que esta formado por una sola sustancia en donde las fases líquida y gaseosa se encuentran coexistiendo y además pueden transformarse una en la otra. Por otra parte, un fluido *multi-componente* es aquel que esta formado por dos o más sustancias diferentes que no pueden transformarse en las otras, en su lugar se estudia la forma en que se mezclan las componentes.

Al estudiar fluidos multi-fase y multi-componente es importante distinguir cada una de las fases o componentes del sistema por lo que se introduce un elemento conocido como *parámetro de orden*. Para fluidos multi-fase el parámetro de orden es la densidad.

Cuando se estudian fluidos multi-fase a través de simulaciones numéricas generalmente surgen dificultades, por ejemplo el estudio de una mezcla de agua y vapor, o de agua y aceite no es una tarea trivial, ya que no poseen las mismas propiedades físicas. Existen diversos métodos numéricos macroscópicos que se han desarrollado para el estudio de la dinámica de fluidos multi-fase y multi-componentes, sin embargo, en los últimos años, el Método de Lattice- Boltzmann ha ido cobrando más popularidad debido que es robusto numéricamente y a la eficiencia técnica para simular fluidos multi-fase y multi-componentes. A diferencia de los métodos convencionales para flujos multi-fase, la forma de las interfaces se mantiene automáticamente con *LBM*, además de que no se requiere tratar la interfaz de manera explícita. En este trabajo se estudiarán los fluidos multi-fase.

Se han desarrollado distintos modelos de *LBM* para tratar flujos multi-fase, entre los más usados están:

- Gradiente de color, Gunstensen (1991).
- Pseudopotencial, Shan y Chen (1994).
- Energía libre, Swift (1995).
- He-Chen-Zhang, He (1999).

Sin embargo, el modelo propuesto por Shan y Chen es capaz de simular flujos que tienen transiciones de fase termodinámicas y no genera propiedades inter-faciales no físicas [8] [14]. El modelo de Shan-Chen es el objeto de estudio de este capítulo, en el cual se estudiará su fundamento físico y se realizarán pruebas que ayuden a validar el modelo.

4.1. Fundamentos del modelo Shan-Chen

La base del modelo Shan-Chen (*SC*) es la incorporación de una fuerza de atracción o repulsión entre el fluido en el nodo computacional y el fluido en sus vecinos más cercanos. Al incorporar el término de fuerza en la correspondiente Ecuación de Lattice-Boltzmann, la ecuación de estado del gas ideal que caracteriza a fluidos de una sola fase es reemplazada por un ecuación de estado que no es ideal ni monoatómica. Además la tensión superficial aparece de forma natural en el modelo.

4.1.1. Incorporación del término de fuerza

Para modelar las interacciones que existen entre distintas fases y simular la dinámica del sistema es necesario incluir un término adicional a la Ec. (3.37) de la siguiente manera:

$$f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(\vec{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_k(\vec{x}, t) - f_k^{eq}(\vec{x}, t)) + F_k^{SC}(\vec{x}, t), \quad (4.1)$$

donde $F_k^{SC} = \vec{F}^* \vec{c}_k \Delta t$ representa la interacción mesoscópica entre las dos fases y además la fuerza neta experimentada por un elemento de volumen en cada sitio de la malla, \vec{x} , es la suma de los intercambios de momento entre un elemento de volumen de una fase con elementos de volumen que formen parte de otra fase en el vecindario $\vec{x}' = \vec{x} + \vec{c}_k$:

$$V(\vec{x}) = \sum_k V(\vec{x}, \vec{x} + \vec{c}_k), \quad (4.2)$$

con $V(\vec{x}, \vec{x} + \vec{c}_k)$ expresado de la siguiente manera:

$$V(\vec{x}, \vec{x}') = \Psi(\vec{x}) G(\vec{x}, \vec{x}') \Psi(\vec{x}'), \quad (4.3)$$

donde $\vec{x} \neq \vec{x}'$, $\Psi(\vec{x}) = \Psi[\rho(\vec{x})]$ es una especie de energía libre efectiva del sistema [14], llamada *Pseudopotencial*, y $G(\vec{x}, \vec{x}')$ es la función de Green, que guarda información acerca de la dependencia espacial de la fuerza. Existen diferentes formas de discretizar $G(\vec{x}, \vec{x}')$, sin embargo la más común es aquella que involucra interacciones entre sitios de la malla que están conectados por uno de los vectores $\vec{c}_k \Delta t$ [5]:

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = \begin{cases} w_k G & \text{si } \vec{x}' = \vec{x} + \vec{c}_k, \\ 0 & \text{otro caso,} \end{cases} \quad (4.4)$$

El parámetro G representa la magnitud de la interacción y juega el papel de la temperatura efectiva del sistema, pues controla automáticamente la identificación de la densidad de cada fase [14].

Así, la fuerza asociada a este pseudo-potencial es:

$$F^{SC}(\vec{x}) = -G \Psi(\vec{x}) \sum_k w_k \Psi(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t) \vec{c}_k. \quad (4.5)$$

En Shan-Chen Ψ se define como:

$$\Psi(\rho) = \rho_0 [1 - e^{-\rho/\rho_0}], \quad (4.6)$$

donde ρ_0 es una densidad de referencia que en la simulaciones numéricas se define igual a la unidad. Ψ esta acotada entre 0 y ρ_0 para cualquier valor de la densidad ρ .

Por otra parte, esta fuerza agrega un término extra al tensor de la presión. Realizando una expansión en serie de Taylor de la Ec. (4.5) como se describe en [17] y usando las relaciones dadas en (3.24) se obtiene la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}
F_\alpha &= -G\Psi \sum_k w_k \Psi(\vec{x} + \vec{c}_{k\alpha} \Delta t) c_{k\alpha} \\
&= -G\Psi \left[\cancel{\Psi(\vec{x}) \sum_k w_k c_{k\alpha}} \overset{0}{+} \Delta t \partial_\beta \Psi(\vec{x}) \sum_k w_k c_{k\alpha} c_{k\beta} \right] \overset{\neq 0}{=} \\
&+ \frac{1}{2} \Delta t^2 \partial_\beta \partial_\gamma \Psi(\vec{x}) \sum_k w_k c_{k\alpha} c_{k\beta} c_{k\gamma} \overset{0}{+} \frac{1}{6} \Delta t^3 \partial_\beta \partial_\gamma \partial_\mu \Psi(\vec{x}) \sum_k w_k c_{k\alpha} c_{k\beta} c_{k\gamma} c_{k\mu} \overset{\neq 0}{=} \\
&+ O(\Delta t^4) \\
&= -G\Psi \left[c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \Delta t \partial_\beta \Psi + c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\mu} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma}) \frac{1}{6} \Delta t^3 \partial_\beta \partial_\gamma \partial_\mu \Psi \right] + O(\Delta t^4),
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Finalmente, se tiene que:

$$F_\alpha \approx -\frac{G}{2} \Delta t c_s^2 \partial_\alpha \Psi^2 - \frac{G}{2} \Delta t^3 c_s^4 \Psi (\partial_\alpha \nabla^2 \Psi), \tag{4.8}$$

donde α indica las coordenadas espaciales. La fuerza entre las partículas se traduce en un exceso de presión si lo comparamos con la presión correspondiente al gas ideal de la siguiente manera:

$$-\partial_\alpha p_{\alpha\beta} + \partial_\beta (c_s^2 \rho) = F_\beta, \tag{4.9}$$

resolviendo esta ecuación, se tiene que el tensor de presión total es de la siguiente forma:

$$p_{\alpha\beta} = \left[c_s^2 \rho + \frac{1}{2} G c_s^2 \Psi^2 + \frac{1}{2} G c_s^4 (\Psi \nabla^2 \Psi + \frac{1}{2} |\nabla \Psi|^2) \right] \delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} G c_s^4 \partial_\alpha \Psi \partial_\beta \Psi. \tag{4.10}$$

Si se hace la expansión de F_α hasta orden $O(\Delta t)$ y se sustituye en la Ec. (4.9) se tiene que:

$$p = c_s^2 \rho + \frac{G c_s^2}{2} \Psi^2, \tag{4.11}$$

que es la ecuación de estado utilizada para simular flujos multi-fase de una sola componente.

Velocidad y el término de fuerza

Incorporar el término de fuerza de forma correcta es crucial. Existen modelos, como los propuestos en [18] y [7], donde no se involucran los términos de fuerza de forma explícita. Sin embargo, el modelo SC sí involucra términos de fuerza de forma explícita. Existen distintas formas de incorporar estos términos en el modelo, en este trabajo se utiliza la forma propuesta en [8].

Según el diagrama de flujo mostrado en el Capítulo 3, después del paso de colisión se calcula el momento como:

$$\rho u_\alpha = \sum_k f_k c_{k\alpha}, \tag{4.12}$$

sin embargo, si se supone que hay una fuerza actuando en el sistema, ya sean fuerzas internas o externas, habrá una contribución adicional al momento dado por $\vec{F}\tau$. Así, después de un tiempo, $\Delta t = \tau$, el momento de las partículas del fluido buscará un nuevo estado de equilibrio, $\rho\vec{u}^{eq}$, dado por:

$$u_\alpha^{eq} = u_\alpha + \frac{F_\alpha\tau}{\rho}. \quad (4.13)$$

Sin embargo, la velocidad macroscópica del sistema \vec{u} esta dada por [19]:

$$u_\alpha^* = u_\alpha + \frac{F_\alpha\Delta t}{2\rho}. \quad (4.14)$$

4.1.2. Consistencia Termodinámica

Si se recuperan correctamente las ecuaciones de Navier-Stokes partiendo de la Ecuación de Lattice-Boltzmann que contiene el tensor de presión, el cual incluye una ecuación de estado para un gas no ideal que define su curva de coexistencia analíticamente se dice que el modelo presenta *consistencia termodinámica*. El tensor de presión relacionado con la energía libre, es de la forma:

$$p_{\alpha\beta} = \left[p - \kappa\rho\nabla^2\rho - \frac{1}{2}\kappa(\nabla\rho)^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \kappa\partial_\alpha\rho\partial_\beta\rho, \quad (4.15)$$

donde $p = \rho d\Psi/d\rho - \Psi$. Comparando las Ecs. (4.15) y (4.11) con la Ec. (4.10) se tiene que para que exista una coexistencia termodinámica entre ambas ecuaciones se debe cumplir que:

$$\kappa = -\frac{Gc_s^4}{2}, \quad \Psi \sim \rho. \quad (4.16)$$

Por otra parte, es importante conocer el valor crítico de G , G_C , ya que, como se mencionó antes, es el análogo a la temperatura crítica para que haya transición de fases. Otro parámetro importante a tener en cuenta es la densidad crítica, ρ_C . Ambos parámetros se obtienen suponiendo que las primeras dos derivadas de p respecto a ρ son igual a cero:

$$\begin{aligned} \partial\rho &= \left. \frac{\partial c_s^2\rho + \frac{c_s^2 G}{2}\Psi^2(\rho)}{\partial\rho} \right|_{G_c, \rho_c} \\ &= c_s^2 + G_c c_s^2 [\Psi(\rho_c)]^2 \frac{\rho_0}{\rho_c^2} = 0, \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde se asume que $\Psi(\rho) = \Psi_0 e^{-\rho_0/\rho}$. Resolviendo el sistema de ecuaciones anterior se encuentran los valores críticos:

$$\begin{aligned} G_c &= -\frac{\rho_0}{[\Psi(\rho_c)]^2} \\ \rho_c &= \rho_0. \end{aligned} \quad (4.18)$$

