
Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Agradecimientos

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facili-

sis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Contenido

Resumen	IX
Abstract	XI
1. Introducción	1
2. El método de la ecuación de Boltzmann en redes	5
2.1. Introducción	5
2.2. La ecuación de transporte de Boltzmann	6
2.3. La ecuación de Boltzmann en redes	8
2.4. De la ecuación de Boltzmann en redes a la mecánica de fluidos	12
2.5. Condición de no deslizamiento y fuerzas de cuerpo externas	14
2.6. Transporte de partículas sólidas en la EBR	15
2.7. Conclusiones	19
3. Levitación acústica	21
3.1. Introducción	21
3.2. Antecedentes y teoría	22
3.3. Números adimensionales y dispositivo experimental	27
3.4. Levitación acústica	28
3.5. Conclusiones	39
4. Conclusiones	43
A. Validación del Método de la Ecuación de Boltzmann en Redes	47
A.1. Introducción	47
A.2. Onda de choque en una cavidad	48
A.3. Cilindro suspendido en un flujo Couette	49
A.4. Sedimentación de una partícula en una cavidad	50
A.5. Conclusiones	51

B. Dynamics of an acoustically levitated particle using the lattice Boltzmann method	53
B.1. abstract	53
B.2. Introduction	53
B.3. The lattice Boltzmann equation method	55
B.4. Dimensionless quantities and acoustic levitators	56
B.5. Numerical simulations	56
B.6. Concluding remarks	61

Lista de Figuras

2.1.	Espacio μ con N partículas de masa m	7
2.2.	Esquema de las velocidades \mathbf{c}_α para la malla $D2Q9$ con rapidezces 0, 1 y $\sqrt{2}$. La velocidad \mathbf{c}_0 se localiza en el centro.	11
2.3.	Esquema del rebote hacia atrás conocido como bounceback. Al tiempo $t + \Delta t/2$ las funciones de distribución se encuentran sobre la pared, y al tiempo $t + \Delta t$ invierten su dirección.	14
2.4.	Esquema del rebote hacia atrás a mitad del camino. Al tiempo $t + \Delta t/2$ las funciones de distribución que apuntan hacia la pared fantasma invierten su dirección para el tiempo $t + \Delta t$	15
2.5.	Partícula de radio $r = 5.5$ en la malla $D2Q9$. Los nodos correspondientes a la partícula sólida se marcan con un punto.	16
3.1.	(a) Levitador acústico de un eje con un reflector plano. La fuente del levitador se encuentra localizada en la parte superior de la cavidad; $B^* = 5.092$ y H^* puede variar. (b) Levitador acústico de un eje con un reflector redondeado con $W^* = 10.184$, $B^* = 5.092$, $R^* = 12.244$, $h_b^* = 0.1377$, y $h_a^* = 0.01028$. Para ambas cavidades, se fijaron los siguientes parámetros de EBR para todas las simulaciones numéricas $\tau = 0.6$, $\rho_f = 0.6$ y en un espacio bidimensional usando la malla $D2Q9$	28
3.2.	Velocidad máxima adimensional como función de la altura adimensional de la cavidad redondeada. Las velocidades se escalan con la velocidad máxima del primer modo resonante v_1 . Los máximos se encuentran en $H^*/\pi = 1.09$ y 2.14.	29
3.3.	(a) Amplitud de la oscilación de la velocidad escalada con la velocidad máxima y (b) amplitud de oscilación de la presión escalada con la presión inicial para la cavidad redondeada. La cantidad de movimiento agregado por la fuente acústica es $P_o^* = 1.6 \times 10^{-3}$. La frecuencia de la fuente acústica es $\omega_r = 0.019126$ para la cavidad redondeada correspondiente al segundo modo resonante.	29

- 3.4. Evolución de la posición vertical de una partícula sólida como función del tiempo en el segundo modo resonante en ausencia de gravedad en (a) la cavidad plana y (b) la cavidad redondeada, ambas con $P_o^* = 1.6 \times 10^{-3}$, $\rho_p/\rho_f = 2$, y $r^* = 0.25$. Las líneas horizontales representan la ubicación de los nodos de presión. 31
- 3.5. Posición vertical de la partícula para la cavidad plana y la redondeada. Ambas partículas oscilan con una frecuencia correspondiente a la de la fuente acústica. 31
- 3.6. Evolución de la posición vertical de una partícula sólida como función del tiempo en el segundo modo resonante en presencia de gravedad en (a) la cavidad plana y (b) la cavidad redondeada. Las simulaciones numéricas se realizaron con los mismos parámetros de las figuras 3.4 (a), (b) y agregando la presencia de un campo gravitacional externo. 32
- 3.7. Posición vertical de la partícula para la cavidad plana y la redondeada ambas en presencia de un campo gravitacional externo. Ambas oscilan con la frecuencia de la fuente acústica ω_p para la cavidad plana y ω_r para la cavidad redondeada. 32
- 3.8. Posición y desviación estándar vertical de la partícula variando la relación de densidades y manteniendo la cantidad de movimiento constante en (a) $P_o^* = 0.01$ para la cavidad plana y (b) $P_o^* = 0.0019$ para la redondeada. La pendiente de la línea ajustada es -0.001677 para la cavidad plana y -0.002274 para la cavidad redondeada. En (c) mostramos la velocidad máxima dentro de la cavidad en presencia de partícula para la cavidad redondeada con $P_o^* = 0.01$ 33
- 3.9. Posición vertical de la partícula sólida en función del tiempo en la cavidad plana para (a) $\rho_p/\rho_f = 8$, (b) $\rho_p/\rho_f = 40$ y (c) $\rho_p/\rho_f = 233.3$. En (b) y (c) observamos una segunda frecuencia de oscilación. 33
- 3.10. Espectros de potencia del movimiento vertical de la partícula sólida sobre el tiempo en la cavidad plana para (a) $\rho_p/\rho_f = 8$, (b) $\rho_p/\rho_f = 40$ y (c) $\rho_p/\rho_f = 233.3$. Los espectros de potencia corresponden a las oscilaciones reportadas en las figuras 3.9 (a), (b) y (c). En (b) podemos observar una segunda frecuencia $\omega = 0.000632$ y en (c) $\omega = 0.000472$ 33
- 3.11. Posición vertical de la partícula sólida sobre el tiempo en la cavidad redondeada para (a) $\rho_p/\rho_f = 2$, (b) $\rho_p/\rho_f = 50$, (c) $\rho_p/\rho_f = 100$ y (d) $\rho_p/\rho_f = 256$ 34
- 3.12. Espectro de potencia del movimiento vertical de la partícula sólida sobre el tiempo en la cavidad redondeada para (a) $\rho_p/\rho_f = 2$, (b) $\rho_p/\rho_f = 50$, (c) $\rho_p/\rho_f = 100$ y (d) $\rho_p/\rho_f = 256$. Los espectros de potencia corresponden a los de las figuras 3.11 (a), (b), (c) y (d). . 34

- 3.13. Posición vertical y desviación estándar en la dirección vertical como función de la cantidad de movimiento agregado P_o^* con $\rho_p/\rho_f = 50$ para la cavidad (a) plana y (b) redondeada. Para $P_o^* > 4 \times 10^{-3}$ la partícula comienza a oscilar horizontalmente, como mostramos en (c). Para la cavidad plana, el nodo de presión se mantiene constante en 1.6 y para la cavidad redondeada, indicamos la posición del nodo de presión por la línea con puntos en (b). 35
- 3.14. Posición vertical de la partícula sólida $\rho_p/\rho_f = 50$ sobre el tiempo en la cavidad plana para (a) $P_o^* = 4.45 \times 10^{-3}$, (b) $P_o^* = 6.25 \times 10^{-3}$ y (c) $P_o^* = 9.05 \times 10^{-3}$ 36
- 3.15. Espectro de potencia del movimiento vertical de la partícula sólida $\rho_p/\rho_f = 50$ sobre el tiempo en la cavidad plana para (a) $P_o^* = 4.45 \times 10^{-3}$, (b) $P_o^* = 6.25 \times 10^{-3}$ y (c) $P_o^* = 9.05 \times 10^{-3}$. Los espectros de potencia corresponden a las figuras 3.14 (a), (b) y (c). 36
- 3.16. Posición vertical de la partícula sólida $\rho_p/\rho_f = 50$ sobre el tiempo en la cavidad redondeada para (a) $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$ y (b) su espectro de potencia. 37
- 3.17. (a) Posición vertical y (b) horizontal sobre el tiempo para $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y (c) posición vertical y (d) horizontal sobre el tiempo para $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$ 37
- 3.18. Espectro de potencia del movimiento vertical de la partícula sólida $\rho_p/\rho_f = 50$ sobre el tiempo en la cavidad redondeada para (a) $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$, (b) $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y (c) $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. Los espectros corresponden al movimiento de las partículas mostradas en las figuras B.5 (a), 3.17 (a) y (c). 38
- 3.19. Trayectoria en el plano $x - y$ de la partícula sólida en la cavidad redondeada para (a) $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y (b) $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. Las trayectorias corresponden a las mostradas en las figuras 3.17 (a) y (c), respectivamente. 38
- 3.20. Amplitud de las oscilaciones en la presión y la velocidad de izquierda a derecha para (a) $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$, (b) $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y (c) $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$ 39
- 3.21. Posición de los nodos de presión como función de la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica P_o^* para la cavidad redondeada. 39
- A.1. Esquema del tubo bidimensional con la mitad izquierda a ρ_+ y la mitad derecha a ρ_- donde $\rho_+ > \rho_-$ y de largo L_x 48
- A.2. Evolución temporal del perfil de densidad. Para las condiciones iniciales de este problema $r_c = 0.457539$, $v_s = 0.712$ y $\rho_c = 0.457539$ 48
- A.3. Cada perfil de puntos representa $x - v_s t$, donde v_s es la velocidad de avance del frente supersónico y t es el tiempo transcurrido desde el comienzo del experimento. Para este caso $v_s = \sqrt{r_c c_s} = 0.712$. . 48

A.4. Esquema del problema de un cilindro infinito suspendido en un flujo cortante. El cilindro tiene un diámetro D , y la cavidad tiene una altura $h = 5D$ y $2h$ de ancha. El cilindro se coloca en el centro de la cavidad.	49
A.5. Velocidad angular adimensional para diferentes valores de Re . Los experimentos numéricos se llevaron a cabo en una cavidad con condiciones periódicas en las fronteras izquierda y derecha. La relación de aspecto $h/D = 5$, donde h es la altura de la cavidad y D el diámetro de la partícula.	49
A.6. (a) Velocidad angular adimensional en función del radio de la partícula y (b) error relativo escalado con valor reportado por Poe <i>et al</i> para $Re = 0.187$ y $H = 4D$ es $\Omega/\gamma = 0.4820$, representado por la línea.	49
A.7. Esquema del problema de sedimentación en una cavidad de ancho $W = 4r$ y alto H . La partícula, inicialmente en reposo, se coloca lejos del centro horizontal en la parte superior de la cavidad. La partícula se sedimenta bajo la acción de una fuerza de cuerpo externa.	50
A.8. Trayectoria de una partícula sólida en una cavidad para $Re = 1.33$ y $Re = 2.18$	51
A.9. Trayectoria de una partícula sólida en una cavidad para $Re = 3.87$ y $Re = 6.37$, correspondientes al segundo régimen. La partícula oscila ligeramente alrededor del centro para finalmente alcanzar una posición de equilibrio.	51
A.10. Trayectoria de una partícula sólida en una cavidad para $Re = 8.02$, correspondiente al tercer régimen. La amplitud de la oscilación de la partícula alrededor del centro se va reduciendo pero no desaparece.	51
A.11. Trayectoria de una partícula sólida en una cavidad para $Re = 28.76$, correspondiente al cuarto régimen. La partícula oscila fuertemente alrededor del centro manteniendo su amplitud todo el tiempo.	52
B.1. (a) Single axis acoustic levitator with a plane reflector. The vibrating source is located at the top of the cavity; $b^* = 5.092$. (b) Single axis acoustic levitator with a rounded reflector with $b^* = 5.092$, $B^* = 2b^*$, $R^* = 12.244$, $h_b^* = 0.1377$, $W^* = 30$, and $h_a^* = 0.01028$. For both cavities H^* is adjusted to the second resonant mode, $\tau = 0.6$, and $\rho_f = 0.6$	56
B.2. Vertical positions of particles with $r^* = 0.25$ and twice the density of the fluid in the presence of gravity for (a) the flat cavity and (b) the rounded one. The horizontal lines represent the vertical position of the pressure node. The oscillations in the flat cavity are barely visible. For both cavities $P_o^* = 1.6 \times 10^{-3}$. Lattices of 163×201 and 901×251 nodes were used for the flat and rounded cavity respectively.	57

B.3. Vertical stationary position y_s^* with its standard deviation as ρ_p/ρ_f varies for (a) the flat and (b) the rounded cavity. In the numerical simulations $P^* = 0.01$ for the flat cavity and $P^* = 0.0019$ for the rounded one. The slopes of the linear fit are (a) -0.00168 and (b) -0.00227	58
B.4. Vertical stationary position y_s^* with its standard deviation as P_o^* varies with $\rho_p/\rho_f = 50$ for the (a) flat and (b) rounded cavities. In the flat cavity, the pressure node is at $y^* = 1.6$. The curve in (b) shows the vertical position of the pressure node.	59
B.5. Vertical positions for (a) $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$ and (b) $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$. Vertical (c) and horizontal (d) positions of a particle with $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. In the three simulations, $\rho_p/\rho_f = 50$ for the rounded cavity.	60
B.6. Horizontal position of the pressure node with $\rho_p/\rho_f = 50$. We identify P_{oc}^* between 0.0032 and 0.0038.	61
B.7. Power spectra of the vertical motion shown in Fig. B.5 (a), continuous curve with $\omega_o = 0.019126$ and $\omega_1 = 0.0002913$ and the vertical motion shown in Fig. B.5 (c) with the same value of ω_o . . .	61

Resumen

A la posibilidad de balancear el peso de un objeto con la fuerza generada por una onda de sonido se le conoce como levitación acústica. Este fenómeno se ha usado para recrear ambientes de microgravedad, para el posicionamiento de muestras, mediciones de propiedades de líquidos sin contacto y estudio de estados metaestables en gotas. En la presente tesis realizamos simulaciones numéricas de la levitación acústica usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes para dos cavidades, una con un reflector plano y la segunda con un reflector redondeado. Los experimentos se realizan en el segundo modo resonante para cada cavidad. En el primer conjunto de simulaciones numéricas colocamos una partícula sólida redonda libre de moverse en ausencia de un campo gravitatorio adentro de una onda estacionaria en ambas cavidades. La partícula se dirigió al nodo de presión, donde la sumatoria fuerzas acústicas es cero. Al repetir las simulaciones numéricas, ahora con la presencia de un campo gravitatorio, la posición de la partícula se desplazó a un punto donde la fuerza acústica es igual al peso de la partícula. En el siguiente conjunto de simulaciones numéricas, mantuvimos constante la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica para ambas cavidades y variamos la relación de densidades entre la partícula y el fluido. Al aumentar la densidad de la partícula la posición de levitación se desplazó hacia abajo en línea recta para ambas cavidades. Además de la posición de equilibrio, medimos la desviación estándar, que se puede interpretar como la oscilación de la partícula alrededor de su posición de equilibrio. Para ciertos valores de la relación de densidades en la cavidad redondeada, la oscilación de la partícula alrededor de su posición de equilibrio crece. Este aumento de las oscilaciones puede ser causado por un desplazamiento de la frecuencia de resonancia debido a la presencia y posición de la partícula sólida. En otro conjunto de simulaciones numéricas para ambas cavidades, mantuvimos constante la relación de densidades y variamos la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica. Para la cavidad con el reflector plano, al aumentar la cantidad de movimiento la partícula se acerca al nodo de presión. Para la cavidad redondeada, la dinámica se vuelve más compleja, pues la posición del nodo de presión es función de la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica y para ciertos valores, se forman dos nodos de presión. En estos casos, la partícula oscila horizontalmente alrededor de dichos nodos, causando que el movimiento de la misma sea más complejo.

Abstract

The possibility that the acoustic force inside a cavity may balance the gravitational force on a particle is known as acoustic levitation. This has been used to recreate microgravity environments, sample positioning and noncontact density measurements. In this thesis, we carried out numerical simulations of acoustic levitation using the lattice Boltzmann method for two cavities, the first one with a flat reflector and the second with a rounded one. All numerical simulations were performed in the second resonant mode for each cavity. In the first set of numerical simulations we released a solid particle free to move in absence of a gravitational field inside a standing wave. The particle moves to the pressure node, where sum of forces is zero. Next, we added a gravitational field and the steady position of the particle shifted to a place where the acoustic force is equal to the weight of the particle. In the next set of numerical simulations, we kept constant the amount of momentum added by the acoustic source and varied the density ratio of the particle and fluid. When the density of the particle increases the levitation position shifted downward linearly for both cavities. We also measured the standard deviation, which is a measure of the particle oscillation around its equilibrium position. For some values of the density ratio for the rounded cavity, the standard deviation grows. This may be caused by a shift in the resonant frequency due to the presence and position of the solid particle. In another set of numerical simulations for both cavities, we kept constant the density ratio and varied the amount of momentum added by the acoustic source. For the cavity with the flat reflector, the particle moves toward the pressure node when the amount of momentum is increased. For the rounded cavity, the dynamic of the particle is more complex, now the position of the pressure node is a function of the amount of momentum, and the position and oscillation of the solid particle is also a function of the node pressure. For some values of the amount of momentum, two nodes pressure appear near the acoustic source. When this happens, the particle starts to oscillate horizontally around this nodes, making the dynamic even more complex.

Capítulo 1

Introducción

La levitación acústica permite suspender materia en un fluido usando una fuerza acústica generada por una onda estacionaria de sonido. En una onda estacionaria los nodos de presión y los nodos de velocidad se encuentran desfasados noventa grados, de tal forma que donde se encuentra un nodo de presión se localiza un antinodo de velocidad y viceversa. Es a partir de los trabajos de King [?] y Gor'kov [?] en 1932 y 1962, respectivamente, que los estudios sobre la fuerza acústica en una esfera sumergida en un campo acústico avanzaron rápidamente, al igual que las aplicaciones de esta nueva posibilidad de levitar cualquier tipo de material. Una onda acústica estacionaria ejerce una fuerza sobre un objeto, y esta fuerza es proporcional a las variaciones locales de la presión y velocidad así como al tamaño del objeto [?]. Los primeros trabajos sobre la fuerza acústica estuvieron enfocados a esferas sólidas y compresibles [?, ?, ?]. Una de las primeras aplicaciones directas de la levitación acústica fue la medición de la densidad del material levitado ya sea por su posición de levitación en un campo acústico previamente calibrado o por su frecuencia de oscilación en un ambiente de gravedad reducida o cero [?]. El crecimiento de cristales de proteínas en ambiente de microgravedad ha sido otra aplicación de gran interés. Primero se hace levitar una gota mediante un levitador electroestático y se usa un campo ultrasónico para provocar un movimiento angular en la gota durante las fases de nucleación y crecimiento del cristal. La rotación de la gota se induce para recrear un ambiente de gravedad cero, similar al del espacio y reducir la nucleación [?, ?]. La solidificación de cristales levitados ha permitido alcanzar temperaturas por abajo del punto de solidificación logrando estados metaestables o estructuras amorfas en algunos casos [?]. Otra aplicación de gran interés es la manipulación no intrusiva de partículas microscópicas. Se han usado trampas ópticas de un haz de luz, pero en algunas ocasiones el haz de luz perturba el objeto estudiado. En estos casos, se puede utilizar una trampa acústica formada por una onda acústica estacionaria y se ha logrado levitar partículas de 100 micrómetros. Las partículas levitadas no tienen

que ser transparentes, como en el caso de las trampas ópticas y con la ventaja de que se puede levitar prácticamente cualquier material [?]. La aplicación principal de los levitadores acústicos es suspender y posicionar muestras en el eje vertical, pero también es posible obtener un desplazamiento horizontal usando ondas acústicas en una superficie. De esta manera, se ha logrado una resolución en el movimiento del orden de los nanómetros en áreas de centímetros cuadrados para el posicionamiento de objetos [?]. También se ha logrado levitar objetos de 10 kilogramos sin la ayuda de un reflector. En estos casos, el objeto plano levitado flota a varios cientos de micrómetros sobre la fuente acústica [?].

Por otro lado, el método de la ecuación de Boltzmann en redes (EBR) se ha consolidado en los últimos años como una herramienta computacional confiable para resolver problemas de mecánica de fluidos [?, ?]. Usando el método de la EBR se han resuelto problemas clásicos como el de Rayleigh-Bénard [?, ?], formación de plumas térmicas en paredes parcialmente calentadas [?], magnetohidrodinámica [?], flujo a través de obstáculos [?, ?], sedimentación de partículas sólidas [?, ?, ?], propagación de ondas de sonido [?, ?], transporte de partículas sólidas en arterias [?, ?], sedimentación de partículas con gradientes de temperatura [?] y turbulencia [?]. En esta tesis, usamos el método de la EBR para el estudio de la dinámica de una partícula cilíndrica en una cavidad bidimensional. A pesar de ser tan importante la dinámica de la partícula, poca atención se le ha dado al estudio de la misma. La dinámica de la partícula puede ser la responsable de la formación de estructuras amorfas en el caso de solidificación usando la levitación acústica. La mayor parte de la literatura se centra en el estudio de la fuerza acústica sobre una esfera o un cilindro rígido inmovil. En este trabajo, abordamos dos retos para los métodos numéricos, la simulación numérica de un flujo compresible y la simulación de condiciones de frontera rígidas que dependen del tiempo.

En el capítulo 2 presentamos la teoría del método de la ecuación de Boltzmann en redes. En la sección 2.2 presentamos la ecuación de transporte de Boltzmann que describe el cambio temporal y espacial de la función de distribución de velocidades en un espacio definido. En la sección 2.3, obtenemos la ecuación de Boltzmann en redes discretizando el tiempo y el espacio para obtener la ecuación de evolución del modelo $D2Q9$. Demostramos, en la sección 2.4, que se pueden obtener las ecuaciones hidrodinámicas de un fluido compresible a partir de la EBR usando la expansión de Chapman-Enskog que consiste en una expansión alrededor del equilibrio y el uso de un formalismo multiescalas que plantea que los fenómenos hidrodinámicos ocurren a diferentes escalas temporales y espaciales. Una vez planteado el modelo de la EBR, describimos como implementar las condiciones de frontera para realizar las simulaciones numéricas en la sección 2.5, específicamente la implementación de la condición de no deslizamiento en las paredes y la manera de agregar cantidad de movimiento, condiciones esenciales para la simulación de la levitación acústica. En la sección 2.6 presentamos la técnica desarrollada por Aidun *et al* [?] para la interacción de partículas sólidas con el fluido para la EBR. La interacción de la partícula con el fluido se basa en resolver la segunda ley de Newton para el movimiento lineal y angular de la partícula.

En el capítulo 3 abordamos a la levitación acústica de una partícula circular sólida en un espacio bidimensional. Todos los resultados presentados los obtenemos

usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes. En la sección 3.2 presentamos la revisión bibliográfica de los trabajos relacionados con la levitación acústica de partículas esféricas y cilíndricas. Los números adimensionales y el dispositivo sobre el cual realizamos las simulaciones numéricas los presentamos en la sección 3.3, donde describimos las dos cavidades usadas en las simulaciones numéricas. En la sección 3.4, reportamos los resultados de las simulaciones numéricas de la levitación acústica para una cavidad con un reflector plano y para otra cavidad con un reflector redondeado con los parámetros geométricos reportados por Xie y Wei [?]. En el estudio de la levitación acústica hay muchos parámetros que se deben tomar en cuenta como geometría del levitador, radio de la partícula levitada, relación de densidades entre el fluido y la partícula e intensidad del campo acústico. En estas dos cavidades, realizamos dos conjuntos de simulaciones. En el primer conjunto, mantenemos constante la intensidad del campo acústico y variamos la relación de densidades entre el fluido y la partícula. Para el segundo conjunto, mantenemos fija la relación de densidades y variamos la intensidad del campo acústico. En este segundo conjunto de simulaciones numéricas, para la cavidad redondeada, la partícula presenta un comportamiento complejo que puede ser caótico, mostrado en la sección 3.5.

En el capítulo 4 presentamos las conclusiones generales de este trabajo. Antes de terminar, en el apéndice A, presentamos la validación del programa con el cual realizamos las simulaciones numéricas. Para esto, estudiamos tres problemas, una onda de choque en un tubo, presentado en la sección A.2, un cilindro suspendido en un flujo de Couette en la sección A.3 y en la sección A.4 el problema de sedimentación de una partícula circular en un canal estrecho. Al comparar los resultados obtenidos en la EBR con los reportados en la literatura, nos aseguramos que el método de la EBR ha sido implementado correctamente y que tenemos un programa listo para simular problemas de fluidos compresibles en interacción con una partícula sólida.

Capítulo 2

El método de la ecuación de Boltzmann en redes

2.1. Introducción

El método de la ecuación de Boltzmann en redes (EBR) ha mostrado en los últimos años a nosotros, ser una herramienta computacional confiable para realizar simulaciones de problemas de hidrodinámica [?, ?]. Con la EBR se han simulado problemas clásicos como el de Rayleigh–Bénard [?, ?], magnetohidrodinámica [?], flujo a través de obstáculos [?, ?], sedimentación de partículas sólidas [?, ?, ?], propagación de ondas de sonido [?, ?] y turbulencia [?]. En la presente tesis presentamos resultados de la simulación numérica de la levitación de una partícula circular bidimensional en un campo acústico usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes.

En este capítulo presentamos brevemente el método de la EBR partiendo de la ecuación de transporte de Boltzmann. Ésta describe la evolución temporal de la función de distribución de velocidades de una partícula de un gas diluido. Sabemos que por un método perturbativo de la función de distribución en equilibrio, podemos obtener las ecuaciones de la dinámica de fluidos, por lo que surgió la idea de usar la ecuación de transporte de Boltzmann como una herramienta computacional para el estudio de flujos [?, ?, ?]. Para esto es necesario discretizar la función de distribución en el espacio, el espacio de velocidades y el tiempo, con lo que se obtiene el método de la EBR. En la sección 2.2 presentamos la ecuación de transporte de Boltzmann con el término de colisión y la hipótesis de caos molecular establecida por Boltzmann. En la sección 2.3 presentamos la ecuación de transporte de Boltzmann discretizada junto con la función de equilibrio para un espacio de dos dimensiones, que será el usado para el desarrollo de esta tesis. Demostramos en la sección 2.4 que podemos llegar a las ecuaciones de la dinámica de fluidos para un fluido compresible a partir

de la ecuación de Boltzmann en redes. Una vez justificado el método de la EBR presentamos, en la sección 2.5, las condiciones de frontera necesarias para simular la levitación acústica. En la siguiente sección describimos lo necesario para simular partículas sólidas en interacción con el fluido para la EBR siguiendo implementación de la interacción entre el fluido y la partícula desarrollada por Aidun *et al* [?]. Finalmente terminamos el capítulo con algunas conclusiones.

2.2. La ecuación de transporte de Boltzmann

Si consideramos un gas monoatómico formado por N partículas cada una con masa m y confinadas en un volumen V , el estado del gas al tiempo t está determinado por la posición \mathbf{r} y velocidad \mathbf{v} de cada una de las partículas. Dicho gas lo podemos representar en un espacio de seis dimensiones, tres para la velocidad y las tres restantes para la posición, conocido como el espacio μ , que mostramos esquemáticamente en la figura 2.1. La ecuación de transporte de Boltzmann describe el cambio temporal y espacial de la función de distribución de velocidades f en el espacio μ que definimos como

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v = \begin{cases} \text{número promedio de partículas que al tiempo } t \text{ se encuentran} \\ \text{en un elemento de volumen } d^3r \text{ alrededor de } \mathbf{r} \text{ con} \\ \text{velocidades } d^3v \text{ alrededor de } \mathbf{v}. \end{cases} \quad (2.1)$$

En ausencia de colisiones, una partícula que se encuentra en (\mathbf{r}, \mathbf{v}) al tiempo t se encontrará en $(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v} + (\mathbf{F}/m)\delta t)$ al tiempo $t + \delta t$, siendo \mathbf{F} una fuerza externa actuando sobre el gas. Entonces podemos escribir

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v = f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v} + (\mathbf{F}/m)\delta t, t + \delta t) d^3r' d^3v'. \quad (2.2)$$

Si δt es peque no se puede demostrar que [?]

$$d^3r d^3v = d^3r' d^3v', \quad (2.3)$$

por lo que la ecuación (2.2) la podemos escribir como

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v} + (\mathbf{F}/m)\delta t, t + \delta t). \quad (2.4)$$

Al tomar en cuenta las colisiones entre partículas, la diferencia entre las funciones de distribución mostrada en la ecuación (2.4) ya no es cero, por lo que obtenemos

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v} + (\mathbf{F}/m)\delta t, t + \delta t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} \delta t, \quad (2.5)$$

donde el lado derecho en la ecuación anterior es el término de colisión. Expandiendo en series de Taylor el lado izquierdo de la ecuación (2.5) a primer orden en δt obtenemos

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col}, \quad (2.6)$$

Figura 2.1: Espacio μ con N partículas de masa m .

donde

$$\nabla_{\mathbf{r}} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \nabla_{\mathbf{v}} = \left(\frac{\partial}{\partial u}, \frac{\partial}{\partial v}, \frac{\partial}{\partial w} \right), \quad (2.7)$$

x, y y z se refieren a los tres ejes espaciales y u, v y w las componentes de la velocidad para cada uno de los ejes, respectivamente. La densidad de partículas n , la velocidad \mathbf{u} y la energía térmica ε son momentos de la función de distribución

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v \quad (2.8)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n} \int \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v. \quad (2.9)$$

y

$$\varepsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n} \int \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v, \quad (2.10)$$

respectivamente, donde $\rho = nm$ es la densidad de masa. Boltzmann supuso que el gas es diluído por lo que su comportamiento termodinámico debe corresponder a un gas ideal. Por ello, puede definirse una temperatura local a partir de

$$\varepsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{D}{2} nkT, \quad (2.11)$$

donde D es la dimensión espacial, T la temperatura local y k la constante de Boltzmann.

Boltzmann encontró una forma explícita para el término de colisión que es

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} = \int \sigma(\Omega) d\Omega \int d^3v_2 |\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1| (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) \quad (2.12)$$

donde $\sigma(\Omega)$ es la sección diferencial de choque, Ω es el ángulo sólido de dispersión para la colisión entre dos partículas f_1, f_2 con velocidades \mathbf{v}_1 y \mathbf{v}_2 que tienen velocidades \mathbf{v}'_1 y \mathbf{v}'_2 después de la colisión, respectivamente y f'_1 y f'_2 son las funciones de distribución después de la colisión. Para llegar a esta ecuación Boltzmann consideró un gas de partículas con colisiones en las cuales se conserva la masa, la cantidad de movimiento y la energía. Además usó la hipótesis de caos molecular la cual establece la independencia estadística de las colisiones binarias.

Se puede demostrar que una condición necesaria y suficiente para alcanzar el equilibrio termodinámico en el cual la función de distribución no dependa del tiempo es que

$$f'_1 f'_2 = f_1 f_2 = 0. \quad (2.13)$$

De aquí obtenemos la función de distribución de velocidades en equilibrio, conocida como la función de distribución de Maxwell-Boltzmann dada por

$$f^{eq}(\mathbf{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{D/2} \exp \left(-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2kT} \right). \quad (2.14)$$

2.3. La ecuación de Boltzmann en redes

En esta sección derivamos la ecuación de Boltzmann en redes a partir de la ecuación de transporte de Boltzmann con la aproximación de Bhatnagar, Groos y Krook (BGK), discretizando el tiempo y el espacio de velocidades para obtener la ecuación de Boltzmann en redes para el espacio bidimensional con nueve velocidades conocido como $D2Q9$.

La ecuación de transporte de Boltzmann es

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col}, \quad (2.15)$$

donde $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ es la función de distribución y \mathbf{v} es la velocidad microscópica.

Tomamos la ecuación (2.5) en ausencia de fuerzas de cuerpo externas obtenemos

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta_t, \mathbf{v}, t + \delta_t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} \delta_t, \quad (2.16)$$

y reemplazamos la función de colisión por un relajamiento local al equilibrio dado por la aproximación BGK [?, ?]

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} = -\frac{1}{\tau} [f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)] \quad (2.17)$$

donde τ es el tiempo de relajación adimensional. Las ecuaciones (2.16) y (2.17) forman la ecuación de evolución de las funciones de distribución discretizada en el tiempo.

Si consideramos que la velocidad del gas es cercana a cero, a la función de distribución de Maxwell-Boltzmann la podemos escribir en términos de potencias de \mathbf{u} como

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi kT)^{D/2}} \exp(-\mathbf{v}^2/2kT) \exp\left(\frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})}{kT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2kT}\right) \quad (2.18)$$

y realizando una expansión en series de Taylor alrededor de $\mathbf{u} = 0$

$$f^{eq} = 1 + \nabla f^{eq}(0, 0) \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{H}(0, 0) (\mathbf{u})^T + \dots \quad (2.19)$$

donde

$$\nabla f^{eq}(0, 0) \cdot \mathbf{u} = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{kT} \quad (2.20)$$

y $(\mathbf{u})^T$ es la matriz traspuesta de \mathbf{u} y \mathbf{H} es el hessiano dado por

$$\mathbf{H}(0, 0) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{kT} + \left(\frac{v_x}{kT}\right)^2 & \left(\frac{v_x}{kT}\right)\left(\frac{v_y}{kT}\right) \\ \left(\frac{v_y}{kT}\right)\left(\frac{v_x}{kT}\right) & -\frac{1}{kT} + \left(\frac{v_y}{kT}\right)^2 \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

donde v_x y v_y son los componentes horizontal y vertical de \mathbf{v} . Evaluando los términos hasta orden $O(\mathbf{u}^2)$ obtenemos la aproximación para números de Mach bajos

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi kT)^{D/2}} \exp\left(\frac{-\mathbf{v}^2}{2kT}\right) \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{kT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(kT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2kT} \right]. \quad (2.22)$$

Los momentos hidrodinámicos de la función de equilibrio los podemos calcular con la siguiente integral

$$\begin{aligned}
 I &= \int \psi(\mathbf{v}) f^{eq} d^2v \\
 &= \frac{\rho}{(2\pi kT)^{D/2}} \int \psi(\mathbf{v}) \exp\left(\frac{-\mathbf{v}^2}{2kT}\right) \\
 &\quad \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{kT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(kT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2kT} \right] d^2v.
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

donde $\psi(\mathbf{v})$ es un polinomio de \mathbf{v} . La integral anterior tiene la forma

$$\int e^{-x^2} \psi(x) dx, \tag{2.24}$$

por lo que puede ser calculada numéricamente usando una cuadratura de Gauss–Hermite

$$\int \psi(\mathbf{v}) f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \psi(\mathbf{v}_{\alpha}) f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_{\alpha}, t), \tag{2.25}$$

donde W_{α} son los coeficientes de la cuadratura Gauss–Hermite y \mathbf{v}_{α} es el conjunto de velocidades discretas. Ahora la masa y la cantidad de movimiento las podemos escribir como

$$\rho(\mathbf{r}, t) = m \sum_{\alpha} W_{\alpha} f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_{\alpha}, t), \tag{2.26}$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} W_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_{\alpha}, t) \tag{2.27}$$

y para la energía

$$\varepsilon = \frac{m}{2n} \sum_{\alpha} W_{\alpha} |\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{u}|^2 f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_{\alpha}, t). \tag{2.28}$$

El polinomio $\psi(\mathbf{v})$ tiene la forma

$$\psi_{m,n}(\mathbf{v}) = v_x^m v_y^n. \tag{2.29}$$

Con esto, la ecuación (2.23) es

$$\begin{aligned}
 I &= \int \psi_{m,n}(\mathbf{v}) f^{eq} d^2v \\
 &= \frac{\rho}{2\pi kT} \left[\int \int v_x^m v_y^n \exp(-\eta^2) \left(1 - \frac{u^2}{2kT} \right) dv_x dv_y \right. \\
 &\quad + \int \int v_x^m v_y^n \exp(-\eta^2) \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{kT} \right) dv_x dv_y \\
 &\quad \left. + \int \int v_x^m v_y^n \exp(-\eta^2) \left(\frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(kT)^2} \right) dv_x dv_y \right],
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

donde $\eta = v/\sqrt{2kT}$. Al evaluar cada uno de los términos anteriores obtenemos

$$\begin{aligned}
 I &= \int \psi_{m,n}(\mathbf{v}) f^{eq} d^2v \\
 &= \frac{\rho}{\pi} \left(\sqrt{2kT} \right)^{m+n} \left[\left(1 - \frac{\mathbf{u}^2}{2kT} \right) I_m I_n \right. \\
 &\quad + \frac{2(u_x I_{m+1} I_n + u_y I_m I_{n+1})}{\sqrt{2kT}} \\
 &\quad \left. + \frac{u_x^2 I_{m+2} I_n + 2u_x u_y I_{m+1} I_{n+1} + u_y^2 I_m I_{n+2}}{kT} \right], \quad (2.31)
 \end{aligned}$$

donde

$$I_m = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\eta^2} \eta^m d\eta. \quad (2.32)$$