4.1.3. Ecuaciones de Estado

En el estudio de gases reales existen distintas ecuaciones de estado que se utilizan para describir sus propiedades, en esta sección se presentan algunas de las más populares en el contexto del modelo de Shan-Chen:

- La ecuación de van der Waals: esta ecuación es la más simple y la más famosa. Fue presentada en 1837 y es válida para describir el comportamiento de una gran variedad de gases reales al mismo tiempo que mantiene su simplicidad conceptual. La expresión matemática de esta ecuación es la siguiente:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - a \left(\frac{1}{V_m} \right)^2, \quad (4.19)$$

donde $V_m = V/n$ es el volumen ocupado por un mol de sustancia a una temperatura y presión dadas, y se conoce como *volumen molar*, a es un parámetro que caracteriza la atracción de las moléculas del gas, b es un volumen molar mínimo de tal manera que cuando $V_m \approx b$ el gas ya no pueda ser comprimido y la presión aumente rápidamente. La Ec. (4.19) puede verse gráficamente en la Fig. 4.1. Cuando el fluido alcanza la

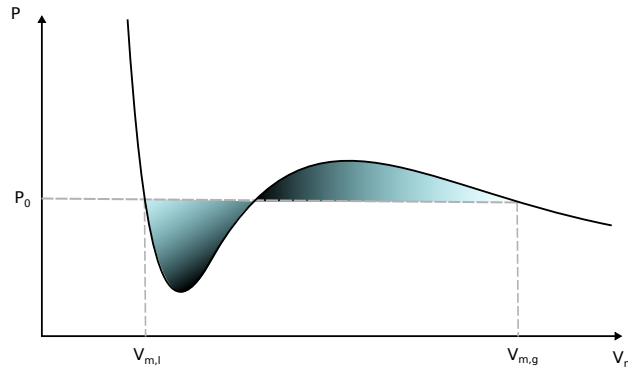


Figura 4.1: La gráfica P - V_m de la ecuación de van der Waals para una temperatura T . La transición de fase ocurre cuando al fijar P_0 las áreas sombreadas son iguales; las líneas $V_{m,l}$ y $V_{m,g}$ representan la coexistencia de los estados líquido y gaseoso.

temperatura crítica T_c , las dos primeras derivadas de la presión con respecto al volumen molar cumplen

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial V_m} \Big|_{(V_c, T_c)} &= 2aV_c^{-3} - \frac{RT_c}{(V_c - b)^2} = 0, \\ \frac{\partial^2 P}{\partial V_m^2} \Big|_{(V_c, T_c)} &= 6aV_c^{-4} - \frac{2RT_c}{(V_c - b)^3} = 0, \end{aligned} \quad (4.20)$$

con V_c es el volumen molar en la temperatura crítica. Resolviendo el sistema de Ecuaciones (4.20) se encuentran los valores de a y b :

$$\begin{aligned} a &= \frac{9V_c RT_c}{8}, \\ b &= \frac{V_c}{3}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

a y b son diferentes para cada sistema líquido-vapor no ideal. De la Figura 4.1 se puede ver que existe un amplio rango de presiones para el cual hay una coexistencia de fases,

por lo que se requiere contar con una forma de conocer el valor exacto de la presión que el sistema debe tomar, así como los valores del volumen molar que se deben elegir. Para ello existe *la regla de construcción de área de Maxwell*. La construcción de Maxwell se expresa de la siguiente manera:

$$\int_{V_{m,l}}^{V_{m,g}} PdV = P_0(V_{m,g} - V_{m,l}), \quad (4.22)$$

esta ecuación postula que para una temperatura dada T , la coexistencia entre líquido y gas ocurre a una presión P_0 de tal manera que las dos áreas sombreadas en la Fig. 4.1 sean idénticas.

- En 1949 se propuso otra ecuación de estado:

$$P = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2}{\sqrt{T}(1 + b\rho)}, \quad (4.23)$$

con $a = \frac{0.42748R^2T_c^{2.5}}{P_c}$ y $b = \frac{0.08662RT_c}{P_c}$, estos parámetros tienen la misma interpretación que para la ecuación de estado de van der Waals. Esta ecuación recibe el nombre de *ecuación de estado de Redlich-Kwong*.

- Para obtener ecuaciones de estado más precisas Carnahan y Starling modificaron la ecuación de van der Waals. La ecuación de Carnahan-Starling está dada por:

$$P = \rho RT \frac{1 - b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2 \quad (4.24)$$

con $a = 0.4963R^2T_c^2/P_c$ y $b = 0.18727RT_c/P_c$. Con esta ecuación se obtienen mejores resultados con un rango más amplio de temperaturas.

4.1.4. Tensión superficial

La tensión superficial se define como el trabajo reversible por unidad de superficie que se necesita para incrementar el área A de superficie Σ una cantidad ΔA :

$$\Delta W = \sigma \Delta A. \quad (4.25)$$

Para ilustrarlo, si se considera una gota líquida esférica de radio R a una presión P_l inmersa en un gas que se encuentra a una presión $P_g > P_l$, el trabajo que se requiere hacer sobre el sistema líquido-vapor para que el radio de la gota aumente de R a $R + \Delta R$ se calcula mediante la siguiente expresión:

$$\Delta W = (P_g - P_l)\Delta V, \quad (4.26)$$

donde $\Delta V = 4\pi R^2\Delta R$ es el cambio de volumen de la gota. Esto es la energía del exterior suministrada que se requiere para ganar la acción de la tensión superficial, cuya tarea es resistir el aumento de la superficie líquida,

$$\sigma \Delta A = (P_g - P_l)\Delta V \implies \sigma(8\pi R\Delta R) = (P_g - P_l)(4\pi R^2\Delta R), \quad (4.27)$$

realizando el álgebra necesaria, la expresión se reduce a lo siguiente:

$$\Delta P = \frac{2\sigma}{R}, \quad (4.28)$$

esta ecuación recibe el nombre de *Relación de Laplace*. La tensión superficial rige una ecuación de estado no ideal describiendo el fenómeno de transición de fase. En el contexto de *LBM*, σ es un parámetro dado. En los fluidos multi-fase la tensión superficial surge en la interfaz donde ambas fases se encuentran e contacto.

4.2. Pruebas

Para las simulaciones se emplea la ecuación de Carnahan-Starling donde se definen los parámetros de la siguiente manera: $a = 1$, $b = 4$ y $R = 1$. En todas las simulaciones se define $\tau = 1$ por lo que la viscosidad cinemática a través de (3.45) es de $1/6$. Además las viscosidades para cada fase se definen como $\nu_l = \nu_g = \nu$. En todos los resultados se muestran cortes, ya sea en el plano $x - z$ situado en $y = Ny/2$ o en el plano $x - y$ situado en $z = Nz/2$, del dominio en 3D.

4.2.1. Ángulo de Contacto

En muchas de las simulaciones que se realizan con flujos multi-componente y/o multi-fase los flujos requieren estar confinados por superficies (paredes) sólidas, un ejemplo de ellos son las interfases porosas. Cada fluido que compone el sistema de estudio se comporta de manera diferente al estar en contacto con las paredes que los confinan. La afinidad que cada fluido presenta con las paredes es cuantificada por una propiedad material que recibe el nombre de *ángulo de contacto*, θ .

Suponga una gota de un líquido rodeada por un gas, el ángulo de contacto entre los fluidos y la superficie se calcula mediante la siguiente expresión:

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{s2} - \sigma_{s1}}{\sigma_{12}}, \quad (4.29)$$

donde σ_{s1} y σ_{s2} es la tensión superficial entre el sólido y cada uno de los fluidos, mientras que, σ_{12} es la tensión superficial entre los fluidos, un esquema del ángulo de contacto se muestra en la Fig. 4.2.

Cuando $\theta < 90^\circ$ en (4.29) la fase líquida humedece la pared, esta propiedad se conoce como *hidrofílica*. Por otra parte, cuando $\theta > 90^\circ$ la fase gaseosa interactúa más favorablemente con la pared, es decir, la pared es *hidrofóbica*. Estas propiedades afectan de manera significativa un flujo cuando se encuentra cerca de las fronteras sólidas [5]. En las simulaciones, el ángulo de contacto es un parámetro que puede ser controlado y ajustado para cada problema. De acuerdo con [17] el ángulo de contacto deseado también puede ser obtenido al cambiar la densidad del fluido en la superficie sólida, ρ_w .

Para problemas multi-fase, la fuerza de adhesión entre las fases gas-líquido y la superficie sólida esta dada por:

$$F_{ads}(\vec{x}, t) = -G\Psi(\rho(\vec{x}, t)) \sum_k w_k \Psi(\rho_w) s(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t) \vec{c}_k, \quad (4.30)$$



Figura 4.2: Se presenta una ilustración del concepto de ángulo de contacto.

donde $s(\vec{x} + \vec{c}_k \Delta t, t)$ sólo puede tomar dos valores 1 o 0, 1 representa un nodo sólido, y 0 representa un nodo de fluido. Cualquier nodo de la malla puede ser sólido o líquido; sin embargo, para nodos sólidos condiciones de frontera de rebote son implementadas antes del paso de propagación en lugar del paso de colisión [6].

En las Figuras 4.3, 4.4 y 4.5 se muestran los estados finales de las tres pruebas realizadas estudiar el comportamiento de distintos fluidos debido a las propiedades de las paredes. Las tres pruebas fueron diseñadas en un dominio $[0, N_x] \times [0, N_y] \times [0, N_z]$ con $N_x = N_y = 50$ y $N_z = 40$, las tapas inferior y superior se fijan como paredes sólidas, mientras que en las demás fronteras se usan condiciones periódicas.

Las pruebas consisten en situar una gota en la pared inferior del dominio.

La forma inicial de la fase líquida en cada prueba, $\rho_l = 0.265$, $\rho_l = 0.279$ y $\rho_l = 0.30$, se define como medio círculo de radio $R = 15$ que se encuentra pegada a la pared inferior del dominio numérico $(N_x/2, N_y/2, 0)$, mientras que el resto del dominio contiene gas, $\rho_g = 0.038$, $\rho_g = 0.032$ y $\rho_g = 0.02$. Una vez que se ha fijado la configuración inicial del sistema se deja evolucionar hasta que se estabiliza, en ese momento la gota define un ángulo de contacto, que depende de la densidad en la frontera $\rho_w = 0.001$, $\rho_w = 0.08$, $\rho_w = 0.1$ y $\rho_w = 0.18$.

En las Figuras presentadas para cada prueba, Figs. 4.3, 4.4 y 4.5, se determina que para los valores de ρ_w cercanos a la densidad de la fase gaseosa ρ_g las gotas se separan de la pared, es decir, los fluidos son hidrofóbicos y el ángulo de contacto es $\theta > 90^\circ$; por otro lado, para ρ_w aproximándose a ρ_l , las tres gotas presentan un comportamiento hidrofílico, por lo que $\theta < 90^\circ$. Sin embargo, en este modelo no ha sido propuesta una fórmula para predecir un ángulo de contacto en función de la densidad ρ_w .

Un cuarta prueba fue hecha con el objetivo de verificar el efecto que tienen las propiedades de las paredes sólidas en el comportamiento del fluido.

Se construyó la siguiente configuración: utilizando un dominio $[0, N_x] \times [0, N_y] \times [0, N_z]$ con $N_x = N_y = 50$ y $N_z = 50$ se define la configuración inicial que consiste en una gota de densidad $\rho_l = 0.265$ pegada a la frontera inferior, $(N_x/2, N_y/2, 0)$, mientras que el resto del dominio contiene la fase gaseosa del mismo fluido con una densidad $\rho_g = 0.038$. En la mitad

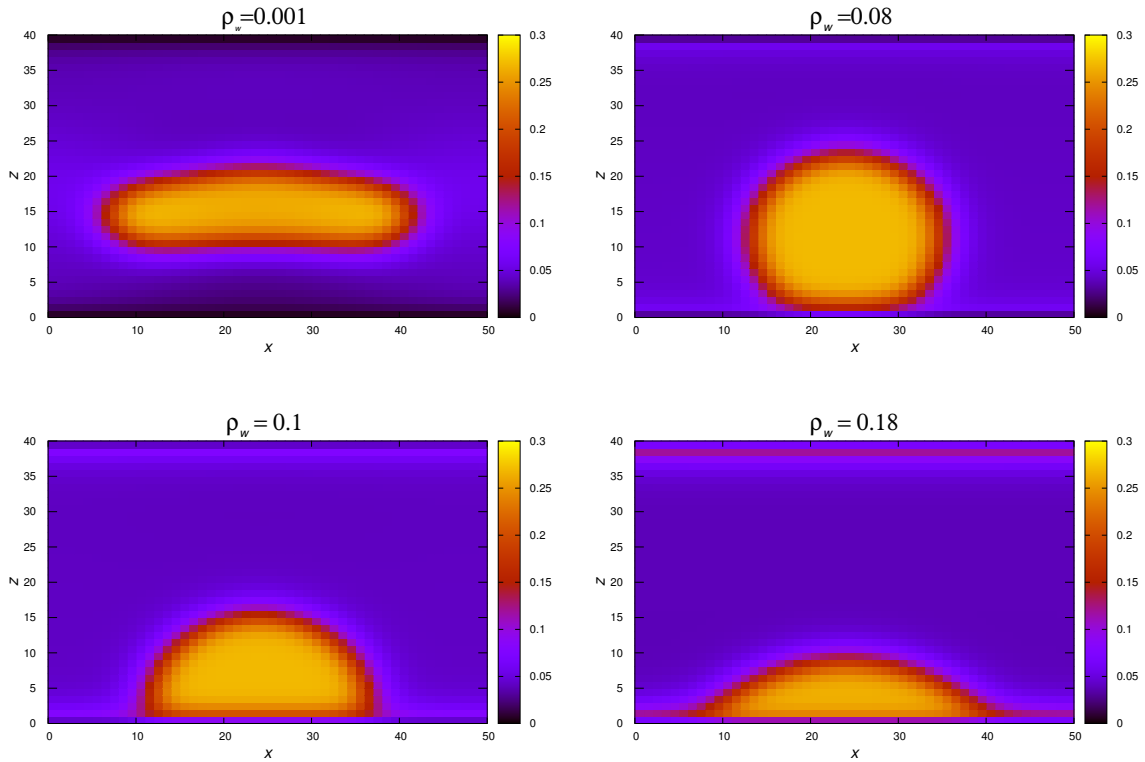


Figura 4.3: Se muestran diferentes ángulos de contacto para un fluido con una temperatura $T/T_0 = 0.875$. Al aumentar la densidad en la pared, el fluido que representa la fase líquida se adhiere con mayor facilidad a la pared. Debido a la fuerza que se ejerce cuando la densidad de la pared es pequeña la gota sufre una deformación.

del dominio se define una interfaz de grosor de 5 con un orificio circular en el centro de radio $R = 13.2$, mientras que las tapas superior e inferior también se definen como sólidas; tanto la placa como las paredes sólidas se configuran para ser hidrofóbicas, es decir, $\rho_w = 0.0001$. En las caras restantes se imponen condiciones periódicas. La evolución del sistema se muestra en la Figura 4.6, de donde se aprecia que después del tiempo $t = 900$ el sistema se estabiliza quedando la gota suspendida cerca del orificio de la placa, por lo que la fuerza ejercida por la interfaz y las paredes sobre la gota es una fuerza de repulsión.

4.2.2. Choque de gotas y burbujas

Dos gotas

La configuración inicial del sistema se define en un dominio $[0, Nx] \times [0, Ny] \times [0, Nz]$ donde $N_x = N_y = 50$ y $N_z = 40$, en el cual se definen dos gotas que tienen el mismo diámetro $R = 15$ con centro en $(Nx/2, Ny/2, Nz/4)$ y $(Nx/2, Ny/2, 3Nz/4)$, cada gota tiene densidad $\rho_l = 0.265$, mientras que el resto del dominio contiene la fase gaseosa de este fluido $\rho_g = 0.038$. Las gotas chocan con una velocidad u ; Las condiciones de frontera en cada cara del dominio son periódicas. La velocidad relativa de las gotas es de $u = 0.14$, es decir, durante la evolución del sistema una gota se mueve con velocidad $u/2$ y la otra se mueve

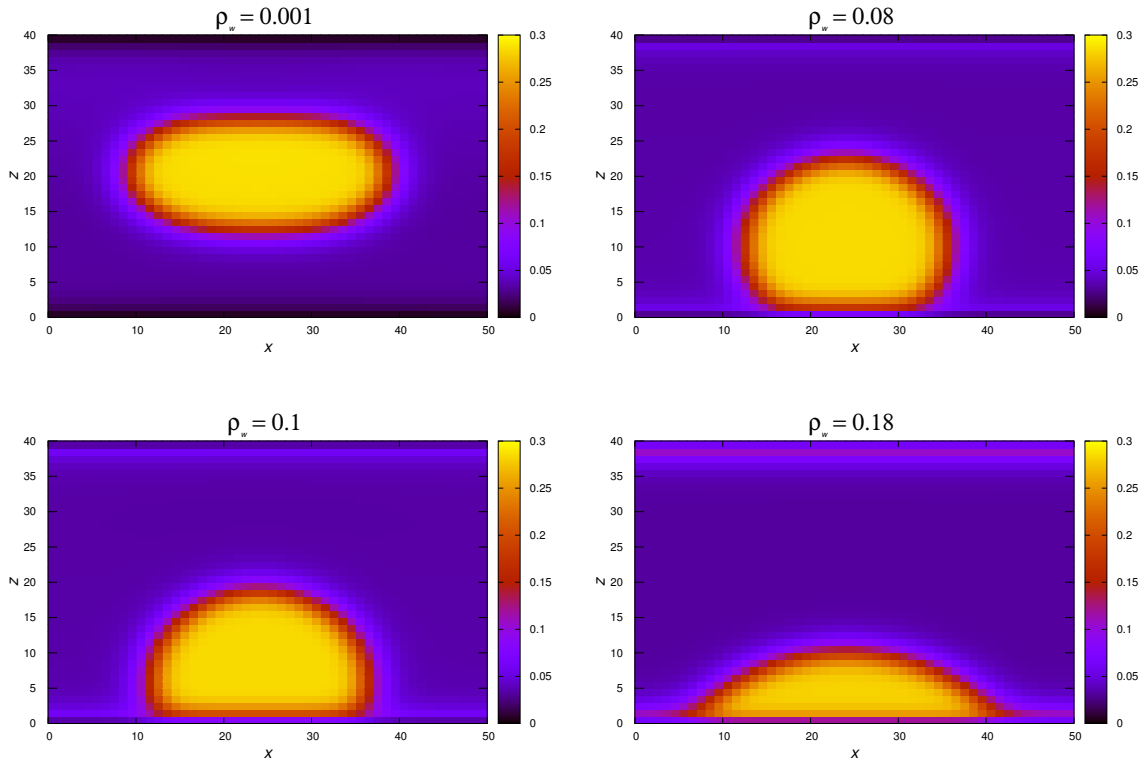


Figura 4.4: Estas gráficas corresponden a un fluido en su fase líquida con densidad $\rho_l = 0.279$ rodeado por una fase gaseosa, $\rho_g = 0.032$. Las gráficas se tomaron cuando el sistema se ha estabilizado. La deformación de la gota para $\rho_w = 0.0001$ es menor que la que presenta la gota en la Fig. 4.3.

con velocidad $-u/2$ en la dirección z . Los resultados se muestran en la Figura 4.7, de donde se aprecia que después de un tiempo las gotas chocan y forman una sola gota.

Dos burbujas

La configuración del sistema es análoga a la que se utilizó para el choque de dos gotas. La fase gaseosa se define como dos burbujas de densidad $\rho_g = 0.038$ cuyo radio se define como $R = 15$ centradas en los puntos $(N_x/2, N_y/2, N_z/4)$ y $(N_x/2, N_y/2, 3N_z/4)$, mientras que el resto del dominio se llena con una fase líquida de densidad $\rho_l = 0.265$. Las gotas se mueven en la dirección z con velocidades 0.3 y -0.3 . En la Figura 4.8 se puede ver que las burbujas de un tiempo colisionan, comienzan a oscilar para después estabilizarse formando una sola burbuja.

4.3. Medios porosos

Los sistemas en donde se simulan fluidos multi-fase en donde se encuentra presente algún medio poroso se encuentran de forma rutinaria en la naturaleza y son muy importantes en muchos campos científicos y de ingeniería, tales como geofísica, hidráulica, química e inge-

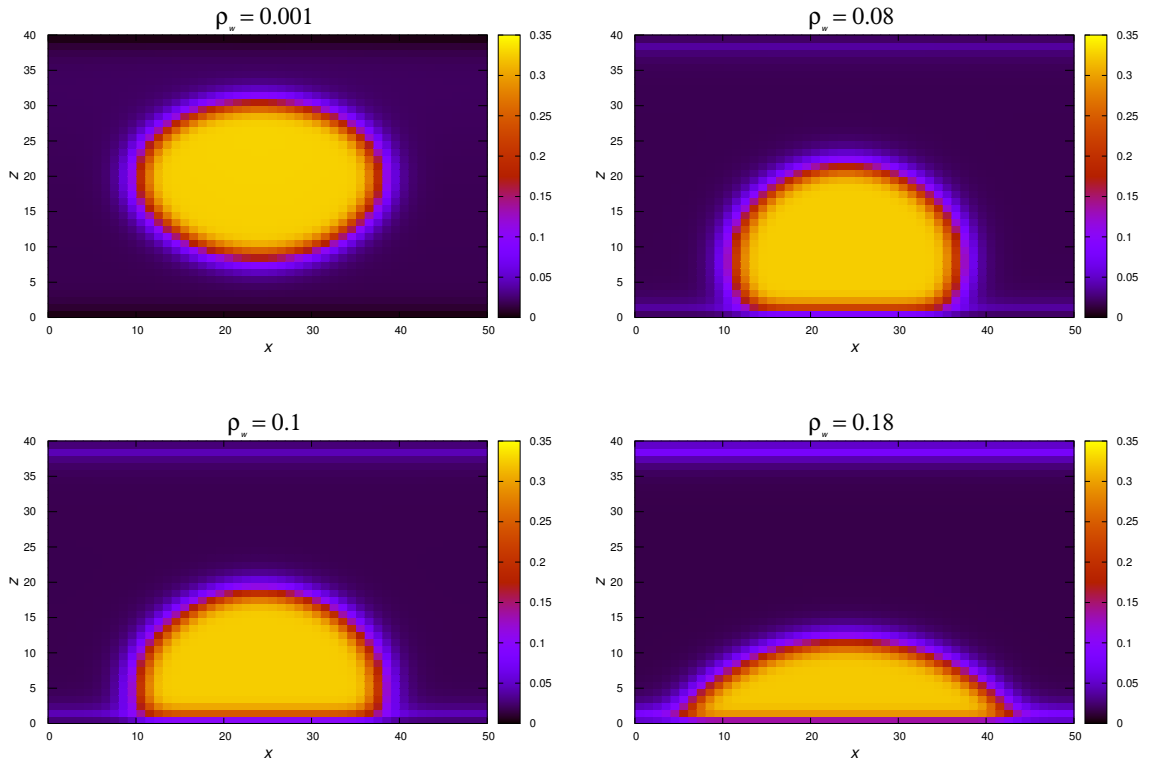


Figura 4.5: Las densidades para este sistema son $\rho_l = 0.30$ y $\rho_g = 0.02$. El estado final del sistema es presentado en las siguientes gráficas.

nierías relacionadas con el petróleo [20].