La ecuación anterior la podemos escribir como la sumatoria de términos de η con sus pesos respectivos

$$I_m = \sum_{j=1}^3 \omega_j \eta_j^m, \quad (2.33)$$

donde consideramos la suma hasta tercer orden. Al evaluar las sumatorias de la ecuación (2.33) en la ecuación (2.31) obtenemos

$$I = \frac{\rho}{\pi} \sum_{i,j=1}^3 \omega_i \omega_j \psi(\mathbf{v}_{i,j}) \left(1 + \frac{\mathbf{v}_{i,j} \cdot \mathbf{u}}{kT} + \frac{(\mathbf{v}_{i,j} \cdot \mathbf{u})^2}{2(kT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2kT} \right). \quad (2.34)$$

De la ecuación anterior podemos identificar a la función de equilibrio. Para el caso particular de $\psi(\mathbf{v}) = 1$, la ecuación (2.25)

$$\begin{aligned}
 I &= \sum_{\alpha} W_{\alpha} f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \\
 &= \frac{\rho}{\pi} \sum_{i,j=1}^3 \omega_i \omega_j \left(1 + \frac{\mathbf{v}_{i,j} \cdot \mathbf{u}}{kT} + \frac{(\mathbf{v}_{i,j} \cdot \mathbf{u})^2}{2(kT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2kT} \right) \\
 &= \sum_{i,j=1}^3 f_{i,j}^{eq}, \quad (2.35)
 \end{aligned}$$

donde

$$f_{i,j}^{eq} = \frac{\omega_i \omega_j}{\pi} \rho \left(1 + \frac{\mathbf{v}_{i,j} \cdot \mathbf{u}}{kT} + \frac{(\mathbf{v}_{i,j} \cdot \mathbf{u})^2}{2(kT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2kT} \right). \quad (2.36)$$

Para determinar los valores de $\omega_i \omega_j$, empleamos los polinomios de Hermite calculando los valores de η_i . Los polinomios son de la forma

$$\mathbf{H}(\eta) = (-1)^n e^{\eta^2} \frac{d^n}{d\eta^n} e^{-\eta^2}, \quad (2.37)$$

Figura 2.2: Esquema de las velocidades \mathbf{c}_α para la malla $D2Q9$ con rapidezces 0, 1 y $\sqrt{2}$. La velocidad \mathbf{c}_0 se localiza en el centro.

y al resolver para $n = 3$

$$\mathbf{H}_3(\eta) = 8\eta^3 - 12\eta, \quad (2.38)$$

por lo que $\eta_1 = -\sqrt{3/2}$, $\eta_2 = 0$ y $\eta_3 = \sqrt{3/2}$. Finalmente, para encontrar los pesos, utilizamos la formula de Hermite

$$\omega_i = \frac{2^{n+1}n\sqrt{\pi}}{[H'_n(\eta_i)]^2}, \quad (2.39)$$

donde H'_n es la derivada del polinomio de Hermite de orden n . Para $n = 3$

$$H'_3(\eta) = 24\eta^2 - 12, \quad (2.40)$$

entonces $H'_3(\eta_1) = 24$, $H'_3(\eta_2) = -12$ y $H'_3(\eta_3) = 24$, por lo tanto

$$\omega_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}, \quad \omega_2 = \frac{2\sqrt{\pi}}{3} \quad \text{y} \quad \omega_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}. \quad (2.41)$$

. Entonces

$$w_\alpha = \frac{\omega_i \omega_j}{\pi} = \begin{cases} 4/9, & i = j = 2, & \alpha = 0 \\ 1/9, & i = 1, j = 2, \dots, & \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ 1/36, & i = j = 1, \dots, & \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (2.42)$$

la función de distribución de equilibrio la podemos escribir como

$$f_\alpha^{eq}(\mathbf{r}, t) = w_\alpha \rho \left(1 + \frac{3(c_\alpha \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(c_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right), \quad (2.43)$$

donde

$$c_\alpha = \begin{cases} (0, 0) & \alpha = 0 \\ (\cos \theta_\alpha, \sin \theta_\alpha)c, & \theta_\alpha = (\alpha - 1)\pi/2, & \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ \sqrt{2}(\cos \theta_\alpha, \sin \theta_\alpha)c, & \theta_\alpha = (\alpha - 5)\pi/2 + \pi/4, & \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (2.44)$$

y $c_s^2 = c^2/3$ es la velocidad del sonido y $c = \delta_x/\delta_t$, donde δ_x es la distancia entre nodo y nodo y usualmente es unitaria y δ_t es el intervalo de tiempo discretizado, también unitario. Entonces la ecuación de Boltzmann en redes es

$$f_\alpha(\mathbf{r} + \delta t \mathbf{c}_\alpha, t + \delta t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau} (f_\alpha^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t)) \quad (2.45)$$

donde $\alpha = 0, \dots, 8$ para la malla $D2Q9$, que mostramos en la figura 2.2.

2.4. De la ecuación de Boltzmann en redes a la mecánica de fluidos

En esta sección presentamos brevemente la deducción de las ecuaciones de Navier–Stokes a partir de la ecuación de evolución de la EBR usando la expansión de Chapman–Enskog [?], que es una expansión usando un formalismo multiescalas para el tiempo y el espacio. Primero realizamos una expansión en series de Taylor, sólo al término del lado izquierdo de la ecuación (2.45)

$$\begin{aligned} f_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \delta t, t + \delta t) &= f_\alpha(\mathbf{r}, t) + \epsilon \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha(\mathbf{r}, t) + \epsilon \frac{\partial}{\partial t} f_\alpha(\mathbf{r}, t) \\ &+ \epsilon^2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha \nabla^2 f_\alpha(\mathbf{r}, t) + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla \frac{\partial f_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \\ &+ O(\epsilon^3), \end{aligned} \quad (2.46)$$

donde $\epsilon = l/L$ es el parámetro de Knudsen definido como el camino libre medio l entre una longitud característica L . A segundo orden ϵ^2 tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha + \epsilon \left(\frac{1}{2} \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha \nabla^2 f_\alpha + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \right) \\ = \frac{f_\alpha - f_\alpha^{eq}}{\epsilon \tau}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Como dijimos anteriormente, para derivar las ecuaciones hidrodinámicas empleamos un formalismo multiescalas en el tiempo y el espacio

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots \quad \text{y} \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}, \quad (2.48)$$

respectivamente, y como veremos más adelante es suficiente a primer orden en el tiempo y a orden cero para el espacio para recuperar las ecuaciones hidrodinámicas. El significado físico de las expansiones anteriores es que el relajamiento local al equilibrio se presenta en una escala de tiempo ϵ^0 , mientras que las perturbaciones que se propagan como ondas de sonido lo hacen en una escala temporal ϵ^{-1} y los efectos difusivos y advectivos se presentan en una escala temporal ϵ^{-2} . De la misma manera, expandemos la función de distribución alrededor del equilibrio local

$$f_\alpha = f_\alpha^{eq} + \epsilon f_\alpha^{(1)} + \epsilon^2 f_\alpha^{(2)} + O(\epsilon^3). \quad (2.49)$$

Los momentos de la función de equilibrio son

$$\sum_\alpha f_\alpha^{eq} = \rho, \quad \sum_\alpha f_\alpha^{eq} \mathbf{c}_\alpha = \rho \mathbf{u}. \quad (2.50)$$

Por otro lado, las funciones $f_\alpha^{(k)}$ para $k = 1, 2$ cumplen que

$$\sum_\alpha f_\alpha^{(k)} = 0, \quad \sum_\alpha f_\alpha^{(k)} \mathbf{c}_\alpha = 0. \quad (2.51)$$

De la ecuación (2.47), sustituimos el formalismo multiescalas y la expansión de la función de equilibrio dados por las ecuaciones (2.48) y (2.49) y recolectamos términos a orden ϵ^0 para obtener

$$\frac{\partial f_\alpha^{eq}}{\partial t_1} + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f_\alpha^{eq} = -\frac{f_\alpha^{(1)}}{\tau}, \quad (2.52)$$

y a orden ϵ^1

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial t_1} + \frac{\partial f_\alpha^{eq}}{\partial t_2} + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f_\alpha^{(1)} + \frac{1}{2} \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 f_\alpha^{eq} \\ + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} \frac{\partial f_\alpha^{eq}}{\partial t_1} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_\alpha^{eq}}{\partial t_1^2} = -\frac{f_\alpha^{(2)}}{\tau}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Multiplicamos la ecuación (2.52) primero por $\partial/\partial t_1$ y después por $\mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1}$ y obtenemos

$$\frac{\partial^2 f_\alpha^{eq}}{\partial t_1^2} + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} \frac{\partial f_\alpha^{eq}}{\partial t_1} = -\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\tau \partial t_1} \quad (2.54)$$

y

$$\mathbf{c}_\alpha \nabla_{\mathbf{r}_1} \frac{\partial f_\alpha^{eq}}{\partial t_1} + \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 f_\alpha^{eq} = -\frac{1}{\tau} \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1}, \quad (2.55)$$

respectivamente. Sumamos las ecuaciones (2.54), (2.55) y multiplicamos por $\frac{1}{2}$

$$\frac{1}{2} \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 f_\alpha^{eq} + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} \frac{\partial f_\alpha^{eq}}{\partial t_1} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_\alpha^{eq}}{\partial t_1^2} = -\frac{1}{2\tau} \left(\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial t_1} + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f_\alpha^{(1)} \right). \quad (2.56)$$

Ahora, a la ecuación (2.53) le restamos la ecuación (2.56)

$$\frac{\partial f_\alpha^{eq}}{\partial t_2} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial t_1} + \mathbf{c}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f_\alpha^{(1)} \right] = -\frac{f_\alpha^{(2)}}{\tau}. \quad (2.57)$$

Para obtener la ecuación de conservación de masa, multiplicamos la ecuación (2.52) por ϵ , realizamos la suma sobre todas las direcciones \sum_α y usamos otra vez el formalismo multiescalas para obtener

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \rho \mathbf{u} = 0. \quad (2.58)$$

La ecuación de la cantidad de movimiento la obtenemos multiplicando la ecuación (2.52) por \mathbf{c}_α y a la ecuación (2.57) por $\epsilon \mathbf{c}_\alpha$, combinamos ambas ecuaciones y sumamos sobre todas las direcciones \sum_α para obtener

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \Pi = 0, \quad (2.59)$$

donde Π es el tensor de momento y tiene la forma

$$\Pi = \sum_\alpha \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha \left[f_\alpha^{eq} + \epsilon \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) f_\alpha^{(1)} \right]. \quad (2.60)$$

Figura 2.3: Esquema del rebote hacia atrás conocido como bounceback. Al tiempo $t + \Delta t/2$ las funciones de distribución se encuentran sobre la pared, y al tiempo $t + \Delta t$ invierten su dirección.

Al desarrollar la sumatoria sobre las direcciones, el tensor de flujo se puede escribir como

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \Pi = (\mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{r}})(\rho \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{r}} p - \nu \nabla_{\mathbf{r}}(\rho \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{u}), \quad (2.61)$$

donde $p = c_s^2 \rho$ es la presión dada por la ecuación de estado y $\nu = c_s^2(\tau - 1/2)$ es la viscosidad. Finalmente las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento para un fluido compresible obtenidas a partir de la ecuación de Boltzmann en redes son

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.62)$$

y

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{r}})\mathbf{u} = -\nabla_{\mathbf{r}} p + \nu \nabla_{\mathbf{r}}(\rho \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{u}) \quad (2.63)$$

respectivamente.

2.5. Condición de no deslizamiento y fuerzas de cuerpo externas

Como comentamos en la sección 2.3, una vez que tenemos la ecuación de evolución para la ecuación de transporte de Boltzmann, el siguiente paso es establecer las condiciones de frontera adecuadas para el problema a simular. La evolución de la ecuación (2.45) la llevamos a cabo en dos pasos, el relajamiento al equilibrio local, dado por el término del lado derecho, y la propagación de las funciones de distribución a sus vecino cercanos, como lo indica el término del lado izquierdo. Sin embargo, podemos conceptualizar que entre el tiempo t y $t + \Delta t/2$ realizamos la relajación al equilibrio local y entre el tiempo $t + \Delta t/2$ y $t + \Delta t$ realizamos la propagación. Es en esta segunda parte cuando aplicamos la condición de frontera de no deslizamiento en las paredes. Para saber en que lugares debemos aplicar la propagación o la condición de no deslizamiento, donde el fluido tiene la velocidad de la pared, es necesario distinguir los nodos de la frontera sólida con los nodos que son fluido.

El rebote hacia atrás es una condición de frontera básica para simular la condición de no deslizamiento en paredes. En la figura 2.3 esquematizamos el proceso. Esta técnica, como mencionamos en el párrafo anterior, se aplica entre el tiempo $t + \Delta t/2$ y $t + \Delta t$ y consiste en invertir la dirección de las funciones de distribución que se encuentran en los nodos de la frontera sólida y que apuntan hacia adentro de la pared, como mostramos en la figura. Las funciones de distribución horizontales, velocidades \mathbf{c}_1 y \mathbf{c}_3 así como \mathbf{c}_0 , pueden o no invertirse y no afecta ya que estas funciones no interactúan con las funciones de distribución de los nodos interiores.

Figura 2.4: Esquema del rebote hacia atrás a mitad del camino. Al tiempo $t + \Delta t/2$ las funciones de distribución que apuntan hacia la pared fantasma invierten su dirección para el tiempo $t + \Delta t$.

Otro esquema para recrear la condición de no deslizamiento en las paredes es el rebote hacia atrás a mitad del camino. La primera diferencia del rebote hacia atrás a mitad del camino con el explicado anteriormente, es que los nodos correspondientes a la pared no existen realmente, por lo que suelen llamárseles nodos fantasmas. El proceso comienza al tiempo $t + \Delta t/2$, cuando las funciones de distribución han relajado al equilibrio con la función de colisión. Para el tiempo $t + \Delta t$ sólo las funciones de distribución que apuntan hacia la pared fantasma se invierten mientras que el resto se propagan. Dada la dinámica del rebote hacia atrás a mitad del camino, se puede decir que la pared se encuentra a la mitad del camino entre la posición del nodo fluido y el nodo fantasma de la pared.

Si deseamos crear una fuente de movimiento en un fluido, lo podemos lograr agregando cantidad de movimiento de manera local. Esto lo logramos agregando un término a la ecuación de evolución de la EBR,

$$f_\alpha(\mathbf{r} + \Delta t \mathbf{c}_\alpha, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{\Delta t}{\tau} (f_\alpha^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t)) + F_\alpha, \quad (2.64)$$

donde F_α es la cantidad de movimiento que agregamos en el sitio \mathbf{r} deseado en cada una de las direcciones. Este término tiene la forma

$$F_\alpha = 3w_\alpha (F_0 c_{\alpha x} + F_0 c_{\alpha y}), \quad (2.65)$$

donde F_0 es la cantidad de movimiento agregado y $(c_{\alpha x}, c_{\alpha y})$ indica que la cantidad de movimiento se agrega en el eje x ó y . Podemos demostrar que este término no modifica la densidad del fluido

$$\sum_\alpha F_\alpha = \sum_\alpha 3w_\alpha c_{\alpha x} F_0 + \sum_\alpha 3w_\alpha c_{\alpha y} F_0 = 0. \quad (2.66)$$

La contribución a la cantidad de movimiento para los ejes x y y es

$$\sum_\alpha c_{\alpha x} F_\alpha = 3F_0 \sum_\alpha c_{\alpha x}^2 w_\alpha = 3F_0 \left(\frac{2}{9} + \frac{4}{36} \right) = F_0, \quad (2.67)$$

y

$$\sum_\alpha c_{\alpha y} F_\alpha = 3F_0 \sum_\alpha c_{\alpha y}^2 w_\alpha = 3F_0 \left(\frac{4}{36} + \frac{2}{9} \right) = F_0, \quad (2.68)$$

respectivamente.

2.6. Transporte de partículas sólidas en la EBR

En esta sección presentamos la implementación de partículas sólidas en movimiento para el método de la ecuación de Boltzmann en redes. Ladd [?] fue el primero

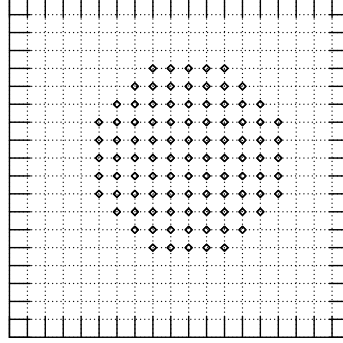


Figura 2.5: Partícula de radio $r = 5.5$ en la malla $D2Q9$. Los nodos correspondientes a la partícula sólida se marcan con un punto.

en desarrollar un método basado en la EBR para el transporte de partículas sólidas suspendidas en un fluido. El método combina la dinámica newtoniana de partículas sólidas con la EBR para el fluido. La propuesta de Ladd requiere que el fluido cruce la frontera de la partícula sólida, lo que limita la relación de densidad entre la partícula y el fluido. Más tarde Aidun [?] presentó un método que supera estos inconvenientes. En esta sección, presentamos solamente el método desarrollado por Aidun que es el utilizado en todas las simulaciones numéricas de esta tesis.

El primer paso consiste en dibujar una partícula dentro de la malla $D2Q9$. En la figura 2.5 mostramos un ejemplo de una partícula circular de radio $r = 5.5$. Los radios deben ser de la forma $r = n + 0.5$ donde n es un número entero positivo. Esto se debe a que en las fronteras de la partícula sólida con el fluido se utiliza el rebote hacia atrás a mitad del camino, por lo que la frontera se encuentra entre nodo y nodo. Ahora comenzamos a llamar a los nodos que se encuentran dentro de la partícula como nodos del sólido (NS) y nodos del fluido (NF) a aquellos que corresponden al fluido como su nombre lo indica. Podemos decir que dos nodos cualquiera se conectan mediante un enlace, asociado a la velocidad \mathbf{c}_α y estos enlaces los podemos clasificar en dos grupos. El primer grupo, enlaces entre fluido y fluido (EFF), es aquel que conecta a los nodos ubicados en \mathbf{r} y $\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t$ y que ambos son fluido. El segundo grupo de enlaces, llamados enlaces de frontera entre fluido y sólido (EFS) es aquel que conecta a los nodos ubicados en \mathbf{r} y $\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t$ y que al menos uno de los dos corresponde a un NS. Entonces, como dijimos anteriormente, la pared del sólido se encuentra a la mitad del camino de los EFS. La condición de no deslizamiento, usando el rebote hacia atrás a mitad del camino, es impuesta a todos los nodos adyacentes a la pared y la podemos escribir como

$$f_\alpha(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \begin{cases} f_{\alpha'}(\mathbf{r}, t + \Delta t) & \text{si } \mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t \text{ es NS,} \\ f_\alpha(\mathbf{r} + \Delta t \mathbf{c}_\alpha, t + \Delta t), & \text{si no,} \end{cases} \quad (2.69)$$

donde α' se refiere a la dirección opuesta a α . Cuando se usa la ecuación (2.69) el fluido que se encuentra en \mathbf{r} al tiempo t realiza un rebote hacia atrás a mitad del camino si el nodo al que se dirige corresponde al de un sólido o se propaga normalmente si corresponde al de un fluido.