Los modelos de Lattice-Boltzmann permiten simular medios porosos con diferentes geometrías, en contraste con modelos donde la forma del medio poroso es idealizado como una red. Sin embargo, en la naturaleza los medios porosos pueden llegar a ser complejos, lo que le da al método de Lattice-Boltzmann una ventaja respecto a otros modelos ya que se pueden definir distintas geometrías para los medios porosos [12].

Una aplicación importante es la generación de burbujas en un líquido. Sin embargo, las condiciones para una generación eficiente de burbujas no ha sido ampliamente investigada.

En este trabajo se investigaron distintas geometrías del medio poroso, así como la influencia de una fuerza aplicada, el ángulo de contacto y la condición de temperatura del sistema en la formación de las burbujas.

4.3.1. Configuración del sistema

Las simulaciones de las pruebas siguientes se hicieron siguiendo la siguiente configuración. Se eligió el dominio $[0, N_x] \times [0, N_y] \times [0, N_z]$ con $N_x = 40$, $N_y = 40$ y $N_z = 110$; las condiciones de frontera utilizadas son condiciones periódicas en todas las fronteras excepto para la tapa superior $z = N_z$ la cual se define como una pared sólida. El medio poroso (color negro) se coloca en medio del dominio separándolo en dos cámaras, la primera de ellas se llena con la fase gaseosa (color azul) mientras que la segunda se llena con una fase líquida (color amarillo). Para estas simulaciones se aplica una fuerza en la dirección de z , F_z , con el

objetivo de que el gas pase a través del medio poroso. Al igual que en las pruebas anteriores se define $\tau = 1$ por lo que la viscosidad es $\nu = 1/6$.

4.3.2. Caso 1: Geometría del medio poroso

Las primeras pruebas corresponden a la geometría del medio poroso. De acuerdo con pruebas realizadas durante la realización de este proyecto se encontró que la forma de la interfaz juega un papel crucial en la formación de burbujas, geometrías como una interfaz con un orificio circular en el centro o una interfaz con un canal no propician la formación de burbujas. De acuerdo con [4] una geometría que es efectiva en la formación de dichas burbujas se presenta en la Figura 4.9, donde la interfaz está definida por un arreglo de cinco esferas, las cuatro esferas situadas en el plano $z = N_z/2$ tienen el mismo radio $R = 21$ mientras que la esfera situada por debajo de dicho plano tiene un radio menor. Al disminuir el radio de las esferas grandes durante las simulaciones se encontró que el gas pasaba a través del poro pero se dispersaba en el dominio, lo cual estaba lejos de formar una burbuja. Las pruebas siguientes fueron variar el radio de la esfera pequeña. La configuración inicial para estas pruebas así como los resultados obtenidos se describen a continuación.

La temperatura se fijó en $T/T_0 = 0.875$ y sus correspondientes densidades son $\rho_l = 0.265$ para la fase líquida y $\rho_g = 0.038$ para la fase gaseosa. Se aplica una fuerza de $F_z = 0.0007$ y el medio poroso se determina a ser hidrofílico, es decir, $\rho_w = 0.18$, en la Tabla 4.1 se muestran los parámetros utilizados en cada prueba. En la Figura 4.10 se muestra una sección en el plano $x - z$ en el momento donde el gas está pasando por la interfaz. De aquí se ve que la formación de la burbuja sí depende del tamaño de la esfera que se encuentra justo debajo del plano $z = N_z/2$. Cuando el radio aumenta la fase gaseosa se mantiene unida a la esfera y evita que la burbuja se forme. La formación de la burbuja se aprecia de mejor manera entre $8 \leq R \leq 10$.

T/T_0	ρ_l	ρ_g	ρ_w	F_z	R	Burbuja
0.875	0.265	0.038	0.18	7×10^{-4}	7	Sí
0.875	0.265	0.038	0.18	7×10^{-4}	8	Sí
0.875	0.265	0.038	0.18	7×10^{-4}	10	Sí
0.875	0.265	0.038	0.18	7×10^{-4}	11	No

Tabla 4.1: Los parámetros correspondiente a las pruebas realizadas en esta sección, donde el parámetro que varía es el radio de la esfera más pequeña.

4.3.3. Caso 2: Fuerza aplicada

Una vez que se determinó la geometría de la interfaz porosa se estudió la fuerza que se debe aplicar al sistema para la formación de las burbujas. En esta segunda prueba se consideraron distintas magnitudes de la fuerza que se aplicó al sistema, con el fin de ver la influencia que ésta ejerce sobre la formación de la burbuja. La configuración inicial del sistema es la siguiente: la geometría del medio poroso es la misma que en la prueba anterior, basándose en los resultados anteriores el radio de la esfera pequeña se fija igual a $R = 9$,

mientras que el radio de las demás esferas es de $R = 21$. La densidad en las paredes del medio poroso se fija igual a $\rho_w = 0.18$, es muy hidrofílica, por otra parte las densidades del líquido y del gas son las mismas que en la prueba anterior ($\rho_l = 0.265$ y $\rho_g = 0.038$), es decir, el sistema se encuentra a una temperatura $T/T_0 = 0.875$. Las pruebas se hicieron aplicando distintas magnitudes de la fuerza en la dirección de z , $F_z = 0.0001$, $F_z = 0.0003$, $F_z = 0.0005$ y $F_z = 0.0007$, en la Tabla 4.2 se muestran los parámetros usados en estas pruebas. Los resultados se muestran en la Figura 4.11 de donde se ve que para fuerzas pequeñas la burbuja esta lejos de formarse, mientras que, al aplicar una fuerza más grande la burbuja se forma completamente.

T/T_0	ρ_l	ρ_g	ρ_w	F_z	R	Burbuja
0.875	0.265	0.038	0.18	1×10^{-4}	9	No
0.875	0.265	0.038	0.18	3×10^{-4}	9	No
0.875	0.265	0.038	0.18	5×10^{-4}	9	No
0.875	0.265	0.038	0.18	7×10^{-4}	9	Sí

Tabla 4.2: Los parámetros correspondiente a distintas magnitudes de la fuerza son presentados.

4.3.4. Caso 3: Ángulos de contacto

De acuerdo con las pruebas presentadas en las Figuras 4.3, 4.4 y 4.5, las propiedades de las paredes de la interfaz pueden propiciar o no la formación de las burbujas. Por lo que determinar el valor de ρ_w que genere un mejor resultado es importante. La condición inicial de este sistema es un medio poroso situado en la mitad del dominio que posee la geometría de la Figura 4.9 con el radio de la esfera que se encuentra debajo de las otras cuatro igual a $R = 9$. Las densidades del fluido empleado son $\rho_l = 0.265$ y $\rho_g = 0.038$ que corresponden a una temperatura de $T/T_0 = 0.875$; se aplica una fuerza de $F_z = 7 \times 10^{-4}$, los parámetros correspondientes a este caso se presentan en la Tabla 4.3. De la Figura 4.12 se ve que para densidades iguales o menores a $\rho_w = 0.08$ las paredes de la interfaz porosa son hidrofóbicas y, por lo tanto, el gas interactúa con mayor facilidad con dicha interfaz impidiendo la formación de la burbuja.

Por otra parte, para densidades $\rho_w = 0.12$ o mayores las paredes de la interfaz son hidrofílicas por lo que el gas interactúa con mayor dificultad con las paredes, lo que propicia la formación de las burbujas.

T/T_0	ρ_l	ρ_g	ρ_w	F_z	R	Burbuja
0.875	0.265	0.038	0.08	7×10^{-4}	9	No
0.875	0.265	0.038	0.12	7×10^{-4}	9	No
0.875	0.265	0.038	0.18	7×10^{-4}	9	Sí

Tabla 4.3: Los parámetros correspondiente a diferentes ángulos de contacto.

4.3.5. Caso 4: Temperaturas

Los casos anteriores se hicieron para la temperatura igual $T/T_0 = 0.875$ de donde se encontró que los parámetros que influyen en la formación de una burbuja son: $\rho_w = 0.18$, $F_z = 7 \times 10^{-4}$, $R = 9$, en la Figura 4.13 se muestra la evolución de la formación de una burbuja correspondiente a dicha temperatura empleando los parámetros antes mencionados. Utilizando los mismos parámetros, se hicieron dos pruebas más para verificar como afecta la temperatura en la formación de las burbujas. La Figura 4.14 representa la evolución del sistema para una temperatura de $T/T_0 = 0.85$, para esta temperatura las densidades correspondientes son $\rho_l = 0.279$ y $\rho_g = 0.032$. Por otra parte, en la Figura 4.15 se muestra la evolución del sistema con una temperatura $T/T_0 = 0.775$, para este sistema la densidad de la fase líquida es $\rho_l = 0.30$ y la densidad de la fase gaseosa es $\rho_g = 0.02$. Los parámetros que corresponden a esta simulación se muestran en la Tabla 4.4

En ambas Figuras se aprecia que la formación de burbujas no ocurre, por esta razón la temperatura es un parámetro que influye de manera significativa en la formación de burbujas. Al comparar las tres Figuras 4.13, 4.14 y 4.15 se ve una ligera variación en la temperatura afecta significativamente al sistema.

T/T_0	ρ_l	ρ_g	ρ_w	F_z	R	Burbuja
0.875	0.265	0.038	0.18	7×10^{-4}	9	Sí
0.85	0.279	0.032	0.18	7×10^{-4}	9	No
0.775	0.30	0.02	0.18	7×10^{-4}	9	No

Tabla 4.4: Los parámetros correspondiente a la temperatura.

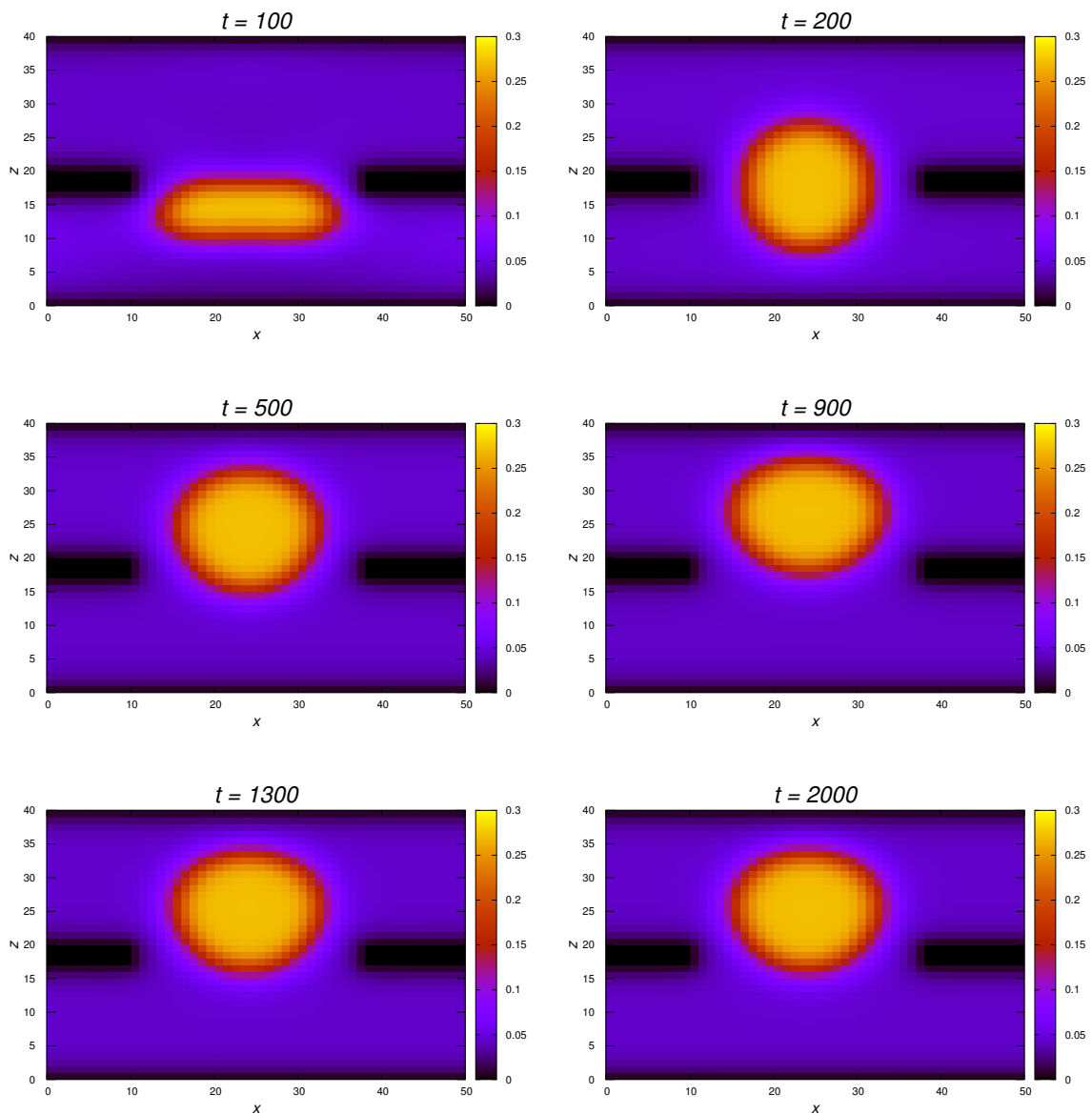


Figura 4.6: Se presenta la evolución de una gota que al inicio de la simulación se encontraba pegada en la frontera inferior. Durante la evolución la gota se despega de la pared inferior y pasa a través del orificio de la placa; al llegar a la pared superior es repelida nuevamente hasta quedar suspendida en el orificio de la placa.

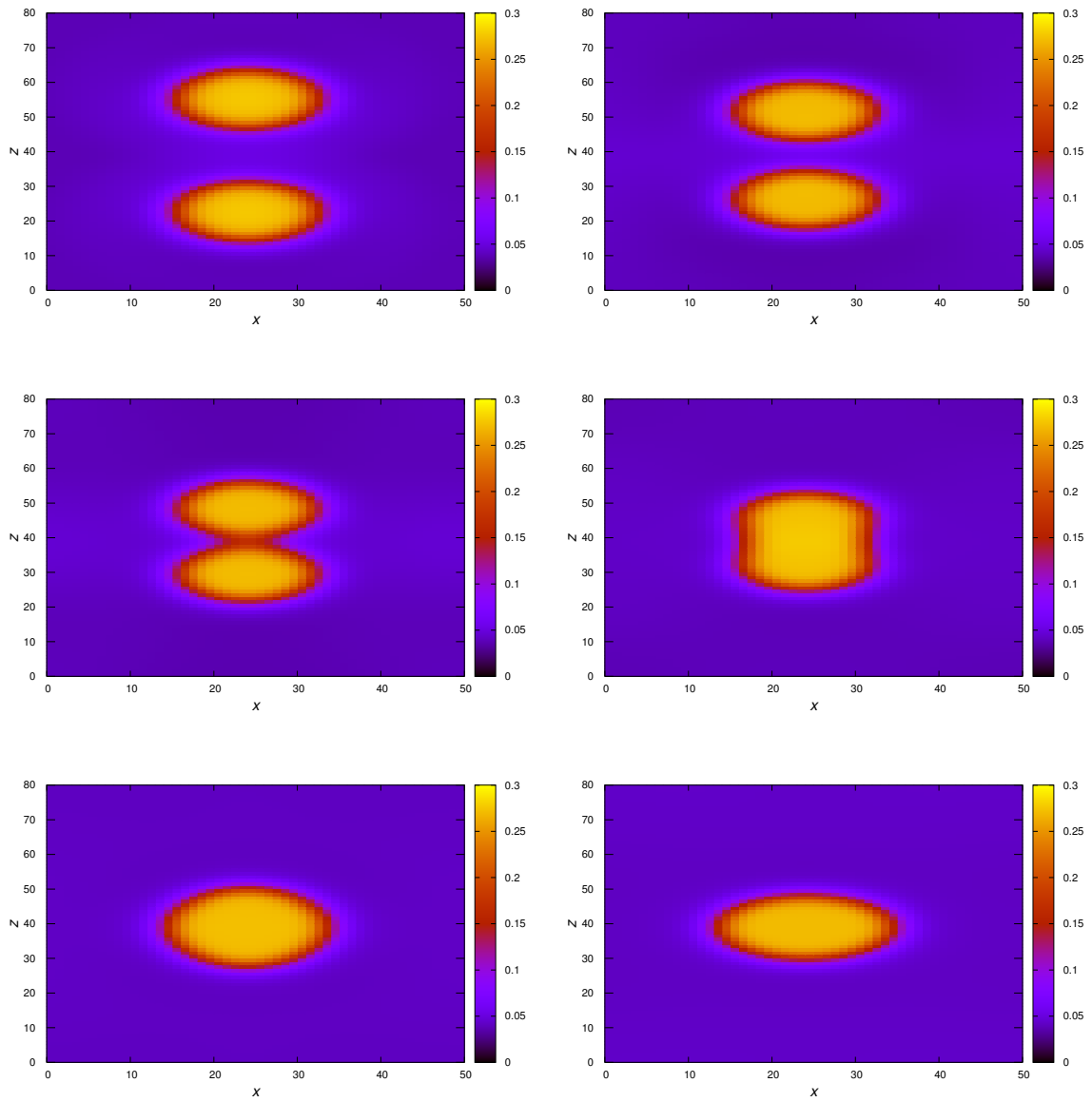


Figura 4.7: La evolución de dos gotas que se mueven en la dirección de z . Durante la evolución las gotas colisionan formando una sola gota que se estabiliza después de algunas oscilaciones.

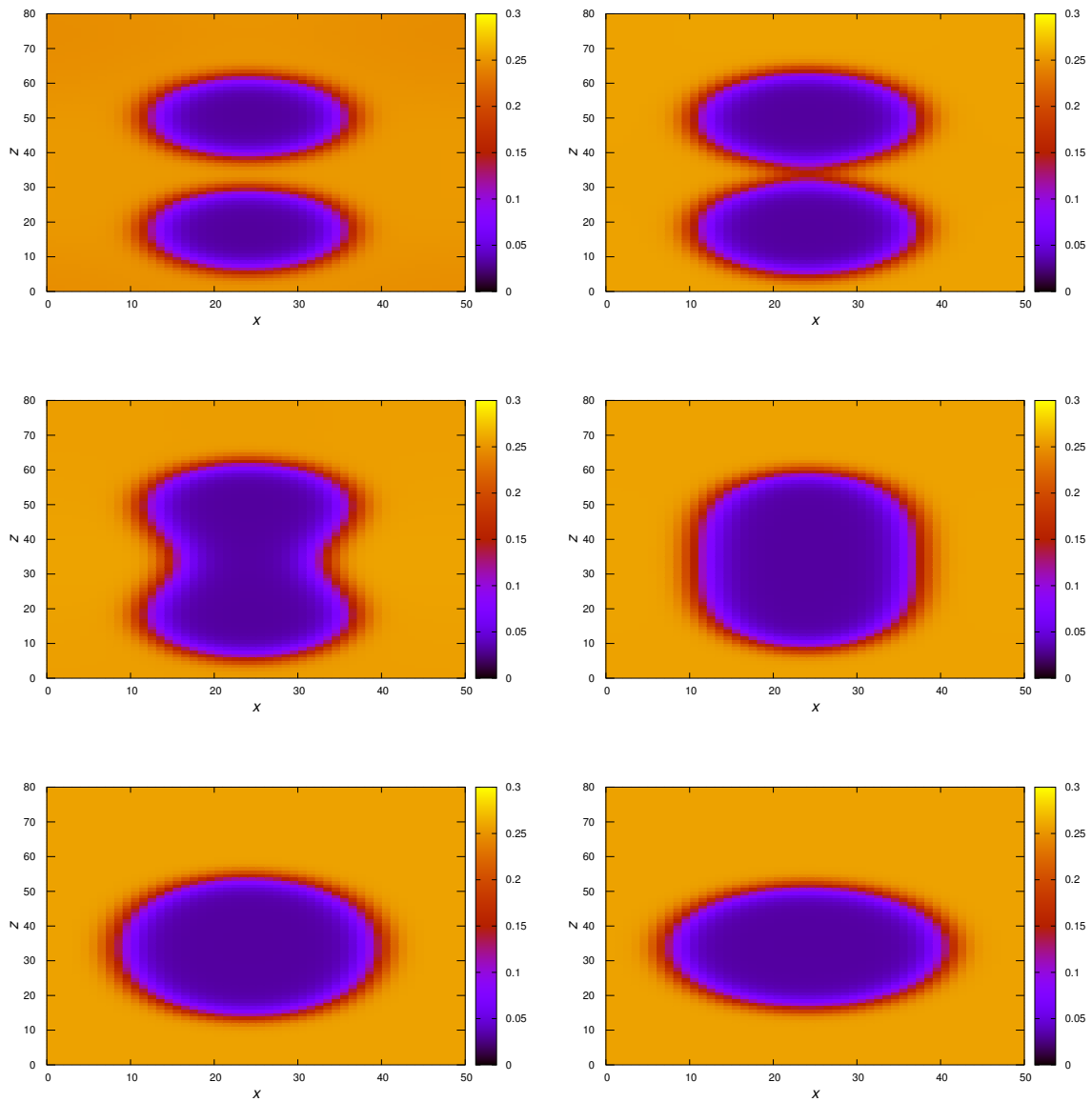


Figura 4.8: Este esquema corresponde al choque de dos burbujas. La inicialización del sistema es análogo al de dos gotas, únicamente se invirtieron las densidades formándose así las burbujas.