Si la pared del sólido se está moviendo con velocidad \mathbf{u}_b , el fluido adyacente a la pared se debe mover con la misma velocidad. Para todos los nodos de frontera entre el fluido y la pared se aplica que

$$f_\alpha(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \begin{cases} f_{\alpha'}(\mathbf{r}, t + \Delta t) + 2w_\alpha \rho_f \mathbf{u}_b \cdot \mathbf{c}_\alpha & \text{si } \mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t \text{ es NS,} \\ f_\alpha(\mathbf{r} + \Delta t \mathbf{c}_\alpha, t + \Delta t), & \text{si no,} \end{cases} \quad (2.70)$$

considerando un choque elástico con la pared. En la ecuación (2.70), ρ_f es la densidad del fluido y w_α son los pesos asociados a la dirección α .

La velocidad \mathbf{u}_b se obtiene de la posición del centro de masa de la partícula sólida $\mathbf{X}(t)$, la velocidad translacional $\mathbf{U}(t)$, y la velocidad angular $\Omega(t)$,

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{U}(t) + \Omega(t) \times [\mathbf{r} - \mathbf{X}(t)], \quad (2.71)$$

donde \mathbf{r} es la posición donde estamos realizando la actualización de las funciones de equilibrio. El fluido donde existen funciones de distribución con EFS, tiene un incremento en la cantidad de movimiento

$$\delta P_\alpha = \begin{cases} 2\mathbf{c}_\alpha [f_\alpha(\mathbf{r}, t + \Delta t) - \rho_f(\mathbf{r}, t + \Delta t) w_\alpha \mathbf{u}_b \cdot \mathbf{c}_\alpha] & \text{si } \mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t \text{ es NS,} \\ 0, & \text{si no.} \end{cases} \quad (2.72)$$

y por lo tanto una fuerza es ejercida debida a las funciones de distribución con EFS dada por

$$F_{\alpha EFS}(\mathbf{r} + \Delta t \mathbf{c}_{\alpha'}/2, t + \Delta t) = -\delta P_\alpha / \Delta t, \quad (2.73)$$

sobre los los nodos cubiertos. El torque debido a esta fuerza es

$$\mathbf{T}_{\alpha EFS}(\mathbf{r} + \Delta t \mathbf{c}_{\alpha'}/2, t + \Delta t) = (\mathbf{r} - \mathbf{X}(t)) \times F_{\alpha EFS}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_{\alpha'} \Delta t/2, t + \Delta t). \quad (2.74)$$

La posición de la partícula sólida se mueve siempre en un continuo, sin embargo por simplicidad, las fronteras del sólido se encuentran siempre a la mitad del camino entre nodo y nodo y la partícula se redibuja cada vez que la posición redondeada de la partícula cambia. De esta manera, conforme la partícula se mueve va cubriendo y descubriendo la misma cantidad de nodos. Cuando la partícula se mueve intercambia cantidad de movimiento con el fluido, de manera especial cuando cubre y descubre nodos, entonces un peque no impulso de fuerza es aplicada a la partícula sólida en el intervalo de tiempo Δt . La fuerza debida a los nodos cubiertos en \mathbf{r} está dada por

$$\mathbf{F}_c(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t/2, t + \Delta t) = \sum_{\alpha} f_\alpha(\mathbf{r}, t) \mathbf{c}_\alpha, \quad (2.75)$$

y el torque debido a esta fuerza es

$$\mathbf{T}_c(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t/2, t + \Delta t) = (\mathbf{x} - \mathbf{X}(t)) \times \mathbf{F}_c(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t/2, t + \Delta t), \quad (2.76)$$

El segundo caso especial de intercambio de cantidad de movimiento con el fluido es al descubrir nodos, primero hay que asignarles un valor de densidad, que obtenemos con la siguiente relación

$$\rho_f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N_b} \sum_{N_b} \rho_f(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha, t), \quad (2.77)$$

donde \mathbf{r} es la posición del nuevo nodo y N_b es el número de nodos adyacentes al nodo descubierto que son fluido. Esta relación establece que la densidad del nuevo nodo es igual al promedio de sus vecinos. La velocidad macroscópica del nuevo nodo es igual a la de la frontera del sólido al tiempo que es descubierto, esto es

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{U}(t) + \Omega(t) \times [\mathbf{r} - \mathbf{X}(t)]. \quad (2.78)$$

Como los nodos creados llevan una cantidad de movimiento, la partícula sólida debe perder esta cantidad de movimiento, por lo que la fuerza y el torque debido a los nodos descubiertos están dados respectivamente por

$$\mathbf{F}_d(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t/2, t + \Delta t) = -\rho_f(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (2.79)$$

y

$$\mathbf{T}_d(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t/2, t + \Delta t) = [\mathbf{x} - \mathbf{X}(t) \times \mathbf{F}_d(\mathbf{r} + \mathbf{c}_\alpha \Delta t/2, t + \Delta t)]. \quad (2.80)$$

La fuerza y torque total ejercida sobre la partícula sólida al tiempo $t + \Delta t$ está dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(t + \Delta t) &= \sum_{\alpha_{EFS}} \mathbf{F}_{\alpha_{EFS}}(\mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{c}_\alpha, t + \Delta t/2) + \sum_c \mathbf{F}_c(\mathbf{r}, t + \Delta t/2) \\ &+ \sum_d \mathbf{F}_d(\mathbf{r}, t + \Delta t/2) \end{aligned} \quad (2.81)$$

y

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(t + \Delta t/2) &= \sum_{\alpha_{EFS}} \mathbf{T}_{\alpha_{EFS}}(\mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{c}_\alpha, t + \Delta t/2) + \sum_c \mathbf{T}_c(\mathbf{r}, t + \Delta t/2) \\ &+ \sum_d \mathbf{T}_d(\mathbf{r}, t + \Delta t/2), \end{aligned} \quad (2.82)$$

respectivamente, donde α_{EFS} se refiere a los enlaces en la dirección α fluido sólido y los subíndices c y d a los nodos cubiertos y descubiertos, respectivamente. Con las fuerza y torque netos calculados con las ecuaciones anteriores podemos determinar el movimiento de la partícula sólida resolviendo la ecuación de Newton

$$m \frac{d\mathbf{U}(t)}{dt} = \mathbf{F}(t), \quad (2.83)$$

para el movimiento translacional, y

$$\mathbf{I} \cdot \frac{d\Omega(t)}{dt} + \Omega(t) \times [\mathbf{I} \cdot \Omega(t)] = \mathbf{T}(t), \quad (2.84)$$

para el movimiento rotacional de la partícula sólida. En las ecuaciones anteriores m es la masa de la partícula sólida y \mathbf{I} es el momento de inercia.

2.7. Conclusiones

En este capítulo demostramos que a partir de la ecuación de Boltzmann en redes podemos obtener las ecuaciones de Navier–Stokes, lo que justifica su uso como método numérico para realizar simulaciones numéricas de problemas de hidrodinámica. También planteamos un esquema numérico para simular la interacción de una partícula sólida libre de moverse con el fluido. Además presentamos como implementar la condición de no deslizamiento en paredes y como agregar cantidad de movimiento, ambas técnicas las usamos en el problema de levitación acústica que discutimos en el siguiente capítulo.

Capítulo 3

Levitación acústica

3.1. Introducción

La posibilidad de mantener a una partícula suspendida por una onda acústica en un campo gravitacional, se conoce como levitación acústica. Uno de los aspectos más importantes, es la posibilidad de recrear un ambiente de microgravedad para cualquier material existente en la tierra. Un vez levitado, se pueden estudiar las propiedades del material. Por ejemplo Trinh y Hsu [?] usaron la levitación acústica para el cálculo de la densidad de diversos materiales. King [?] estudió la fuerza acústica ejercida sobre una esfera en una onda estacionaria plana. Más tarde, Gor'kov [?] desarrolló una expresión para calcular la fuerza acústica de una esfera que se encuentra en una onda estacionaria arbitraria. Para partículas cilíndricas, la teoría no ha avanzado de la misma manera, pues todos los trabajos desarrollados consideran una onda estacionaria plana. En el presente capítulo reportamos los resultados de la simulación numérica de la levitación acústica usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes (EBR).

En la sección 3.2 presentamos los antecedentes sobre el estudio de fuerzas acústicas actuando sobre una esfera y un cilindro. Los números adimensionales y los dispositivos sobre los que realizamos las simulaciones numéricas los presentamos en la sección 3.3. Las simulaciones numéricas de la levitación acústica para dos cavidades, una con reflector plano y la otra con un reflector redondeado, ambas en dos dimensiones, las presentamos en la sección 3.4. En la cavidad redondeada, cuando la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica es suficientemente grande, observamos que la dinámica de la partícula presenta un movimiento aperiódico que puede ser caótico. Rudnick y Barmatz [?] sugirieron que la partícula levitada podía tener un comportamiento caótico sin aportar justificación alguna. Finalmente, en la sección 3.5, terminamos el capítulo con las conclusiones de las simulaciones

numéricas de la levitación acústica. En este capítulo presentamos las primeras simulaciones numéricas de la dinámica de una partícula levitada acústicamente. Como hemos mencionado anteriormente, la dinámica de la partícula es el resultado de su interacción con un fluido compresible, el cual simulamos usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes.

3.2. Antecedentes y teoría

En 1934, Louis V. King [?] publicó el primer trabajo relacionado con la levitación acústica de esferas. King realizó el cálculo de la fuerza acústica sobre una esfera rígida fija sumergida en una onda estacionaria plana y en una onda plana viajera. Para ambos casos, consideró un fluido ideal y que el radio de la esfera es muy pequeño comparado con la longitud de la onda plana. También realizó el cálculo de la fuerza para el caso de una esfera libre de moverse bajo la acción del campo acústico. King concluyó que hay una relación de densidades óptima para la levitación acústica en una onda plana estacionaria y también demostró que con los dispositivos de esa época la levitación acústica en aire de una esfera de corcho era imposible debido a las limitaciones técnicas de los piezoeléctricos. Sin embargo, el cálculo que realizó, considerando agua como medio de suspensión demostró que la levitación acústica, al menos en teoría, ya era posible. Para este cálculo, consideró que la densidad de la partícula ρ_p entre la densidad del fluido ρ_f era cercana a uno.

Más tarde Yosiaka y Kawasima [?] compararon resultados experimentales de la fuerza acústica sobre burbujas con la teoría desarrollada por King y encontraron que la fuerza acústica puede ser de 10^5 a 10^8 veces más grande que la fuerza estimada por la fórmula deducida por King. Esta diferencia, como demostraron Yosiaka *et al*, se debe a la compresibilidad de la burbuja, así que desarrollaron una teoría para medir la fuerza acústica sobre una esfera compresible en una onda acústica viajera y una estacionaria, suponiendo en ambos casos un fluido ideal y ondas acústicas planas. En los experimentos realizados, midieron la fuerza acústica sobre una burbuja de aire sumergida en agua a 1 atmósfera y cero grados centígrados. En los experimentos realizados, Las burbujas se dirigieron a los nodos de presión de la onda plana estacionaria.

En 1962 Gor'kov [?] presentó un método simple para determinar la magnitud de la fuerza acústica sobre una partícula esférica compresible en un campo acústico estacionario arbitrario para un fluido inviscido. Este método se puede aplicar para cualquier tipo de ondas, mientras que los desarrollos anteriores se limitaban a ondas planas. Gor'kov encontró que la fuerza acústica es derivable de un potencial acústico U dado por

$$U = 2\pi r^3 \rho_f \left(\frac{\hat{p}^2}{3\rho_f^2 c_s^2} f_1 - \frac{\hat{v}^2}{2} f_2 \right), \quad (3.1)$$

donde r es el radio de la esfera, ρ_f la densidad del fluido, c_s la velocidad del sonido en el mismo, \hat{p}^2 y \hat{v}^2 son las fluctuaciones cuadráticas medias de la presión y la velocidad en la onda, respectivamente. Además $f_1 = 1 - (c_s^2 \rho_f)/(c_p^2 \rho_p)$ y $f_2 = 2(\rho_p - \rho_f)/(2\rho_p + \rho_f)$ donde ρ_p y c_p son la densidad y la velocidad del sonido

en la partícula. Para que la formula derivada por Gor'kov sea válida es condición necesaria que el radio de la partícula sea mucho menor que la longitud de onda, de manera que la presencia de la partícula no afecta el campo acústico.

La levitación acústica de esferas sólidas y compresibles (gotas) avanzó rápidamente, sobre todo en los llamados levitadores acústicos de un eje, que consisten en un piezo eléctrico que emite la señal acústica y una superficie reflectora que ayuda a formar la onda estacionaria donde se coloca una partícula. Oran *et al* [?] realizaron un estudio paramétrico de la cavidad, donde el objetivo era aumentar la capacidad de levitación, ya que hasta ese entonces la muestra más densa levitada era de apenas $\rho \sim 5 \text{ gr/cm}^3$. Oran *et al* encontraron empíricamente que con un reflector o un piezoeléctrico esférico se duplicaba la fuerza acústica bajo las mismas condiciones de operación. Una combinación de ambos permitió levitar muestras de hasta 20 gr/cm^3 del mismo tamaño que las anteriores de 5 gr/cm^3 .

Leung *et al* [?] fueron los primeros en estudiar el desplazamiento de la resonancia debido a la presencia de la partícula dentro de una cavidad cuadrada en tres dimensiones. Los estudios se realizaron en el régimen lineal, donde un análisis de Fourier mostraba que los armónicos eran pequeños. Encontraron que la frecuencia de resonancia es función del tamaño de la esfera y de su posición, resultado de la exclusión del volumen por la presencia de la esfera y de las ondas reflejadas en la misma. Otro aspecto importante es que en algunas ocasiones la presencia de la partícula suprimió la aparición de los armónicos.

Una de las primeras aplicaciones de la levitación acústica fue introducida por Trinh y Hsu [?], quienes presentaron dos métodos para medir la densidad de un material usando la levitación acústica. Ambos métodos tienen cuatro características importantes que son: (a) no existe contacto entre la muestra a medir con cualquier objeto; (b) los resultados obtenidos son independientes del tamaño y forma de la muestra; (c) se utiliza un esquema de comparación por lo que no es necesario conocer con precisión los parámetros del campo acústico; y (d) es necesaria una cantidad muy pequeña, del orden de un microlitro o menos. El primer método supone que la magnitud de la presión acústica y su derivada respecto a la posición vertical son proporcionales al voltaje de entrada que alimenta al piezoeléctrico. Primero se levita una gota de líquido con densidad ρ_{p1} , compresibilidad β_{p1} y se levita en una posición y_1 con un voltaje V_1 . Después una gota con propiedades desconocidas ρ_{p2} , β_{p2} se hace levitar en la misma posición y_1 que la muestra anterior con un voltaje V_2 . La relación de voltajes está relacionada por

$$\left(\frac{V_1}{V_2}\right)^2 = \frac{G(\beta_{p1}/\beta_{f1}, \rho_{p1}/\rho_{f1})}{G(\beta_{p2}/\beta_{f2}, \rho_{p2}/\rho_{f2})}, \quad (3.2)$$

donde ρ_{f1} y β_{f1} se refieren a las propiedades del fluido donde la muestra es levitada y que puede ser diferente para ambos experimentos, por eso aparecen ρ_{f2} y β_{f2} . La relación de compresibilidad–densidad G se define como

$$G = \frac{|1 - \rho_p/\rho_f|}{\beta_p/\beta_f - (5\rho_p - 2\rho_f)/(2\rho_p + \rho_f)}. \quad (3.3)$$

De esta manera, si conocemos solamente una de las propiedades de la muestra levitada ρ_{p1} o β_{p1} podemos determinar la otra, según sea el caso. El segundo método se

basa en la dinámica de la partícula. En un ambiente de gravedad cero, una partícula en un campo acústico siempre se localiza en el nodo de presión, independientemente de la intensidad del campo acústico. Bajo estas condiciones, el primer método basado en la relación existente entre el voltaje de entrada del piezoeléctrico ya no es útil. El concepto básico de este método se basa en la determinación de la frecuencia característica de una masa acoplada a una fuerza restitutiva, usualmente proporcionada por un resorte. En la parte lineal, la frecuencia del sistema masa-resorte está dada por

$$\omega = (K/m)^{1/2}, \quad (3.4)$$

donde K es la constante del resorte y m es la masa del objeto. Entonces la fuerza acústica para pequeños desplazamientos de la posición z donde la fuerza acústica es cero,

$$F = -Kz, \quad (3.5)$$

donde

$$K = \frac{20\pi^2 p_o^2}{6\lambda \rho_p c_s^2} k r^3 z. \quad (3.6)$$

En la expresión anterior r es el radio de la esfera, c_s la velocidad del sonido, ρ_p la densidad de la partícula levitada, $k = 2\pi/\lambda$ es el número de onda y p_o la amplitud máxima de la presión en la onda acústica. Entonces, para valores pequeños de z la fuerza acústica se puede considerar lineal, y la posición de equilibrio coincide con el nodo de presión cuando los efectos gravitacionales son despreciables. Se puede deducir que la frecuencia ω_2 de una muestra con densidad ρ_{p2} y volumen V_2 está relacionada de la siguiente manera con una muestra de densidad conocida ρ_{p1} de la siguiente manera

$$\frac{\rho_{p1}}{\rho_{p2}} = \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right)^2 \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^2 \frac{\cos(4\pi z_1/\lambda)}{\cos(4\pi z_2/\lambda)}, \quad (3.7)$$

donde z_1 y z_2 son las posiciones de equilibrio de las partículas levitadas. Para el caso de un ambiente en gravedad cero, $z_1 = z_2$ para cualquier valor de V , además, si las partículas son del mismo volumen $V_1 = V_2$, entonces las densidades están relacionadas por el cuadrado de las frecuencias, las cuales se miden experimentalmente. Trinh y Hsu reportaron que el método basado en la relación de voltaje tiene una precisión de 1 %, pero que no es muy bueno tomando en cuenta los estándares de medición de densidad [?]. Para el segundo método, basado en la frecuencia de resonancia de la partícula, reportaron errores de hasta un 6 %. Si bien este error no es tan bueno como se esperaba, la gran ventaja es que esta técnica se puede implementar en ambientes de gravedad reducida o nula.