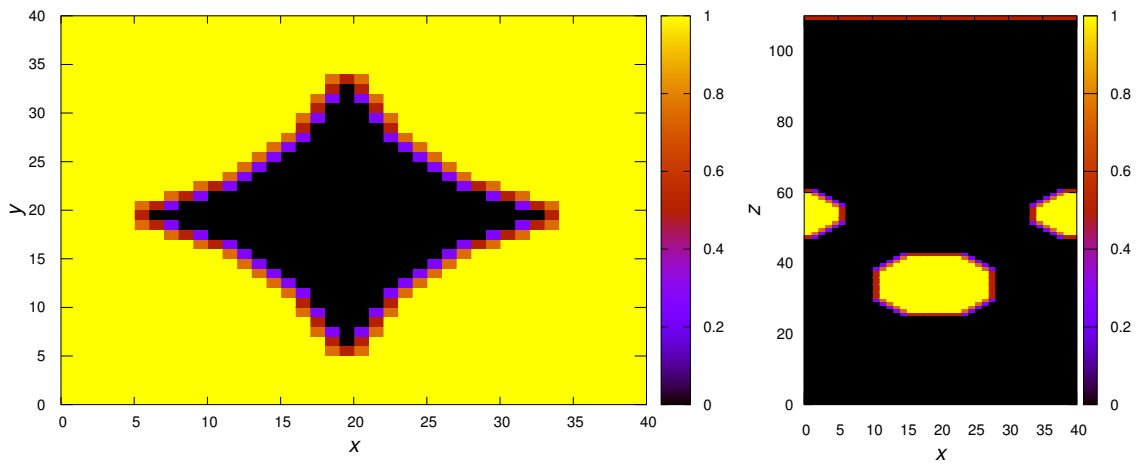


Figura 4.9: Se muestra la geometría del medio poroso empleada en las simulaciones. El poro se forma debido a 4 esferas de radio $R = 21$ cada una centrada en $(0, 0, N_z/2)$, $(0, N_y, N_z/2)$, $(N_x, 0, N_z/2)$ y $(N_x, N_y, N_z/2)$ y una esfera adicional centrada en $(N_x/2, N_y/2, (N_z/4 + 8))$ de menor radio. En la figura de la izquierda se muestra un corte en el plano $x - y$ localizado en $z = N_z/2$ y en la figura de la derecha se muestra un corte en el plano $x - z$ localizado en $y = N_y/2$.

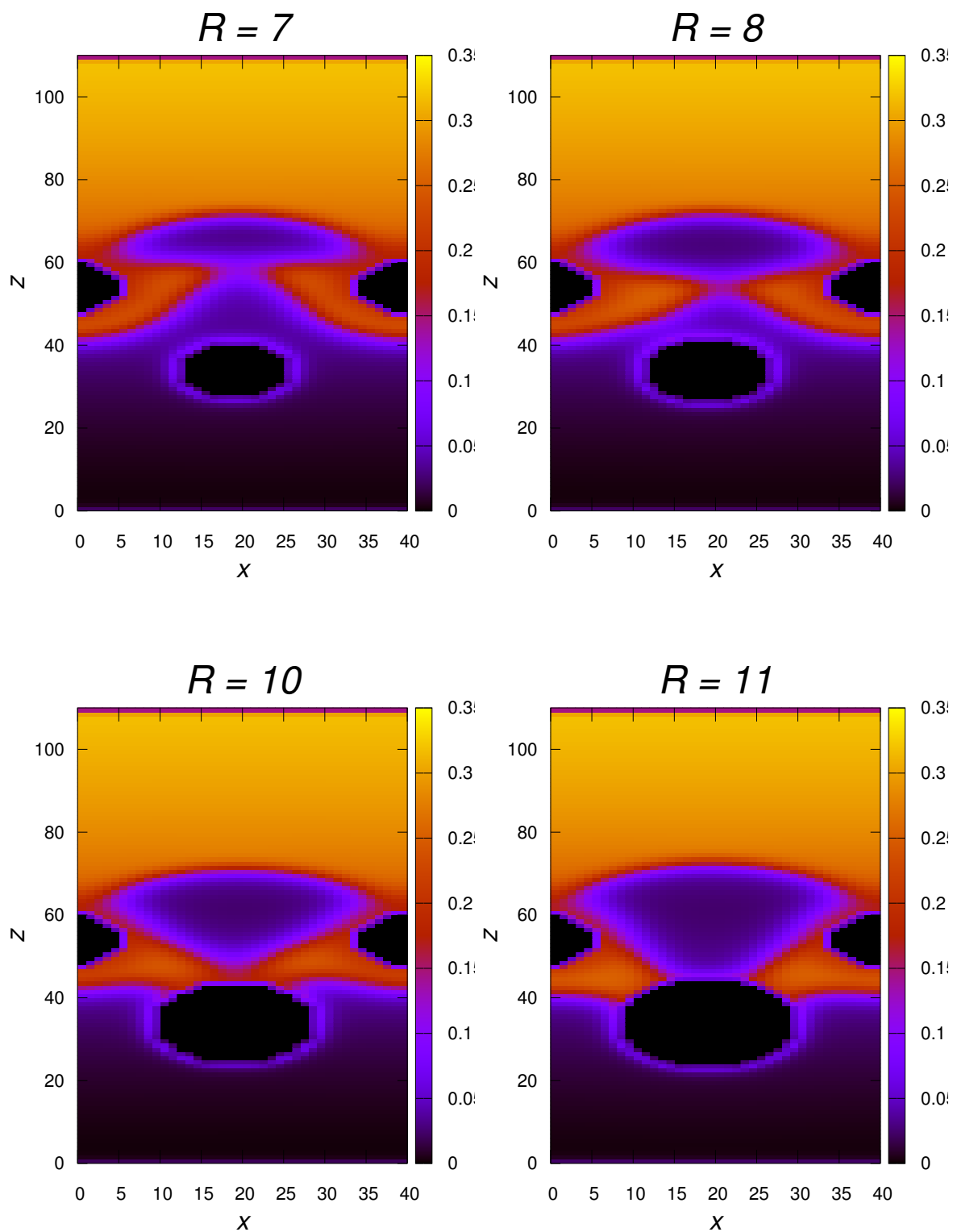


Figura 4.10: **Caso 1.** Muestra un corte en el plano $x-z$ de la formación de la burbuja pasando a través de la interfaz porosa. Los radios de la esfera centrada en $(N_x/2, N_y/2, (N_z/4 + 8))$ se hacen variar. Las simulaciones corresponden a $R = 7, 8, 10, 11$.

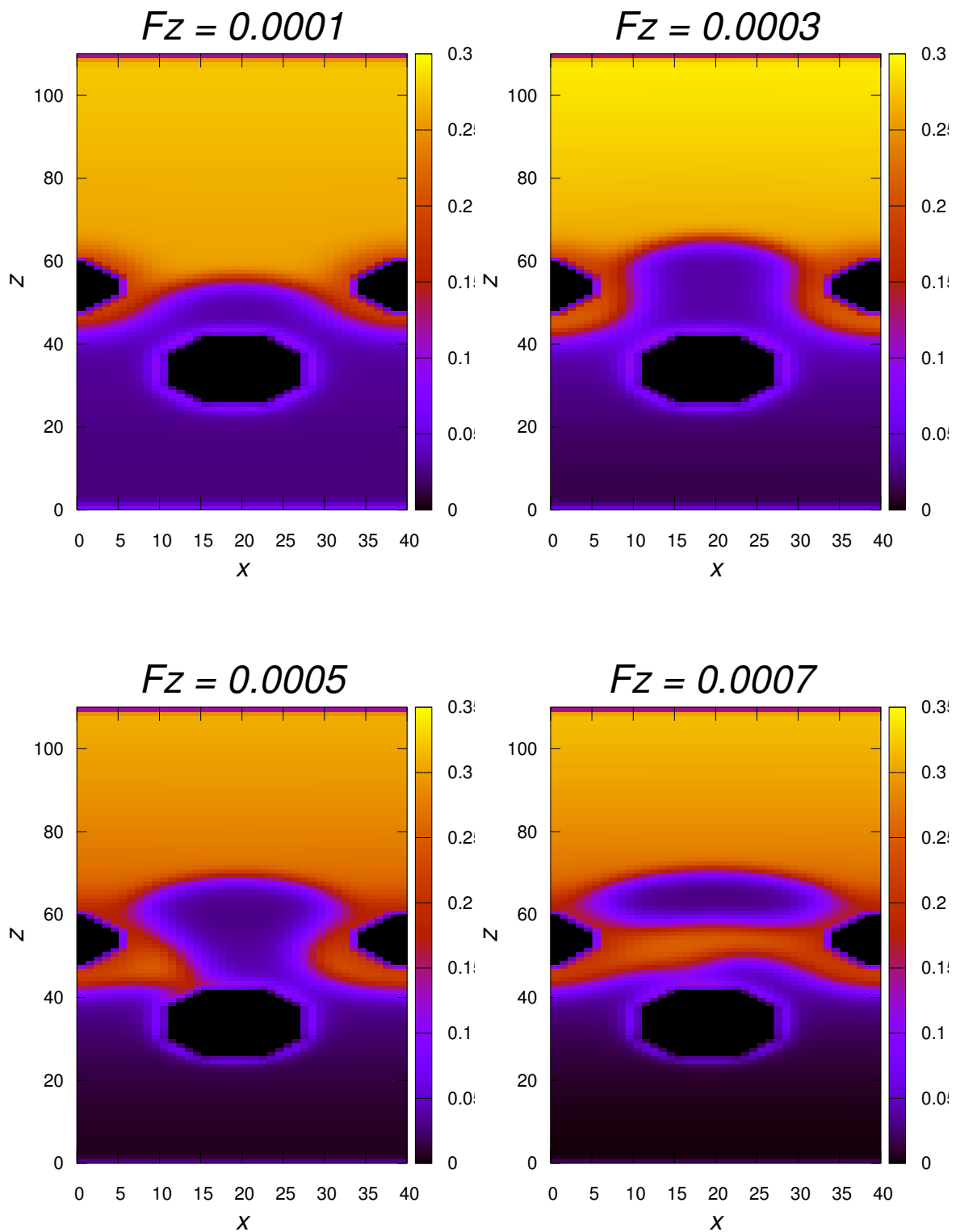


Figura 4.11: *Caso 2*. Se presentan los resultados obtenidos cuando la fuerza que se aplica al sistema varia, $F_z = 1 \times 10^{-4}, 3 \times 10^{-4}, 5 \times 10^{-4}, 7 \times 10^{-4}$. La burbuja se forma cuando se aplica una fuerza de 7×10^{-4} .