Rudnick y Barmatz [?], al igual que Leung *et al* [?], realizaron un estudio sobre el desplazamiento de la resonancia debido a la presencia de la partícula esférica en el campo acústico con una onda plana. De acuerdo a Rudnick y Barmatz, el desplazamiento de la resonancia ocasiona inestabilidades en el movimiento de la partícula. Estas inestabilidades pueden dar paso a dos comportamientos, el primero ocasiona que la oscilación de la partícula crezca hasta alcanzar una amplitud finita y estabilizarse. En el segundo comportamiento, la oscilación de la partícula

crece hasta desestabilizarse completamente y caer. Rudnick y Barmatz modelaron el comportamiento de la partícula con la siguiente ecuación

$$m \frac{d^2 z(t)}{dt^2} + (\sigma - \Gamma[z(t)]) \frac{dz(t)}{dt} + f_o(z(t)) - mg = 0, \quad (3.8)$$

donde $z(t)$ es la posición de la partícula a partir de la posición de equilibrio, $\sigma \dot{z}(t)$ es una fuerza debida a la viscosidad del fluido, $f_o(z(t))$ es la fuerza acústica que actúa sobre la partícula y $\Gamma[z(t)]\dot{z}(t)$ es una fuerza que no se explica su origen en el trabajo de Rudnick y Barmatz. Si $\Gamma[z(t)]\dot{z}(t) < \sigma \dot{z}(t)$ hay disipación, pero en el caso contrario, hay una amplificación de la oscilación que desestabiliza la levitación. También sugirieron que la dinámica de la partícula puede ser caótica pero no aportaron pruebas o justificación alguna.

Xie y Wei [?], al igual que Oran *et al* [?], realizaron un estudio paramétrico de un levitador acústico de un eje con la finalidad de incrementar la fuerza acústica. La diferencia principal entre estos dos trabajos es que Xie y Wei se apoyaron en una solución numérica del problema y lo verificaron experimentalmente. En condiciones normales de gravedad, Oran *et al* levitaron una partícula de platino ($\rho = 20g/cm^3$) pero no reportaron las dimensiones. Xie y Wei reportaron haber levitado una partícula de tungsteno ($\rho = 18.92g/cm^3$) con un radio de $r = 1.5mm$ con un piezoeléctrico plano y un reflector con superficie curva. En trabajos posteriores, Xie *et al* [?, ?] reportaron haber levitado iridio ($\rho = 22.6gr/cm^3$) y mercurio ($\rho = 13.6gr/cm^3$) que son el sólido y el líquido más densos que hay en la tierra. En un artículo publicado recientemente, Xie *et al* [?] presentaron la levitación de pequeños organismos vivientes como una hormiga, un escarabajo y hasta un pez pequeño que van de los 5 a los 10 *mm*.

Los primeros trabajos sobre cilindros en un campo acústico, fueron los de Awatani [?] y Hasegawa *et al* [?], quienes reportaron resultados numéricos de la fuerza acústica en una onda viajera para un cilindro rígido y uno elástico, respectivamente. Pero hasta ese entonces, no se habían reportado resultados para el caso de un cilindro en una onda acústica estacionaria. Wu *et al* [?] fueron los primeros que reportaron una expresión analítica para un cilindro rígido dentro de una onda estacionaria. El desarrollo se basó en el trabajo de King [?] usando coordenadas cilíndricas. Wu *et al* reportaron que la fuerza ejercida en un campo acústico por unidad de longitud para un cilindro es

$$F = \left(\frac{1 - \beta}{2(1 + \beta)} + 1 \right) v \omega \left(\frac{p_o^2}{\rho_f c_s^2} \right)^2 \sin(2kh) \quad (3.9)$$

donde $\beta = \rho_f / \rho_p$ es la relación de densidades entre el fluido ρ_f y la partícula ρ_p , p_o es la presión estática, ω es la frecuencia de la onda estacionaria, v es la amplitud de la velocidad, c_s es la velocidad del sonido en el fluido, k el número de onda y h es la distancia a la cual se encuentra el centro del cilindro de la fuente acústica. En la ecuación anterior no se tomó en cuenta el radio r del cilindro porque se considera que es muy pequeño comparado con la longitud de onda ($kr \ll 1$).

Wei *et al* [?] calcularon la fuerza acústica actuando sobre un cilindro infinito de radio r sobre una onda estacionaria plana. El centro del cilindro se encuentra en

$z = 0$ y el antinodo de presión más cercano se encuentra en $z = -h$, por lo que la fuerza acústica por unidad de longitud en el cilindro es

$$F = \frac{r}{4} p_f^2 \beta_f \sin(2kh) Y_{st}, \quad (3.10)$$

donde p_f es la amplitud máxima de la presión, $\beta_f = 1/(\rho_f c_s^2)$ es la compresibilidad del fluido y k el número de onda. El término Y_{st} lo desarrollaron para el caso de un cilindro con compresibilidad $\beta_p = 1/(\rho_p c_p^2)$, donde ρ_p son la densidad y c_p la velocidad del sonido en la partícula. La aproximación para el término Y_{st} es

$$Y_{st} = \pi k r (f_1 + f_2), \quad (3.11)$$

donde

$$f_1 = 1 - (\beta_p / \beta_f) \quad (3.12)$$

y

$$f_2 = 2 \left(\frac{\rho_p / \rho_f - 1}{\rho_p / \rho_f + 1} \right). \quad (3.13)$$

Para el caso de un cilindro incompresible, simplemente $f_1 = 1$.

Casi a la par del artículo publicado por Wei *et al*, Haydock [?, ?] publicó dos artículos sobre el cálculo de la fuerza acústica sobre un cilindro inmóvil en una onda estacionaria plana. En el primer trabajo, encontró que la fuerza acústica por unidad de longitud F está dada por

$$F = \langle F_\phi \rangle + \langle F_k \rangle + \langle F_c \rangle. \quad (3.14)$$

donde la fuerza es suma de las contribuciones promediadas sobre el tiempo de las fuerzas debidas a la energía potencial acústica $\langle F_\phi \rangle$, a la energía cinética $\langle F_k \rangle$ y al movimiento del cilindro $\langle F_c \rangle$. Estas contribuciones se definen como

$$\langle F_\phi \rangle = -\frac{r \rho_f}{2 c_s^2} \int_0^{2\pi} \langle \dot{\psi}^2 \rangle \cos \theta d\theta, \quad (3.15)$$

$$\langle F_k \rangle = -\frac{r \rho_f}{2} \int_0^{2\pi} \langle u^2 \rangle \cos \theta d\theta, \quad (3.16)$$

y

$$\langle F_c \rangle = -r \rho_f \int_0^{2\pi} \langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}_p \rangle \cos \theta d\theta, \quad (3.17)$$

donde las integrales son alrededor del cilindro y ψ es el potencial de la velocidad, \mathbf{u} la velocidad del fluido alrededor del cilindro y \mathbf{v}_p la velocidad del cilindro.

En el segundo trabajo reportó la medición de la fuerza acústica debida a una onda estacionaria en simulaciones numéricas usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes (EBR). Haydock utilizó el método propuesto por Ladd [?] para implementar la simulación de una partícula sólida dentro del método de la EBR. Sus resultados mostraron una diferencia que va de un 4 % a un 146 % entre la teoría y los resultados de las simulaciones numéricas para la fuerza actuando

sobre un cilindro. La razón de la discrepancia entre teoría y simulaciones radica en que la teoría es válida siempre y cuando el grosor de la capa límite acústica sea mucho menor al tamaño de la partícula y cuando el error fue grande, este criterio no se cumplió. Haydock también realizó simulaciones numéricas de una partícula cilíndrica libre dentro de una onda estacionaria plana en ausencia de un campo gravitacional externo. Como era de esperarse, al colocar la partícula dentro de una onda estacionaria ésta se dirigió al nodo de presión donde la sumatoria de fuerzas acústicas es cero.

El desarrollo en la teoría para cilindros en un campo acústico no ha avanzado de la misma manera que lo ha hecho la teoría para esferas. Uno de los logros más importantes en la teoría acústica ha sido la formulada por Gor'kov, que permite calcular el potencial acústico para una onda cualquiera, logro que no se ha igualado en la teoría para cilindros. La teoría ha sido desarrollada partiendo de flujos potenciales y ondas planas con cilindros inmóviles. Por otro lado, los experimentos numéricos para cilindros se han realizado en ondas planas estacionarias y en ausencia de fuerza de cuerpo externa, por lo que la partícula liberada se dirige a los nodos de presión o antinodos de velocidad. Además, las simulaciones numéricas con la EBR realizadas por Haydock, se usó el esquema para la simulación de partículas sólidas propuesto por Ladd [?, ?], cuando se sabe que hay esquemas más adecuados [?].

3.3. Números adimensionales y dispositivo experimental

Los resultados de las simulaciones numéricas los reportamos en las cantidades adimensionales que definimos a continuación. Para el problema de una partícula circular sólida en un campo acústico las distancias o posiciones adimensionales, indicadas con un asterisco en el superíndice, son

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}k, \quad r^* = rk \quad L^* = Lk, \quad (3.18)$$

donde el \mathbf{x} es la posición de la partícula de radio r y L es una distancia cualquiera. Las distancias se adimensionalizan con el número de onda $k = 2\pi/\lambda$, donde λ es la longitud de la onda acústica. El tiempo adimensional es

$$t^* = \frac{t}{T}, \quad (3.19)$$

donde $T = 2\pi/\omega$ es el período, $\omega = 2\pi c_s/\lambda$ la frecuencia angular de la onda acústica y c_s la velocidad del sonido en el fluido. Como explicamos en la sección anterior, el levitador de un eje consiste en una fuente que genera la onda acústica y un reflector que ayuda a formar la onda estacionaria. En las simulaciones numéricas, se agrega una cantidad de movimiento $P = P_o \cos \omega t$ en cada nodo. La cantidad de movimiento adimensional agregada por la fuente acústica es

$$P^* = \frac{PkT}{\pi r^2 \rho_f}, \quad (3.20)$$

Figura 3.1: (a) Levitador acústico de un eje con un reflector plano. La fuente del levitador se encuentra localizada en la parte superior de la cavidad; $B^* = 5.092$ y H^* puede variar. (b) Levitador acústico de un eje con un reflector redondeado con $W^* = 10.184$, $B^* = 5.092$, $R^* = 12.244$, $h_b^* = 0.1377$, y $h_a^* = 0.01028$. Para ambas cavidades, se fijaron los siguientes parámetros de EBR para todas las simulaciones numéricas $\tau = 0.6$, $\rho_f = 0.6$ y en un espacio bidimensional usando la malla $D2Q9$.

donde ρ_f es la densidad del fluido. La velocidad adimensional es

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{v_{max}}, \quad (3.21)$$

donde v_{max} es la velocidad máxima del fluido dentro de la cavidad.

Las simulaciones numéricas de levitación acústica de un cilindro, al que llamamos partícula en lo que sigue, las llevamos a cabo en dos cavidades bidimensionales diferentes, que mostramos en las figuras 3.1 (a) y (b). La cavidad de la figura 3.1 (a) corresponde a un levitador acústico de un eje con una fuente acústica plana y con un reflector también plano en la parte inferior. La cavidad redondeada de la figura 3.1 (b) tiene la forma y dimensiones reportadas por Xie y Wei [?], quienes realizaron experimentos en una cavidad tridimensional, mientras que las simulaciones numéricas son bidimensionales.

3.4. Levitación acústica

Como mencionamos en la sección anterior, las simulaciones numéricas las realizamos en dos cavidades. La cavidad plana se simuló en una malla de 163×201 nodos y la cavidad redondeada en una malla de 901×253 nodos. El tamaño de malla se escogió en función del radio de la partícula, dado que es el elemento simulado más pequeño en el problema. El radio de la partícula fue establecido en $r = 9.5$ nodos y en forma adimensional en $r^* = 0.25$ al igual que los experimentos realizados por Xie *et al* y el resto de los tamaños de la cavidad se escalaron en función del radio. En el apéndice A mostramos los experimentos realizados para determinar el tamaño de la partícula, en la sección A.3. Los reflectores y demás paredes para ambas cavidades los simulamos con la condición a la frontera del rebote hacia atrás, mientras que la fuente acústica se genera agregando cantidad de movimiento en la dirección vertical, ambas presentadas en la sección 2.5. Para la cavidad plana, las simulaciones numéricas las realizamos con condiciones periódicas a la frontera en la dirección horizontal. En la cavidad redondeada, colocamos paredes con condición de no deslizamiento usando el rebote hacia atrás. Los parámetros de densidad y viscosidad del fluido los mantuvimos constantes para todas las simulaciones y sus valores son $\rho_f = 0.6$ y $\nu = 0.0333$, respectivamente.

Para el caso de una onda plana las frecuencias de resonancia son

$$\omega = \frac{2\pi c_s(2n-1)}{4H}, \quad (3.22)$$

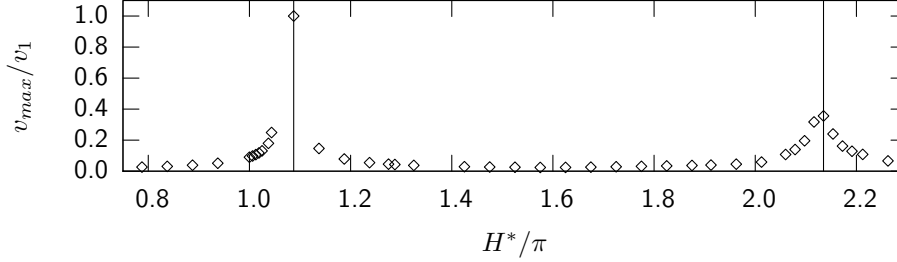


Figura 3.2: Velocidad máxima adimensional como función de la altura adimensional de la cavidad redondeada. Las velocidades se escalan con la velocidad máxima del primer modo resonante v_1 . Los máximos se encuentran en $H^*/\pi = 1.09$ y 2.14 .

Figura 3.3: (a) Amplitud de la oscilación de la velocidad escalada con la velocidad máxima y (b) amplitud de oscilación de la presión escalada con la presión inicial para la cavidad redondeada. La cantidad de movimiento agregado por la fuente acústica es $P_o^* = 1.6 \times 10^{-3}$. La frecuencia de la fuente acústica es $\omega_r = 0.019126$ para la cavidad redondeada correspondiente al segundo modo resonante.

donde H es la altura de la cavidad, c_s es la velocidad del sonido en el fluido y $n = 1, 2, \dots$ es el modo resonante. Para encontrar los modos resonantes en la cavidad redondeada, realizamos simulaciones numéricas variando la altura de la cavidad y encontramos el valor máximo de la velocidad una vez que se ha formado una onda estacionaria, como vemos de la figura 3.2, donde mostramos los primeros dos modos resonantes localizados en $H^*/\pi = 1.09$ y 2.14 para la cavidad redondeada. Como habíamos dicho anteriormente, los parámetros geométricos de la cavidad redondeada son los correspondientes a los presentados por Xie y Wei [?], quienes reportaron que los primeros modos resonantes para una cavidad tridimensional son $H^*/\pi = 1.20$ y 2.30 . Para ambas cavidades, el número del modo resonante, corresponde al número de nodos de presión dentro de la cavidad. En un nodo de presión, la amplitud de la oscilación en la presión es cero y la sumatoria de fuerzas acústicas en esa posición también es cero. En esa misma posición se localiza un antinodo de velocidad, donde la amplitud de la oscilación en la velocidad es máxima.

Todas las simulaciones numéricas que reportamos en esta sección corresponden al segundo modo resonante. La cavidad plana se inicializa con una onda estacionaria plana con una frecuencia correspondiente al segundo modo resonante. En la cavidad redondeada, dada la geometría del reflector redondeado, partimos de un sistema en reposo y dejamos evolucionar hasta formar una onda estacionaria en aproximadamente 400 periodos. En las figuras 3.3 (a) y (b) mostramos los mapas de la amplitud de la oscilación local para la velocidad y la presión en la cavidad redondeada, respectivamente. De estas figuras observamos que a un nodo de presión le corresponde un antinodo de velocidad, o escrito de otra forma, en un lugar donde la amplitud de oscilación de la presión es cero, la amplitud de oscilación de

la velocidad es máxima y viceversa.

En el primer conjunto de simulaciones numéricas en presencia de partícula sólida, colocamos una partícula libre de moverse de radio $r^* = 0.25$ a diferentes alturas en el eje vertical de ambas cavidades y monitoreamos el movimiento vertical y horizontal de la partícula. En las figuras 3.4 (a) y (b) reportamos la posición vertical de una partícula variando su posición inicial en ausencia de gravedad. En la cavidad redondeada, la posición horizontal inicial está en el eje vertical. Para los valores de los parámetros usados en estas simulaciones, no hay movimiento de la partícula en el eje horizontal. Como trabajamos en el segundo modo resonante, existen dos nodos de presión, y las partículas colocadas dentro de las cavidades se mueven hacia los nodo de presión más cercanos que se encuentran en $y^* = 1.6$ y $y^* =$ para la cavida plana y $y^* = 1.45$ y $y^* = 5.3$ para la cavidad redondeada, donde la sumatoria de fuerzas acústicas es cero. Al comparar el movimiento de las partículas en ambas cavidades, podemos concluir que las que se encuentran en la cavidad redondeada alcanzan el nodo de presión en un tiempo menor que las colocadas en la cavidad plana. En ambas cavidades, la partícula oscila alrededor del nodo de presión como enfatizamos en la figura 3.5 y las frecuencias de oscilación coinciden con la frecuencia de la fuente acústica. También observamos que el movimiento de la partícula en la cavidad redondeada presenta armónicos de la frecuencia de la fuente acústica, los cuales no aparecen para la partícula en la cavidad plana.

En las siguientes simulaciones numéricas, conservamos todos los valores de los parámetros y agregamos la presencia de un campo gravitacional externo. En las figuras B.2 (a) y (b) mostramos la evolución temporal de la posición vertical de una partícula sólida en presencia de un campo gravitacional externo para la cavidad plana y la redondeada, respectivamente. La línea sólida indica la posición de los nodos de presión para ambas cavidades. Observamos que la partícula oscila abajo del nodo de presión en ambas cavidades, donde la suma de la fuerza acústica y gravitacional es cero. Observamos también que el desplazamiento de la posición estacionaria respecto al nodo de presión es mayor en la cavidad plana que en la redondeada. De la figura 3.7 observamos el mismo comportamiento para el movimiento vertical de la partícula que cuando no existe un campo gravitacional externo (ver figura 3.5).

En el siguiente conjunto de simulaciones numéricas, colocamos inicialmente la partícula cerca del nodo de presión inferior. La cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica la mantenemos constante mientras variamos la relación de densidades entre la partícula y el fluido ρ_p/ρ_f . Para la cavidad plana fijamos la cantidad de movimiento en $P_o^* = 0.01$ y para la cavidad redondeada en $P_o^* = 0.0019$. El movimiento de la partícula, como mostramos más adelante, puede llegar a ser muy complejo, por lo que además de la posición estacionaria, medimos la desviación estándar del movimiento de la partícula en ambos ejes σ_x y σ_y para ambas cavidades. En este caso, la desviación estándar es una medida de la amplitud de las oscilaciones. En estas simulaciones, colocamos la partícula inicialmente en el eje vertical de la cavidad, cerca del nodo inferior de presión, y descartamos el transiente en el cual ésta alcanza un estado estacionario. Observamos que no hay movimiento de la partícula en la dirección horizontal. En las figuras B.3 (a) y (b), presentamos las posiciones estacionarias y σ_y en función de la relación de densidades entre la partícula y el fluido para la cavidad plana y la redondeada,

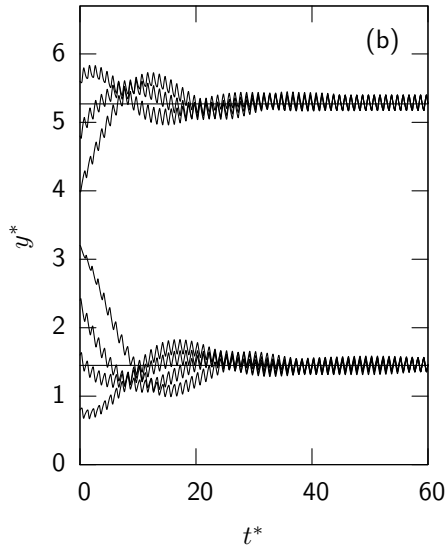


Figura 3.4: Evolución de la posición vertical de una partícula sólida como función del tiempo en el segundo modo resonante en ausencia de gravedad en (a) la cavidad plana y (b) la cavidad redondeada, ambas con $P_o^* = 1.6 \times 10^{-3}$, $\rho_p/\rho_f = 2$, y $r^* = 0.25$. Las líneas horizontales representan la ubicación de los nodos de presión.

Figura 3.5: Posición vertical de la partícula para la cavidad plana y la redondeada. Ambas partículas oscilan con una frecuencia correspondiente a la de la fuente acústica.

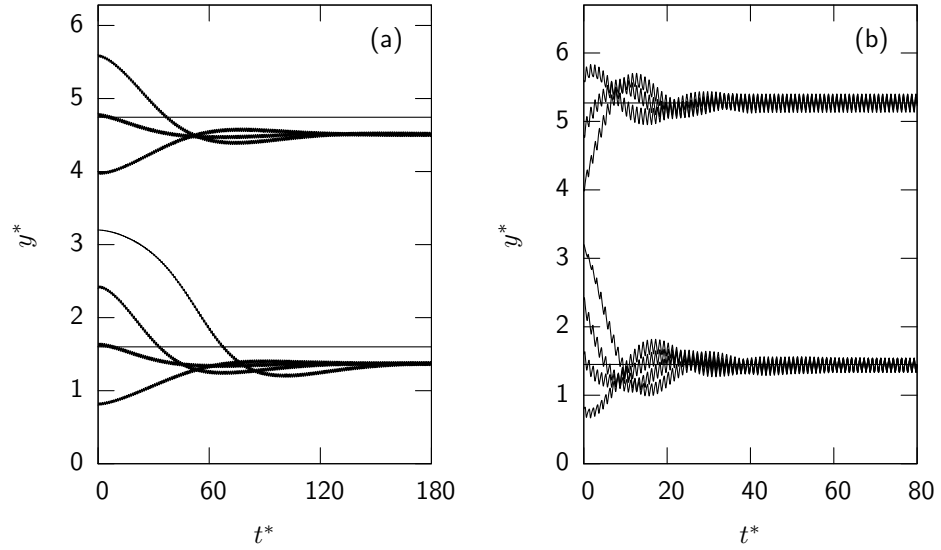


Figura 3.6: Evolución de la posición vertical de una partícula sólida como función del tiempo en el segundo modo resonante en presencia de gravedad en (a) la cavidad plana y (b) la cavidad redondeada. Las simulaciones numéricas se realizaron con los mismos parámetros de las figuras 3.4 (a), (b) y agregando la presencia de un campo gravitacional externo.

Figura 3.7: Posición vertical de la partícula para la cavidad plana y la redondeada ambas en presencia de un campo gravitacional externo. Ambas oscilan con la frecuencia de la fuente acústica ω_p para la cavidad plana y ω_r para la cavidad redondeada.

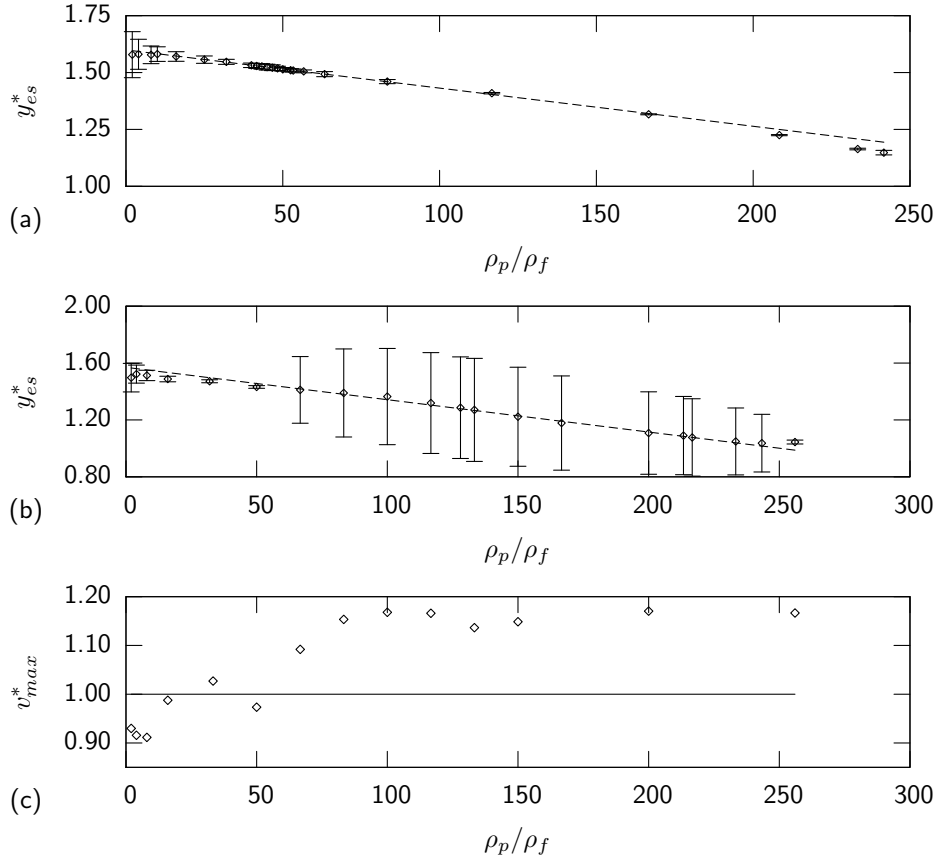


Figura 3.8: Posición y desviación estándar vertical de la partícula variando la relación de densidades y manteniendo la cantidad de movimiento constante en (a) $P_o^* = 0.01$ para la cavidad plana y (b) $P_o^* = 0.0019$ para la redondeada. La pendiente de la línea ajustada es -0.001677 para la cavidad plana y -0.002274 para la cavidad redondeada. En (c) mostramos la velocidad máxima dentro de la cavidad en presencia de partícula para la cavidad redondeada con $P_o^* = 0.01$.

Figura 3.9: Posición vertical de la partícula sólida en función del tiempo en la cavidad plana para (a) $\rho_p/\rho_f = 8$, (b) $\rho_p/\rho_f = 40$ y (c) $\rho_p/\rho_f = 233.3$. En (b) y (c) observamos una segunda frecuencia de oscilación.

Figura 3.10: Espectros de potencia del movimiento vertical de la partícula sólida sobre el tiempo en la cavidad plana para (a) $\rho_p/\rho_f = 8$, (b) $\rho_p/\rho_f = 40$ y (c) $\rho_p/\rho_f = 233.3$. Los espectros de potencia corresponden a las oscilaciones reportadas en las figuras 3.9 (a), (b) y (c). En (b) podemos observar una segunda frecuencia $\omega = 0.000632$ y en (c) $\omega = 0.000472$.

Figura 3.11: Posición vertical de la partícula sólida sobre el tiempo en la cavidad redondeada para (a) $\rho_p/\rho_f = 2$, (b) $\rho_p/\rho_f = 50$, (c) $\rho_p/\rho_f = 100$ y (d) $\rho_p/\rho_f = 256$.

Figura 3.12: Espectro de potencia del movimiento vertical de la partícula sólida sobre el tiempo en la cavidad redondeada para (a) $\rho_p/\rho_f = 2$, (b) $\rho_p/\rho_f = 50$, (c) $\rho_p/\rho_f = 100$ y (d) $\rho_p/\rho_f = 256$. Los espectros de potencia corresponden a los de las figuras 3.11 (a), (b), (c) y (d).

respectivamente. Conforme la relación de densidades aumenta es más difícil que el campo acústico pueda mover la partícula y la posición estacionaria se desplaza hacia abajo, como mostramos en las figuras B.3 (a) y (b). De esto concluimos que la fuerza acústica aumenta al alejarse del nodo de presión, pues la partícula levita donde la fuerza acústica es igual al peso de la partícula. El desplazamiento de la posición estacionaria es lineal entre $40 < \rho_p/\rho_f < 200$, como observamos del ajuste en la figura B.3 (a), para la cavidad plana. En la cavidad redondeada, el desplazamiento de la posición estacionaria también es lineal en una zona, entre $50 < \rho_p/\rho_f < 230$, como observamos en la figura B.3 (b) por el ajuste de la línea discontinua.

La frecuencia de resonancia para cada cavidad la calculamos en ausencia de partícula. Sabemos que existe un desplazamiento en la frecuencia de resonancia y que es función del tamaño y posición de la partícula dentro de la cavidad [?]. Para verificar lo anterior, medimos la velocidad máxima del fluido dentro de la cavidad redondeada en presencia de la partícula, que mostramos en la figura B.3 (c). La velocidad la escalamos con la velocidad máxima en resonancia de la cavidad redondeada en ausencia de partícula. Como observamos la cavidad se sale de la resonancia debido a la presencia de la partícula sólida, pero para ciertas posiciones de la partícula la cavidad vuelve a entrar en resonancia, alcanzando velocidades hasta un 20 % más grandes que la anterior. El desplazamiento en línea recta de la posición estacionaria al variar la relación de densidades entre la partícula y el fluido, indica al menos en una pequeña zona, que la fuerza acústica crece linealmente y que puede ser aproximada por la fuerza generada por un resorte. Esto se cumple para ambas cavidades.

El movimiento de la partícula puede presentar diversos comportamientos, como veremos a continuación. En la figura 3.9 presentamos las oscilaciones verticales en el estado estacionario para tres valores de ρ_p/ρ_f para la cavidad plana. En la figura 3.9 (a) observamos una oscilación con la frecuencia de la fuente acústica. En las figuras 3.9 (b) y (c) aparece una segunda oscilación dominante con frecuencia menor que la de la fuente acústica. Esto lo confirmamos en los espectros de potencia que mostramos en la figura 3.10, donde observamos que la partícula oscila con la misma frecuencia que la fuente acústica y los armónicos o que además aparece una segunda frecuencia más lenta que la de la fuente acústica.

La cavidad redondeada presenta un comportamiento más complejo que la plana. En la figura 3.11 (a) mostramos a la partícula oscilando verticalmente con frecuencia

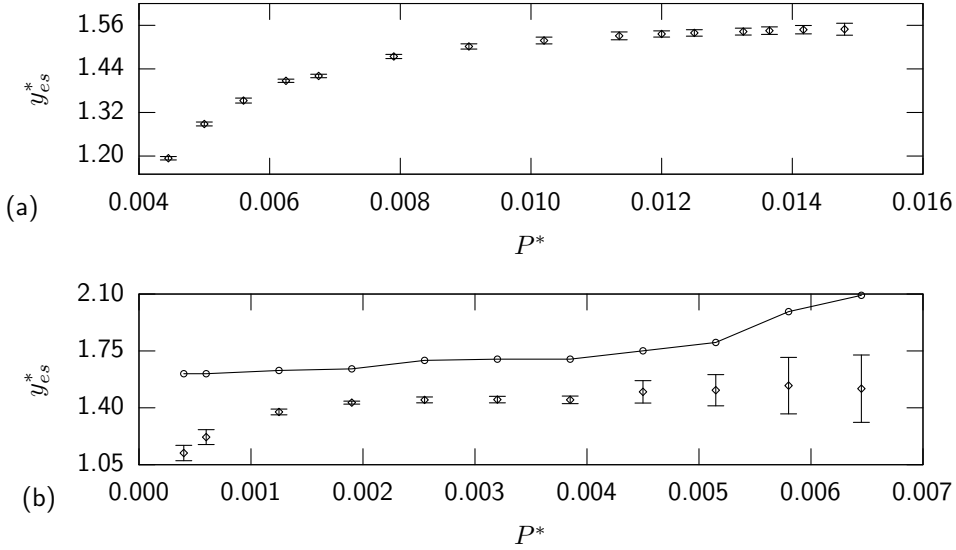


Figura 3.13: Posición vertical y desviación estándar en la dirección vertical como función de la cantidad de movimiento agregado P_o^* con $\rho_p/\rho_f = 50$ para la cavidad (a) plana y (b) redondeada. Para $P_o^* > 4 \times 10^{-3}$ la partícula comienza a oscilar horizontalmente, como mostramos en (c). Para la cavidad plana, el nodo de presión se mantiene constante en 1.6 y para la cavidad redondeada, indicamos la posición del nodo de presión por la línea con puntos en (b).

de la fuente acústica, como podemos observar de la figura 3.12 (a). En la figura 3.11 (b) aparece una segunda frecuencia menor que la frecuencia de la fuente acústica, como podemos comprobar de la figura 3.12 (b). Además la amplitud de la oscilación es un orden de magnitud menor que en el caso anterior. Cuando la amplitud de la oscilación es máxima, la amplitud de la oscilación debida a la frecuencia de la fuente acústica es pequeña, como mostramos en la figura 3.11 (c) y su inserto. En la figura 3.12 (c) mostramos las frecuencias dominantes localizadas por los picos del espectro de potencias. En la figura 3.11 (d) observamos otra vez que el movimiento vertical de la partícula tiene dos frecuencias, como confirmamos de la figura 3.12 (d), donde aparecen las dos frecuencias dominantes con sus armónicos.

En el siguiente conjunto de simulaciones numéricas mantenemos constante la relación de densidades en $\rho_p/\rho_f = 50$ en presencia de un campo gravitacional externo y variamos la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica P_o^* para la cavidad plana y la redondeada. Como en el conjunto de simulaciones numéricas anteriores, medimos la posición vertical en el estado estacionario y las desviaciones estándar en ambas direcciones. En las figuras B.4 (a) y (b) mostramos estas mediciones como función de la cantidad de movimiento para la cavidad plana y la redondeada, respectivamente. En (b) se muestra también la posición vertical

Figura 3.14: Posición vertical de la partícula sólida $\rho_p/\rho_f = 50$ sobre el tiempo en la cavidad plana para (a) $P_o^* = 4.45 \times 10^{-3}$, (b) $P_o^* = 6.25 \times 10^{-3}$ y (c) $P_o^* = 9.05 \times 10^{-3}$.

Figura 3.15: Espectro de potencia del movimiento vertical de la partícula sólida $\rho_p/\rho_f = 50$ sobre el tiempo en la cavidad plana para (a) $P_o^* = 4.45 \times 10^{-3}$, (b) $P_o^* = 6.25 \times 10^{-3}$ y (c) $P_o^* = 9.05 \times 10^{-3}$. Los espectros de potencia corresponden a las figuras 3.14 (a), (b) y (c).

del nodo de presión para la cavidad redondeada por la línea con puntos. Conforme aumentamos la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica, la partícula es desplazada hacia el nodo de presión, como observamos de la figura B.4 (a), para la cavidad plana. También, conforme aumenta la cantidad de movimiento agregada aumenta el valor de σ_y . Para la partícula en la cavidad redondeada, la posición estacionaria de la partícula se desplaza hacia el nodo de presión conforme aumentamos la cantidad de movimiento agregada, pero para $P_o^* > 4 \times 10^{-3}$ el desplazamiento ya no sigue la misma tendencia y al mismo tiempo la partícula comienza a oscilar en el eje horizontal y el nodo de presión sufre un desplazamiento en el eje vertical, como podemos ver de la figuras B.4 (b) y (c). Es el movimiento horizontal de la partícula, que no estaba presente en las simulaciones anteriores, el que nos da una clave para entender el movimiento de la partícula para valores altos de P_o^* junto con la posición de los nodos de presión, como veremos más adelante. Podemos decir que existe un valor para la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica $0.003 < P_{oc}^* < 0.0035$ en el cual la partícula comienza a oscilar en el eje horizontal.

En las figuras 3.14 (a), (b) y (c) mostramos la posición vertical sobre el tiempo de la partícula sólida en la cavidad plana para $P_o^* = 4.45 \times 10^{-3}$, $P_o^* = 6.25 \times 10^{-3}$ y $P_o^* = 9.05 \times 10^{-3}$, respectivamente. Al aumentar la cantidad de movimiento agregada, además de aumentar la amplitud de la oscilación de la partícula, también puede pasar por regímenes de oscilación con una frecuencia o dos, como ha venido sucediendo en las simulaciones numéricas previas. Es curioso resaltar que para $P_o^* = 6.25 \times 10^{-3}$ el movimiento de la partícula es más sencillo que para $P_o^* = 4.45 \times 10^{-3}$, que es un valor menor. En las figuras 3.15 (a), (b) y (c) mostramos los espectros de potencia para las figuras mostradas anteriormente y observamos que la presencia de armónicos de la frecuencia de la fuente acústica ya es una constante.