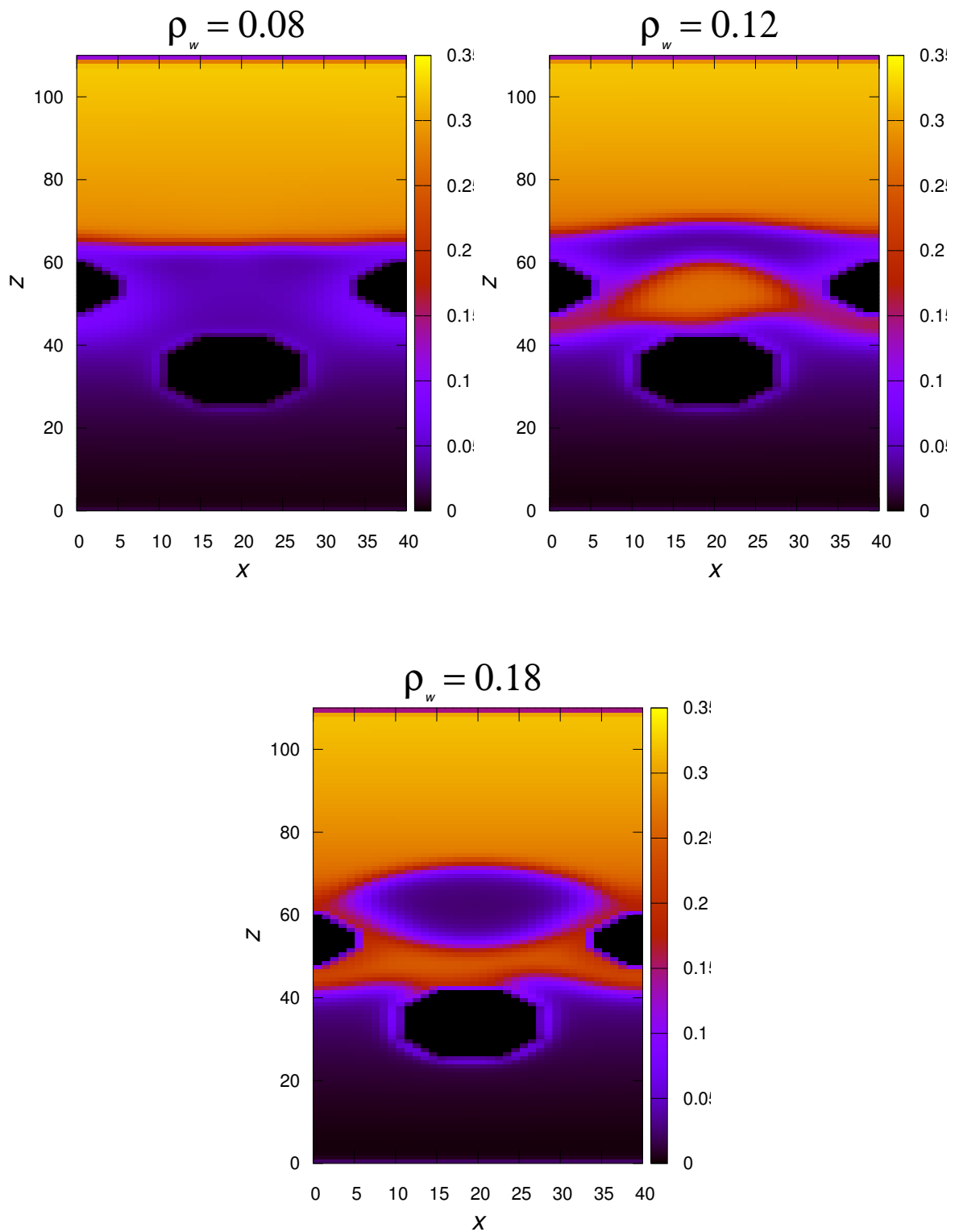


Figura 4.12: **Caso 3.** Se muestran los resultados para distintas densidades en la paredes sólidas de la interfaz, $\rho_w = 0.08, 0.12, 0.18$. Para densidades pequeñas la burbuja no esta cerca de formarse, mientras que para densidades mayores la burbuja se forma completamente.

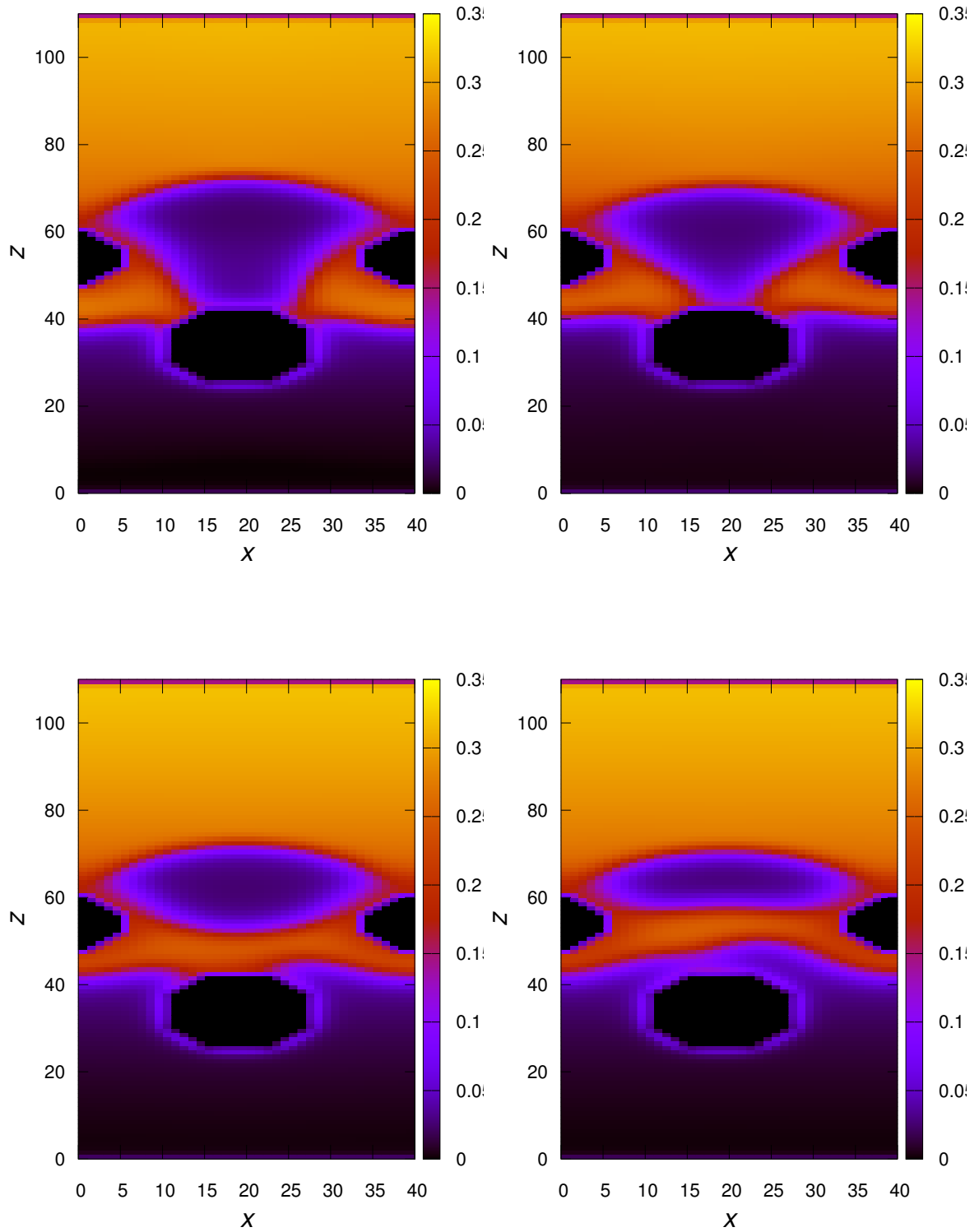


Figura 4.13: Se presenta la evolución de la formación de una burbuja, en donde los parámetros utilizados son $\rho_w = 0.18$, $F_z = 7 \times 10^{-4}$, $R = 9$. Esta Figura corresponde a $T/T_0 = 0.875$.

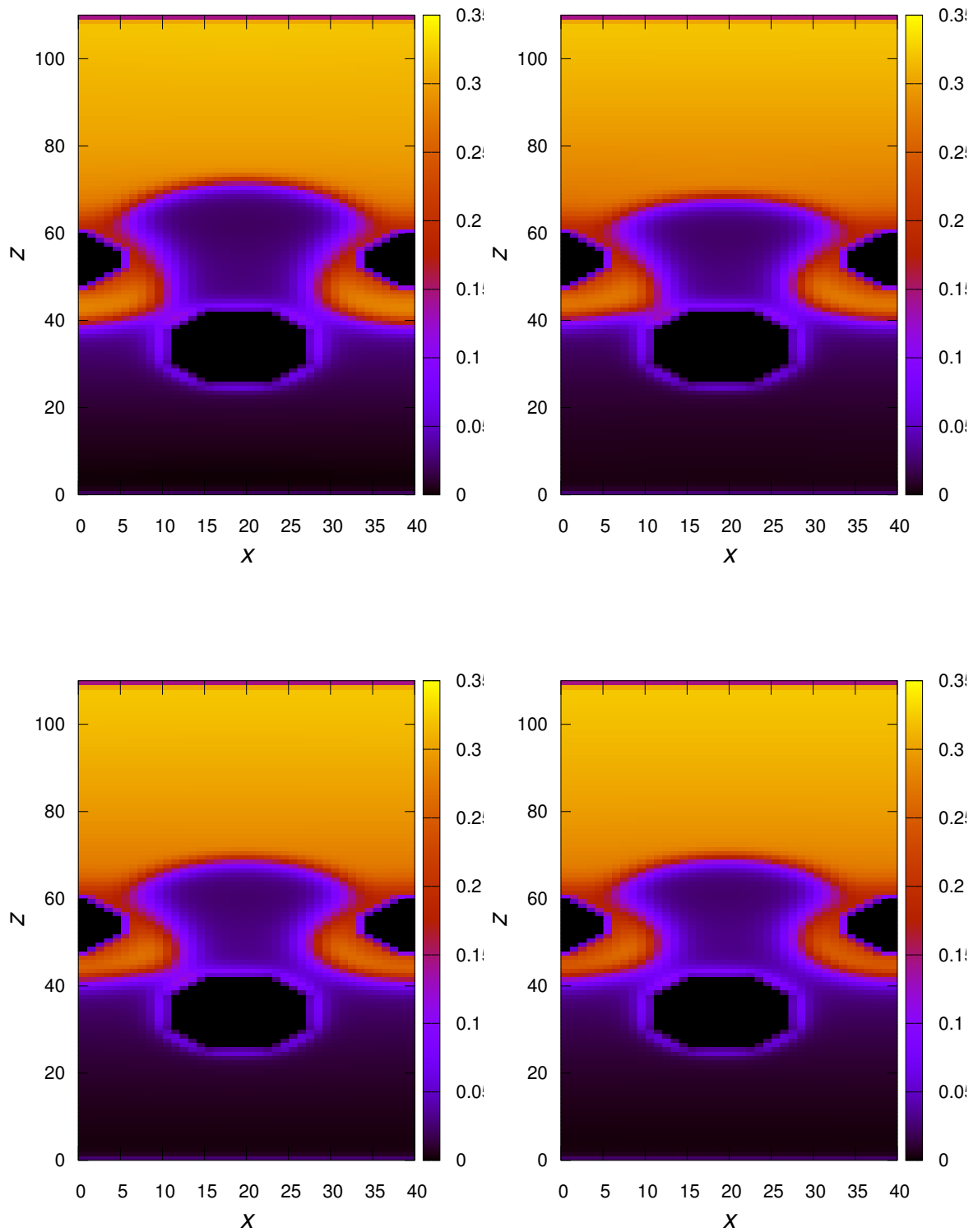


Figura 4.14: La evolución del sistema que se encuentra a una temperatura $T/T_0 = 0.85$ es presentada. Aunque la temperatura es menor a la empleada en la prueba anterior sólo por 0.025 la formación de la burbuja no ocurre.

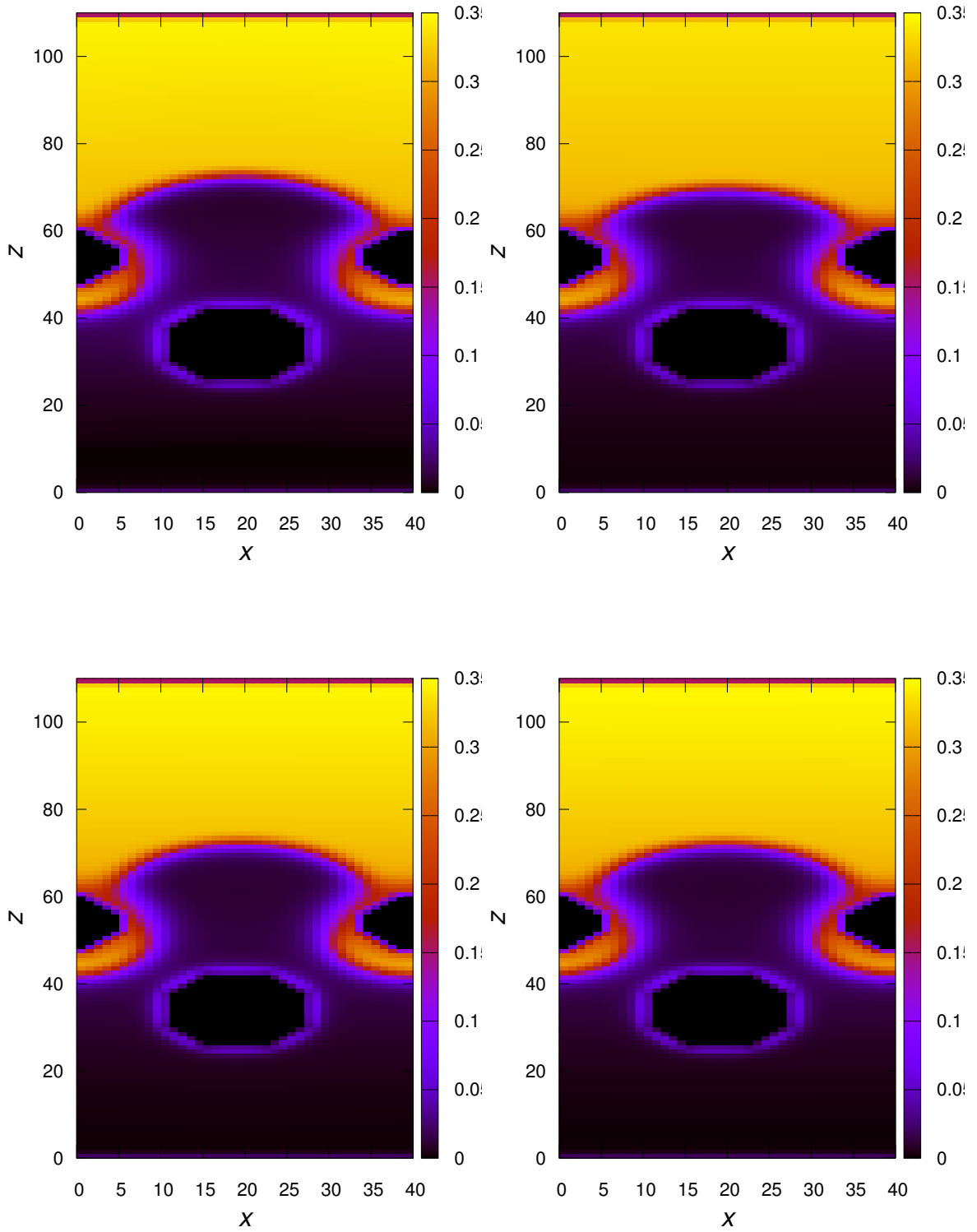


Figura 4.15: Para esta prueba se emplea una temperatura de $T/T_0 = 0.775$. Al igual que en la prueba anterior la formación de la burbuja no es posible.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se utilizó el método de Lattice-Boltzmann para explorar las condiciones bajo las cuales se forma una burbuja de gas dentro de la fase líquida de un mismo fluido, para lo cual se ha usado una interfaz porosa que fragmenta la fase gaseosa.

Gran parte del trabajo ha incluido una descripción completa de los métodos numéricos usados para la simulación de un sistema bifásico, así como sus fundamentos teóricos. También se ha presentado un conjunto de pruebas que pasa el código que se ha usado, asociadas a la evolución de fluidos bifásicos bajo distintas circunstancias de prueba.

En un escenario menos de prueba y más de investigación, se estudió el comportamiento del fluidos en la presencia de obstáculos.

Finalmente, se construye una configuración en tres dimensiones para simular la formación de burbujas en una fase líquida mediante una interfaz porosa.

Se estudió la influencia de algunos parámetros de la combinación fluido bifásico y medio poroso, para determinar los parámetros que permiten la formación de burbujas. Los factores más importantes son la distribución de los osbtáculos que conforman el medio poroso, la hidrofilia del medio poroso, el gradiente de presión aplicado a la fase gaseosa para empujar de la zona de gas a la líquida y la temperatura del sistema. Los parámetros que más influyen el la formación de las burbujas son el ángulo de contacto de las paredes de la interfaz, el gradiente de presión aplicado y la temperatura a la que se encuentre el sistema.

Se cuenta con un código capaz de evolucionar el sistema bifásico en un medio poroso, que pasa las pruebas básicas y ha mostrado ser capaz de permitir el estudio de formación de burbujas. Por ello, se está en condiciones de ampliar el rango de parámetros que afectan el fenómeno. También se está en condiciones de generalizar el código para evolucionar un fluido de dos componentes, una en fase gaseosa y otro en la líquida para poder simular la formación de burbujas de CO_2 en agua.

Bibliografía

- [1] B. Metz, O. Davidson, H. de Coninck et al. “IPCC special report on carbon dioxide capture and storage”, jul. de 2005 (citado en la pág. 1).
- [2] H. (Koide y Z. Xue, “Carbon microbubbles sequestration: A novel technology for stable underground emplacement of greenhouse gases into wide variety of saline aquifers, fractured rocks and tight reservoirs”, *Energy Procedia*, vol. 1, n.º 1, págs. 3655-3662, 2009, Greenhouse Gas Control Technologies 9, ISSN: 1876-6102. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2009.02.162> (citado en la pág. 1).
- [3] T. Suekane, S. Soukawa, S. Iwatani et al. “Behavior of supercritical CO2 injected into porous media containing water”, *Energy*, vol. 30, n.º 11, págs. 2370-2382, 2005, International Symposium on CO2 Fixation and Efficient Utilization of Energy (CandE 2002) and the International World Energy System Conference (WESC-2002), ISSN: 0360-5442. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2003.10.026> (citado en la pág. 1).
- [4] H. Yamabe, K. Nakaoka, Z. Xue et al. “Simulation Study of CO2 Micro-bubble Generation Through Porous Media”, *Energy Procedia*, vol. 3, págs. 4635-4646, 2013, GHGT-11 Proceedings of the 11th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, 18-22 November 2012, Kyoto, Japan, ISSN: 1876-6102. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.06.372> (citado en las págs. 1, 51).
- [5] T. Krüger, K. H., K. A. et al. “The Lattice-Boltzmann Method: principles and practice”, 1.ª ed. Springer, 2017 (citado en las págs. 1, 6, 7, 15, 19, 20, 24, 36, 41, 46).
- [6] H. Huang, S. M. y L. X., “Multiphase lattice Boltzmann methods: theory and application”, 1.ª ed. Wiley Blackwell, 2015 (citado en las págs. 1, 47).
- [7] D. H. Rothman y J. M. Keller, “Immiscible cellular-automaton fluids”, *Journal of Statistical Physics*, vol. 52, n.º 3, págs. 1119-1127, ago. de 1988, ISSN: 1572-9613. DOI: [10.1007/BF01019743](https://doi.org/10.1007/BF01019743) (citado en las págs. 2, 42).
- [8] X. Shan y H. Chen, “Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components”, *Phys. Rev. E*, vol. 47, págs. 1815-1819, 3 mar. de 1993. DOI: [10.1103/PhysRevE.47.1815](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.1815) (citado en las págs. 2, 40, 42).
- [9] —, “Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation”, *Phys. Rev. E*, vol. 49, págs. 2941-2948, 4 abr. de 1994. DOI: [10.1103/PhysRevE.49.2941](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.49.2941) (citado en la pág. 2).
- [10] M. R. Swift, E. Orlandini, W. R. Osborn et al. “Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems”, *Phys. Rev. E*, vol. 54, págs. 5041-5052, 5 nov. de 1996. DOI: [10.1103/PhysRevE.54.5041](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.54.5041) (citado en la pág. 2).

- [11] Z. Chen, C. Shu, D. Tan et al. “Simplified multiphase lattice Boltzmann method for simulating multiphase flows with large density ratios and complex interfaces”, *Phys. Rev. E*, vol. 98, pág. 063314, 6 dic. de 2018. DOI: 10.1103/PhysRevE.98.063314 (citado en la pág. 2).
- [12] C. Pan, M. Hilpert y C. T. Miller, “Lattice-Boltzmann simulation of two-phase flow in porous media”, *Water Resources Research*, vol. 40, n.º 1, 2004. DOI: 10.1029/2003WR002120. eprint: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/2003WR002120> (citado en las págs. 2, 50).
- [13] L. Landau y L. E.M., “FLUID MECHANICS”, 2.ª ed. PERGAMONT PRESS, 1987 (citado en la pág. 5).
- [14] S. S., “The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond”, 1.ª ed. Oxford University Press, 2001 (citado en las págs. 7, 40, 41).
- [15] A. Mohamad, “Lattice Boltzmann Method : Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes”. Springer, 2011 (citado en la pág. 37).
- [16] B. G. C. y B. F. Zwick, “An explicit meshless point collocation solver for incompressible Navier-Stokes equations”, *arXiv e-prints*, jun. de 2019 (citado en la pág. 37).
- [17] R. Benzi, L. Biferale, M. Sbragaglia et al. “Mesoscopic modeling of a two-phase flow in the presence of boundaries: The contact angle”, *Phys. Rev. E*, vol. 74, pág. 021509, 2 ago. de 2006. DOI: 10.1103/PhysRevE.74.021509 (citado en las págs. 42, 46).
- [18] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski et al. “Lattice Boltzmann model of immiscible fluids”, *Phys. Rev. A*, vol. 43, págs. 4320-4327, 8 abr. de 1991. DOI: 10.1103/PhysRevA.43.4320 (citado en la pág. 42).
- [19] G. D. Xiaowen Shan, “Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction”, *Journal of Statistical Physics*, vol. 81, págs. 379-393, 1-2 oct. de 1995. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02179985> (citado en la pág. 43).
- [20] T. Inamuro, M. Yoshino y F. Ogino, “Lattice Boltzmann simulation of flows in a three-dimensional porous structure”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 29, n.º 7, págs. 737-748, 1999. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0363(19990415)29:7<737::AID-FLD813>3.0.CO;2-H. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/%28SICI%291097-0363%2819990415%2929%3A7%3C737%3A%3AAID-FLD813%3E3.0.CO%3B2-H> (citado en la pág. 50).