En la figura B.5 (a) mostramos la posición vertical de la partícula para la cavidad redondeada para $\rho_p/\rho_f = 50$ y $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$. De esta figura observamos que la partícula oscila con dos frecuencias, como lo comprobamos en la figura B.5 (b), donde mostramos el espectro de potencia para esa trayectoria. Para este valor de P_o^* la partícula sigue una trayectoria dominada por dos frecuencias y sus armónicos y no presenta movimiento en la dirección horizontal. En las figuras 3.17 (a) y (b) mostramos el movimiento de la partícula en la cavidad redondeada para el eje vertical y horizontal, respectivamente, para $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$. Para este valor de P_o^* la partícula presenta un movimiento horizontal regular, como podemos

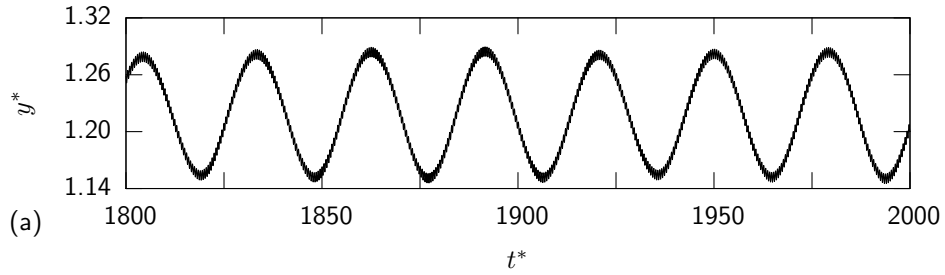


Figura 3.16: Posición vertical de la partícula sólida $\rho_p/\rho_f = 50$ sobre el tiempo en la cavidad redondeada para (a) $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$ y (b) su espectro de potencia.

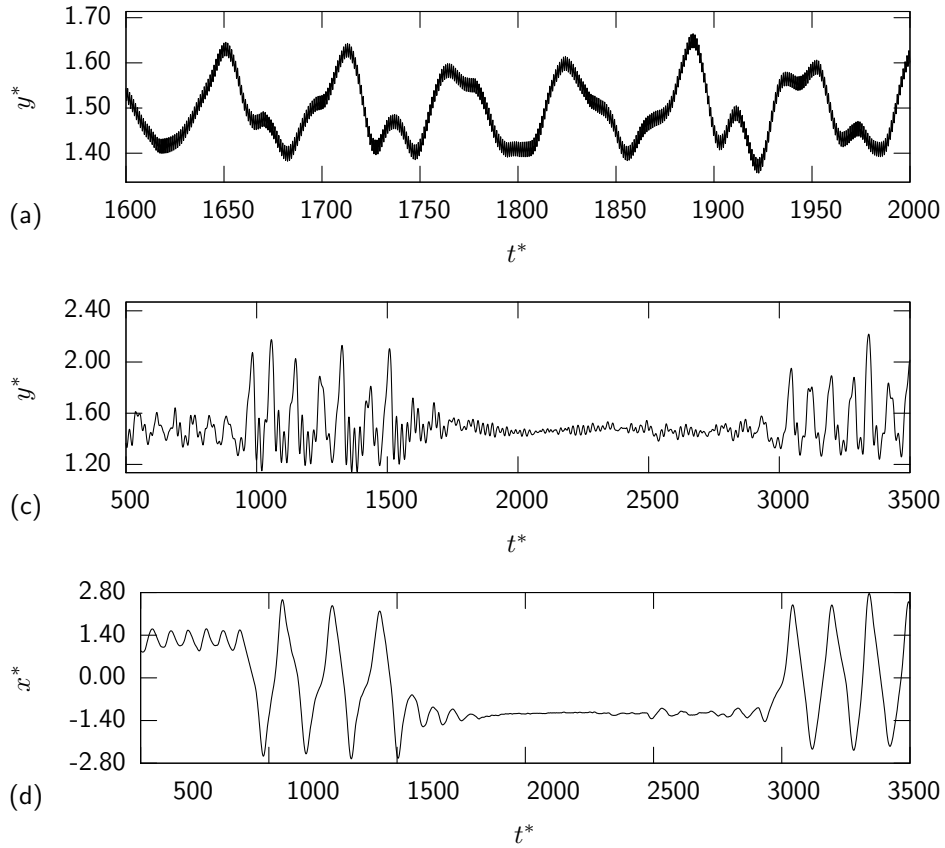


Figura 3.17: (a) Posición vertical y (b) horizontal sobre el tiempo para $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y (c) posición vertical y (d) horizontal sobre el tiempo para $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$.

Figura 3.18: Espectro de potencia del movimiento vertical de la partícula sólida $\rho_p/\rho_f = 50$ sobre el tiempo en la cavidad redondeada para (a) $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$, (b) $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y (c) $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. Los espectros corresponden al movimiento de las partículas mostradas en las figuras B.5 (a), 3.17 (a) y (c).

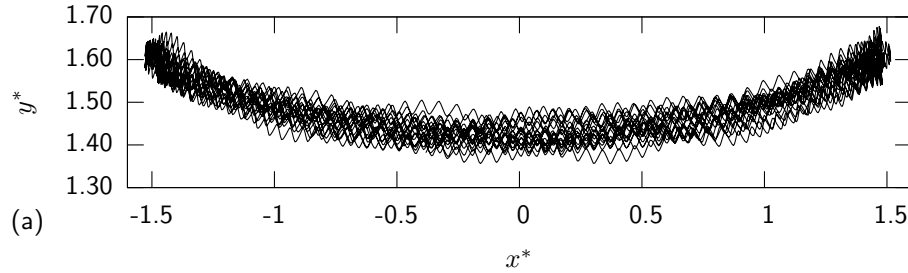


Figura 3.19: Trayectoria en el plano $x - y$ de la partícula sólida en la cavidad redondeada para (a) $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y (b) $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. Las trayectorias corresponden a las mostradas en las figuras 3.17 (a) y (c), respectivamente.

observar de estas dos figuras. De la figura 3.18 (b), que es el espectro de potencia para la trayectoria vertical, observamos que el movimiento de la partícula sigue siendo dominado por dos frecuencias y sus armónicos, siendo una de ellas la frecuencia de oscilación de la fuente acústica. En las figuras 3.17 (c) y (d) mostramos el movimiento vertical y horizontal de la partícula para $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. El movimiento horizontal de la partícula está fuertemente correlacionado con el vertical, como puede verse. La partícula oscila horizontalmente cerca del nodo de presión derecho, luego oscila entre los dos nodos para luego oscilar cerca del nodo de presión derecho. Correspondientemente, las oscilaciones verticales son pequeñas, se amplían cuando la oscilación horizontal pasa del lado izquierdo al lado derecho de la cavidad y es pequeña cuando la posición horizontal vuelve a oscilar alrededor de un nodo. Este comportamiento se repite sin periodicidad aparente, y sabemos que un comportamiento caótico se caracteriza por su aperiodicidad y su sensibilidad respecto a condiciones iniciales [?]. La primera característica se cumple y la sensibilidad respecto a condiciones iniciales puede establecerse del cómputo numérico del exponente de Lyapunov, que se obtiene de la serie temporal de la posición horizontal o vertical de la partícula [?]. Encontramos que el exponente de Lyapunov tiene un valor de 0.05 que es demasiado pequeño para concluir con certeza que el movimiento de la partícula en este caso es caótico. Lo que podemos afirmar, es que se trata de una oscilación compleja y que puede existir un caos transiente [?] o un comportamiento complejo aún cuando el exponente de Lyapunov sea cero. En la figura 3.18 (c) mostramos el espectro de potencia de la oscilación vertical para $P_o^* = 6.54 \times 10^{-3}$, donde podemos identificar la frecuencia de la fuente acústica y sus armónicos y no es posible identificar una única frecuencia menor que la de la

Figura 3.20: Amplitud de las oscilaciones en la presión y la velocidad de izquierda a derecha para (a) $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$, (b) $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y (c) $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$.

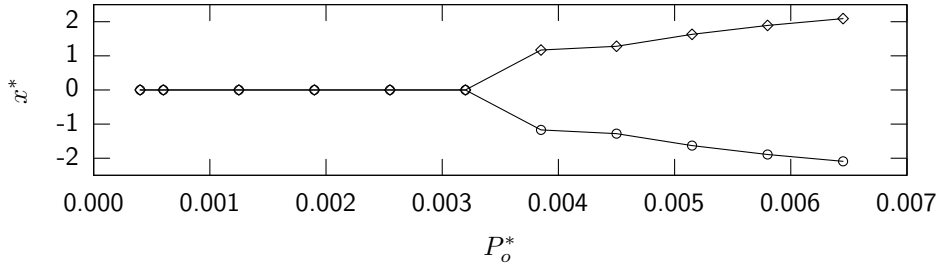


Figura 3.21: Posición de los nodos de presión como función de la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica P_o^* para la cavidad redondeada.

fente acústica como en muchos de los resultados anteriores.

En las figuras 3.19 (a) y (b) mostramos las trayectorias en el plano $x - y$ para $P_o^* = 4.50 \times 10^{-3}$ y $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. La primera es una trayectoria regular, mientras que la segunda parece caótica. Vemos unas manchas oscuras en la figura 3.19 (b) donde la partícula permanece más tiempo, ubicadas en $(-1.4, 1.5)$ y $(1.4, 1.5)$.

Para identificar el origen del movimiento horizontal de la partícula, mostramos las variaciones de las oscilaciones en la presión y la velocidad en la cavidad redondeada. En las figuras 3.20 (a), (b) y (c) mostramos la amplitud de las oscilaciones locales de la presión y velocidad para $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$, $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$ y $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$, respectivamente, donde nos interesa fundamentalmente el nodo de presión inferior. Al aumentar el valor de P_o^* , el nodo de presión inferior se alarga horizontalmente (figura 3.20 (b)) para separarse en dos (figura 3.20 (c)). A pesar de la formación de dos nodos de presión, no ocurre lo mismo con el antinodo de velocidad, sin embargo, las zonas donde se localizan los nuevos nodos de presión son zonas de alta velocidad. La aparición de estos dos nodos de presión explica el movimiento irregular de la partícula para $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. En la figura B.6 mostramos las posiciones horizontales de los nodos de presión como función de la cantidad de movimiento de la fuente acústica. Vemos que podemos identificar P_{oC}^* mencionada antes con el valor para el cual aparecen los dos nodos de presión. Es la aparición de los dos nodos de presión lo que también propicia el complejo movimiento de la partícula en la cavidad redondeada.

3.5. Conclusiones

La conclusión más importante es que el método de la ecuación de Boltzmann en redes (EBR) es capaz de resolver problemas de interacción de partículas sólidas con fluidos compresibles, en particular, el problema de la levitación acústica. También, el método demostró ser capaz de simular problemas con geometrías complicadas. En simulaciones numéricas en ausencia de un campo gravitacional externo, las partículas se dirigieron a los nodos de presión, tanto para la cavidad plana como para la redondeada. Al agregar el campo gravitacional externo, la partícula en la cavidad plana tuvo un desplazamiento en su posición estacionaria mientras que la partícula en la cavidad redondeada apenas si fue notorio el desplazamiento. Esta diferencia se debe a que la fuerza acústica en la cavidad redondeada es mayor que en la cavidad plana.

Al mantener fija la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica y variar la relación de densidades, la posición estacionaria de la partícula se desplazó linealmente en ambas cavidades aproximadamente entre $50 < \rho_p/\rho_f < 200$ con una pendiente de -0.001677 para la cavidad plana y -0.002274 para la cavidad redondeada, por lo que se concluye que la fuerza acústica crece de manera lineal en una pequeña zona. En la cavidad plana, la oscilación vertical de la partícula, medida con la desviación estándar, decrece al aumentar la relación de densidades. Para la cavidad redondeada, la oscilación vertical de la partícula decrece entre $2 < \rho_p/\rho_f < 50$, para luego incrementar su valor hasta alcanzar valores de $\sigma_y = 0.36$. Junto con el aumento de la oscilación vertical, aparece un aumento en el valor de la velocidad máxima del fluido dentro de la cavidad, evidencia de un desplazamiento de la frecuencia de resonancia debido a la presencia de la partícula. Para el movimiento de la partícula en ambas cavidades hay dos tipos de movimiento de la partícula. En el primero, la partícula oscila con la misma frecuencia de la fuente acústica y sus armónicos y con amplitud constante. En el segundo comportamiento, la partícula oscila con frecuencia de la fuente acústica y sus armónicos y aparece otra frecuencia mucho más baja. Cada frecuencia tiene asociada una amplitud de oscilación del movimiento de la partícula, razón por la cual calculamos la desviación estándar del movimiento de la partícula sobre el tiempo.

Al mantener fija la relación de densidades de la partícula en $\rho_p/\rho_f = 50$ y variar la cantidad de movimiento agregada por la fuente, la partícula se desplazó hacia el nodo de presión y aumentó el valor de la oscilación vertical. En la cavidad redondeada, para $P_o^* > 4 \times 10^{-3}$, el valor de la oscilación vertical σ_y aumentó bruscamente y a la par, la partícula comenzó a presentar un movimiento oscilatorio en el eje horizontal. Este comportamiento se debe a la división del nodo de presión. Para valores menores de la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica, el nodo de presión se encontraba en el centro horizontal de la cavidad, y para valores $P_o^* > 4 \times 10^{-3}$ existen dos nodos de presión, ubicados en $(-2, 1.5)$ y $(2, 1.5)$. En todos los experimentos anteriores, la partícula había sido colocada en el centro de la cavidad $(0, 1.5)$ para que alcanzara su posición estacionaria rápidamente. Dado que la posición inicial es un punto inestable, la partícula se movió entre un nodo de presión y otro sin permanecer en alguno de los dos de manera preferencial. Sin embargo, el movimiento de la partícula es inestable independientemente de su

posición inicial. Cuando la colocamos en uno de los nodos de presión $(-2, 1.2)$ también presentó movimientos oscilatorios en el eje horizontal y vertical alrededor de ambos nodos de presión. El movimiento de la partícula, para ambas cavidades, es función de la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica P_o^* y la relación de densidades entre la partícula y el fluido ρ_p/ρ_f . De los experimentos realizados al mantener fija la cantidad de movimiento y variar la relación de las densidades calculamos que la cavidad redondeada es más de cinco veces más efectiva que la cavidad plana para levitar partículas más pesadas. Sin embargo, esta eficiencia tiene una consecuencia directa en la amplitud de la oscilación ya que las oscilaciones mayores se presentaron también en la cavidad redondeada. La aparición de los pares de nodos de presión es función de la cantidad de movimiento agregado por la fuente acústica y es exclusivo para la cavidad redondeada.

Al introducir la partícula sólida dentro de la cavidad redondeada, ésta se sale de resonancia. La resonancia es ahora función no solo de la geometría y frecuencia, sino del tamaño y posición de la partícula sólida. En presencia de partícula el valor de la velocidad máxima puede ser hasta 20 % más grande que en ausencia de la partícula. En las simulaciones presentadas en esta tesis se levitaron partículas con una relación máxima de densidades de $\rho_p/\rho_f = 256$. La relación de densidad entre el poliestireno y el aire es $\rho_p/\rho_f = 83$.

Para concluir, hacemos notar que hemos estudiado un pequeño espacio de parámetros al variar la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica y la relación de densidades entre la partícula y el fluido. El radio de la partícula es también un parámetro de gran importancia, sin embargo lo mantuvimos constante en todas las simulaciones, así como los parámetros geométricos de la cavidad redondeada. Demostramos que el método de la EBR es una herramienta útil para estudiar numéricamente una cavidad y optimizar el parámetro que se desee. Dado el pequeño espacio de parámetros que hemos estudiado, encontramos que la trayectoria de la partícula puede ser muy compleja y encontramos evidencia de que puede ser caótica.

Capítulo 4

Conclusiones

En esta tesis se presentamos la simulación numérica usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes (EBR) de la levitación acústica de una partícula sólida circular bidimensional en una cavidad con un reflector plano y otra con un reflector redondeado y concluimos que el método de la EBR es capaz de simular correctamente el problema de levitación acústica de una partícula sólida.

En el capítulo 2 presentamos como llegar a la ecuación de Boltzmann en redes para la malla $D2Q9$ a partir de la ecuación de transporte de Boltzmann. También obtuvimos las ecuaciones hidrodinámicas para un fluido compresible a partir de la EBR usando una expansión de Chapman-Enskog. Presentamos brevemente la técnica desarrollada por Aidun *et al* [?] para la interacción de partículas sólidas con el método de la ecuación de Boltzmann en redes. Además, describimos el rebote hacia atrás y el rebote hacia atrás a mitad del camino para recrear la condición de no deslizamiento en las paredes así como la manera de agregar cantidad de movimiento para después simular una fuente acústica. Ambas condiciones de frontera las utilizamos para la simulación de la levitación acústica. La validación del método de la EBR se presentó en el apéndice A, donde estudiamos tres problemas y comparamos los resultados de las simulaciones numéricas con los reportados en la literatura.

En el capítulo 3 presentamos los antecedentes de la levitación acústica y resultados de las simulaciones. Los trabajos de King [?] y Gor'kov [?] fueron la base para el comienzo del desarrollo de la teoría de la fuerza acústica actuando sobre una esfera. Realizamos simulaciones numéricas de la levitación acústica en dos cavidades, una con un reflector plano, y la otra con un reflector redondeado optimizado para aumentar la fuerza del campo acústico [?]. Encontramos los dos primeros modos resonantes para la cavidad redondeada monitoreando el valor de la velocidad máxima. Todos los experimentos para ambas cavidades los realizamos en el segundo modo resonante. Los valores de las frecuencias de resonancia encontrados difieren a los reportados por Xie *et al*. Esta diferencia es porque las simulaciones numéricas

las realizamos en dos dimensiones mientras que lo reportado por Xie *et al* es para una cavidad en tres dimensiones. Comprobamos que en ausencia de gravedad, las partículas se dirigen al nodo de presión en ambas cavidades, donde la sumatoria de fuerzas acústicas es cero. En el segundo conjunto de simulaciones mantuvimos constante la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica y variamos la relación de densidades entre la partícula y el fluido. La posición de equilibrio de la partícula, para ambas cavidades, se fue desplazando hacia abajo. En una pequeña zona, el desplazamiento de la posición de equilibrio siguió una línea recta. En la cavidad plana, las oscilaciones en el eje vertical disminuyen conforme la relación de densidades aumenta, pero para la cavidad redondeada, hay una zona donde la oscilación de la partícula en el eje vertical aumenta. Este comportamiento se debe a un desplazamiento en la frecuencia de resonancia debido a la presencia de la partícula sólida [?]. En el tercer conjunto de experimentos mantuvimos constante la densidad y variamos la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica. Conforme aumentamos la cantidad de movimiento, la posición de la partícula se desplaza hacia el nodo de presión más cercano. Existe un valor crítico en la cantidad de movimiento para la cavidad redondeada a partir del cual se forman dos nodos de presión a la misma altura. La aparición de los dos nodos de presión a la misma altura, coincide con un movimiento irregular en el eje vertical. La partícula oscila horizontalmente alrededor de estos dos nodos presentando un comportamiento complejo. Medimos el exponente de Lyapunov buscando que el sistema fuera sensible a las condiciones iniciales, pero el valor del exponente fue tan bajo que no nos permite decir de manera concluyente que el movimiento de la partícula es caótico. Es posible que la trayectoria de la partícula presente un caos transiente, sin embargo es necesario realizar más simulaciones para estudiar con detalle este fenómeno. Todas las trayectorias presentaron un movimiento oscilatorio con frecuencia de la fuente acústica y sus armónicos. Bajo ciertas condiciones, aparece una segunda frecuencia más baja que la de la fuente acústica también con sus armónicos.

El espacio de parámetros que estudiamos en este trabajo se redujo a la variación de la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica para un valor de la relación de densidades de la partícula y el fluido. En otro conjunto de simulaciones numéricas estudiamos el comportamiento de la partícula al variar la relación de densidades y mantener fija la cantidad de movimiento agregada por la fuente acústica. Existen al menos dos parámetros importantes que son el radio de la partícula sólida y los parámetros geométricos de la cavidad redondeada, los cuales se mantuvieron fijos. Con los resultados que hemos presentado, podemos concluir que el método de la ecuación de Boltzmann en redes simula de manera correcta la interacción de una partícula sólida en un fluido compresible.

Durante los estudios de doctorado se presentaron los siguientes trabajos en congresos:

- G. Barrios, R. Rechtman, Lattice Boltzmann equation for natural convection inside a partially heated cavity, Statistical Mechanics, Chaos and Condensed Matter, Roma, Italia, 22 al 24 de septiembre del 2004.
- G. Barrios del Valle, R. Rechtman, J. Rojas, R. Tovar, Convección Natural en una Caja Parcialmente Calentada Usando el Método de la Ecuación de

Boltzmann en Redes, X Congreso Nacional de la División de Dinámica de Fluidos de la Sociedad Mexicana de Física, Hermosillo Son., 25 al 29 de octubre del 2004.

- G. Barrios, R. Rechtman, Levitación Acústica usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes, XI Congreso de la División de Fluidos y Plasmas de la Sociedad Mexicana de Física, Guadalajara, Jal., 17 al 20 de octubre del 2005.
- G. Barrios, R. Rechtman, Interacción de plumas térmicas usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes, XI Congreso de la División de Fluidos y Plasmas de la Sociedad Mexicana de Física, Guadalajara, Jal., 17 al 20 de octubre del 2005.
- G. Barrios, R. Rechtman, Formación de Plumas Térmicas usando el Método de la Ecuación de Boltzmann en Redes, XXI Congreso de la División de Fluidos y Plasmas de la Sociedad Mexicana de Física, San Luis Potosí, San Luis Potosí, 19 de octubre del 2006
- G. Barrios, R. Rechtman, Natural Convection using the Lattice Boltzmann Equation, 2006 APS Division of Fluid Dynamics 59th Annual Meeting, Tampa, Flo., E. U., 19 al 21 de noviembre del 2006.

También se escribió un artículo y se envió para su publicación al *Journal of Fluids Mechanics*, dicho artículo se encuentra en el apéndice B.

Apéndice A

Validación del Método de la Ecuación de Boltzmann en Redes

A.1. Introducción

En este apéndice presentamos brevemente la simulación numérica usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes (EBR) de tres flujos que nos ayudan a validar el código con el cual se realizan simulaciones numéricas de la levitación acústica. En el primer problema, presentado en la sección A.2, medimos la velocidad de propagación de las ondas de choque formadas en un tubo unidimensional con dos zonas de densidad diferentes. Las ondas de choque aparecen en fluidos compresibles y viajan a velocidades supersónicas. En la sección A.3, presentamos la interacción de una partícula circular sólida libre de moverse colocada en el centro de un flujo de Couette. El torque ejercido por el perfil de velocidades sobre la partícula hace que ésta alcance una velocidad angular constante que a su vez es función del número de Reynolds. El último problema, presentado en la sección A.4, es el de una partícula sólida circular que se sedimenta en una cavidad bajo la acción de una fuerza de cuerpo. La dinámica del movimiento de la partícula es función del número de Reynolds. Todos los resultados los obtenemos usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes y los comparamos con los reportados en la literatura. Encontramos que hay un acuerdo entre nuestros resultados y los reportados en la literatura.

Figura A.1: Esquema del tubo bidimensional con la mitad izquierda a ρ_+ y la mitad derecha a ρ_- donde $\rho_+ > \rho_-$ y de largo L_x .

Figura A.2: Evolución temporal del perfil de densidad. Para las condiciones iniciales de este problema $r_c = 0.457539$, $v_s = 0.712$ y $\rho_c = 0.457539$.

A.2. Onda de choque en una cavidad

Se puede obtener una onda de choque si en un tubo cerrado en los extremos izquierdo y derecho y con condiciones periódicas a la frontera en la dirección vertical, como el que mostramos en la figura A.1, establecemos la densidad del lado izquierdo en ρ_+ , y la del lado derecho en ρ_- para $t < 0$ y $\rho_+ > \rho_-$. El fluido contenido en el tubo se encuentra inicialmente en reposo y al retirar la pared central para $t \geq 0$ se forman dos frentes de ondas, una onda de choque que viaja hacia la derecha con velocidad supersónica v_s y una onda de rarefacción que viaja en la dirección opuesta con velocidad subsónica. Al avanzar la onda de choque y la onda de rarefacción, la densidad entre las ondas alcanza un valor ρ_c . Estos valores los podemos calcular con las relaciones de Rankine–Hugoniot [?],

$$v_s^2 = r_c c_s^2, \quad \rho_c = r_c \rho_- \quad \text{y} \quad u_c = \frac{r_c - 1}{\sqrt{r_c}} c_s, \quad (\text{A.1})$$

donde c_s es la velocidad del sonido, v_s es la velocidad de la onda supersónica que viaja hacia la derecha, ρ_c es la densidad en el centro entre los frentes de compresión y rarefacción y u_c es la velocidad a la que crece la zona central. Además r_c es la solución de

$$\log r_c + \log \frac{r_c - 1}{\sqrt{r_c}} = \log \frac{\rho_+}{\rho_-}. \quad (\text{A.2})$$

Realizamos simulaciones numéricas usando el método de la ecuación de Boltzmann en redes para el problema descrito anteriormente. Simulamos un tubo de $L_x = 800$ nodos de longitud y altura $L_y = 10$, $\tau = 0.7$, con densidades $\rho_+ = 0.7$ y $\rho_- = 0.3$ en las mitades izquierda y derecha, respectivamente. Las paredes izquierda y derecha las simulamos usando el rebote hacia atrás, aunque en los resultados presentados la onda de choque no alcanza a rebotar en la pared. En la figura A.2 observamos dos frentes de onda viajando en direcciones opuestas para diferentes tiempos y $\rho_c = 0.457539$ es el predicho por la teoría. Para verificar que el frente de choque avanza con velocidad supersónica v_s en la figura A.3 mostramos el valor de la densidad en la posición $x - v_s t$, para tres valores de t .

Figura A.3: Cada perfil de puntos representa $x - v_s t$, donde v_s es la velocidad de avance del frente supersónico y t es el tiempo transcurrido desde el comienzo del experimento. Para este caso $v_s = \sqrt{r_c} c_s = 0.712$

Figura A.4: Esquema del problema de un cilindro infinito suspendido en un flujo cortante. El cilindro tiene un diámetro D , y la cavidad tiene una altura $h = 5D$ y $2h$ de ancha. El cilindro se coloca en el centro de la cavidad.

Figura A.5: Velocidad angular adimensional para diferentes valores de Re . Los experimentos numéricos se llevaron a cabo en una cavidad con condiciones periódicas en las fronteras izquierda y derecha. La relación de aspecto $h/D = 5$, donde h es la altura de la cavidad y D el diámetro de la partícula.

A.3. Cilindro suspendido en un flujo Couette

Se sumerge un cilindro con la misma densidad que el fluido en el centro de un canal horizontal con condiciones periódicas en las fronteras en el eje horizontal, como mostramos esquemáticamente en la figura A.4. Las paredes superior e inferior se mueven en direcciones opuestas. El canal tiene una altura $h = 5D$ y de largo $2h$, donde D es el diámetro de la partícula suspendida. El número adimensional Re se define como

$$Re = \frac{\gamma D^2}{\nu}, \quad (A.3)$$

donde $\gamma = 2U_p/h$ es la razón de corte definida como la velocidad de la pared U_p entre la altura del canal y ν es la viscosidad del fluido. Si el cilindro, libre de moverse, se encuentra en el centro del canal y su densidad es la misma que la del fluido, éste comenzará a aumentar su velocidad angular hasta alcanzar $\omega^* = \omega/\gamma = 0.5$ para valores de $Re \ll 1$ y disminuye conforme se aumenta el número Re .

Este problema lo resolvemos usando el método de la EBR y comparamos con los resultados experimentales obtenidos por Poe *et al* [?], quién colocó un cilindro en un flujo cortante y midió su velocidad angular terminal, como mostramos en la figura A.5 para diferentes valores de Re . Las simulaciones numéricas las realizamos en una malla de 95×190 , $D = 19$ y $\tau = 0.6$. Los resultados obtenidos usando el método de la EBR no se alejan más de un 5 % de los valores encontrados experimentalmente.

Realizamos otro conjunto de experimentos manteniendo fijo el número de Reynolds en $Re = 0.187$ y variamos el radio de la partícula. Poe *et al* [?] reportaron un valor de $\Omega/\gamma = 0.4820$ para este número de Reynolds. En la figura A.6 (a) mostramos el valor de Ω/γ en función del radio de la partícula. Al aumentar el radio, la representación de la partícula en la malla $D2Q9$ es más precisa y por lo tanto

Figura A.6: (a) Velocidad angular adimensional en función del radio de la partícula y (b) error relativo escalado con valor reportado por Poe *et al* para $Re = 0.187$ y $H = 4D$ es $\Omega/\gamma = 0.4820$, representado por la línea.

Figura A.7: Esquema del problema de sedimentación en una cavidad de ancho $W = 4r$ y alto H . La partícula, inicialmente en reposo, se coloca lejos del centro horizontal en la parte superior de la cavidad. La partícula se sedimenta bajo la acción de una fuerza de cuerpo externa.

los resultados mejoran. En la figura A.6 (b) presentamos el error relativo usando el valor reportado por Poe *et al.* Para un radio de partícula $r = 70.5$ el error relativo es aproximadamente 0.01 % y para $r = 9.5$ el error relativo es menor al 3 %. Para mantener la razón de aspecto de la cavidad, para $r = 70.5$ los experimentos los realizamos en una cavidad de 564×282 nodos. En esta cavidad, el problema se resuelve aproximadamente en 26 horas de tiempo de cómputo en un procesador AMD 64 2400 MHz. Para $r = 9.5$, la cavidad es de 152×76 nodos y se resuelve en aproximadamente 4 horas en el mismo procesador. Dado que el error relativo no es muy grande, y que la cavidad se resuelve en aproximadamente siete veces menos tiempo, escogimos un radio de $r = 9.5$ para las simulaciones de la levitación acústica, y las demás dimensiones las escalamos para mantener las relaciones geométricas.

A.4. Sedimentación de una partícula en una cavidad

En una cavidad de ancho W y alto H colocamos una partícula de radio r lejos de eje vertical del canal, como mostramos esquemáticamente en la figura A.7, y la dejamos sedimentar. La partícula, más densa que el fluido, cae bajo la acción de una fuerza de cuerpo y su trayectoria depende del número de Reynolds, definido como

$$Re = \frac{ur}{\nu}, \quad (A.4)$$

donde u es la velocidad terminal de la partícula y ν la viscosidad del fluido. Otro factor importante es la relación de aspecto del ancho de la cavidad entre el radio de la partícula. Para los experimentos que presentamos a continuación, $W/r = 4$. La posición de la partícula la adimensionalizamos con el ancho de la cavidad

$$x^* = \frac{x}{W}, \quad y^* = \frac{y}{W}, \quad (A.5)$$

donde x y y representan a la coordenada horizontal y vertical, respectivamente.

Este problema ha sido resuelto numéricamente por Feng *et al* [?] usando simulación directa para un amplio rango de valores del número de Reynolds. Feng *et al* reportaron la existencia de cuatro regímenes identificados por el número de Reynolds [?]. En el primer régimen, $0 < Re < 3.0$, la partícula sólida se acerca suavemente hacia el centro de la partícula, como vemos en la figura A.8. En el segundo régimen, $3 < Re < Re_c$, el centro del canal continúa siendo el punto de equilibrio pero ahora, la partícula oscila alrededor del centro antes de alcanzar una posición de equilibrio, como observamos en la figura A.9. Cuando la partícula alcanza un

Figura A.8: Trayectoria de una partícula sólida en una cavidad para $Re = 1.33$ y $Re = 2.18$.

Figura A.9: Trayectoria de una partícula sólida en una cavidad para $Re = 3.87$ y $Re = 6.37$, correspondientes al segundo régimen. La partícula oscila ligeramente alrededor del centro para finalmente alcanzar una posición de equilibrio.

Reynolds crítico Re_c , la posición de equilibrio en el centro de la cavidad se vuelve inestable y la partícula oscila alrededor de esta posición, como vemos en la figura A.10. En la cuarta región, $Re > Re_c$, la partícula oscila fuertemente alrededor del centro con amplitud constante, como vemos en la figura A.11. Los resultados presentados fueron obtenidos en una malla de 39×760 con $\tau = 0.6$ y los regímenes identificados y las trayectorias corresponden a las reportadas por Feng *et al.*

A.5. Conclusiones

En este apéndice demostramos que el método de la ecuación de Boltzmann en redes es capaz de resolver problemas de fluidos compresibles, que es capaz de reproducir el movimiento angular de una partícula sólida en un flujo Couette. Con el problema de Couette escogimos el radio de partícula para realizar las simulaciones numéricas de la levitación acústica. El radio escogido $r = 9.5$ representa un error menor al 3 %. Finalmente simulamos numéricamente el problema de sedimentación de una partícula en un canal y encontramos los cuatro regímenes previamente reportado. Las trayectorias para los números de Reynolds reportados concuerdan con lo obtenido numéricamente. Al pasar por estos problemas y obtener datos que coinciden con los reportados en la literatura, nos aseguramos que el código con el que realizamos las simulaciones numéricas del problema de levitación acústica está bien implementado y nos da la confianza para realizar las simulaciones numéricas.

Figura A.10: Trayectoria de una partícula sólida en una cavidad para $Re = 8.02$, correspondiente al tercer régimen. La amplitud de la oscilación de la partícula alrededor del centro se va reduciendo pero no desaparece.

Figura A.11: Trayectoria de una partícula sólida en una cavidad para $Re = 28.76$, correspondiente al cuarto régimen. La partícula oscila fuertemente alrededor del centro manteniendo su amplitud todo el tiempo.

Apéndice B

Dynamics of an acoustically levitated particle using the lattice Boltzmann method

B.1. abstract

The possibility that the acoustic force inside a cavity may balance the gravitational force on a particle is known as acoustic levitation. Using the lattice Boltzmann equation method we find the acoustic force acting on a rounded particle for two different single axis acoustic levitators in two dimensions, the first with plane waves, the second with a rounded reflector that enhances the acoustic force. With no gravitational force, a particle oscillates around a pressure node, in the presence of gravity the oscillation is shifted a small vertical distance below the pressure node. This distance increases linearly when the density ratio between the solid particle and fluid grows. For both cavities, the particle oscillates with the frequency of the sound source and its harmonics and in some cases there is a much smaller second dominant frequency. When the momentum of the acoustic source changes, the oscillation around the average vertical position can have both frequencies as mentioned before. However, if this quantity is large enough, the oscillations of the particle are aperiodic in the cavity with a rounded reflector.

B.2. Introduction

Acoustic levitation is the possibility that the acoustic force inside a cavity balances the gravitational force on a particle. Acoustic levitation has been used to simu-

late microgravity conditions, for sample positioning, for noncontact measurements of liquid properties, and for fluid dynamics investigation of free drops ([1, 2, 3, 4]).

The acoustic study of a particle in a sound wave was pioneered by [5], who found the force on a solid sphere due to traveling or standing acoustic plane waves and suggested the possibility of acoustic levitation in air. [6] calculated the acoustic potential for a sphere in an ideal fluid and a standing wave from which the force over the sphere can be derived. [7] was the first to report the radiation force over a cylinder due to a traveling wave for an ideal fluid and later [8] developed an expression for the case of a plane standing wave.

In this paper we show that the lattice Boltzmann method (LBM) ([9, 10, 11]) can be used to study acoustic levitation. The method can simulate a compressible fluid with moving boundary conditions. On one hand, it is a compressible method ([12]) capable of simulating acoustic waves with no modifications ([13, 14]). On the other, [15, 16] set the basis for the study of the interaction between free macroscopic particles and the surrounding fluid by implementing no slip boundary conditions between them. Then the total force exerted by the fluid on the particle can be calculated and the particle position and angular position updated. [17] made some modifications to this model to improve the inertial effects and [18] developed an approximation to draw circular boundaries aiming at the improvement of the discretization of solid particles.

Lattice Boltzmann simulations of the motion of a small cylinder in an ultrasound traveling field were carried out by [19]. [20] developed a theory for the acoustic force on cylinders in an inviscid fluid and found a reasonable agreement with his LBM simulations when the viscous effects are negligible ([21]). Both authors used the approach proposed by [22, 23] for the no slip boundary condition between particle and fluid, which limits the inertial effects of the solid particle. In the numerical simulations carried out by [24] a solid particle was released inside a plane standing wave in the absence of a body force. The particle traveled to a pressure node, where the time average acoustic force is zero.

In Sec. B.3 we briefly discuss the lattice Boltzmann method, mentioning the flows with which our numerical scheme was validated. In Sec. B.4 we present nondimensional quantities and two different two dimensional cavities for which numerical simulations were performed. The first cavity has a flat reflector, the second one a rounded reflector similar to the one used by [25]. Since our numerical simulations are two dimensional, the particle is an infinite cylinder. In Sec. B.5 we present numerical simulations of acoustic levitation in both cavities in the second resonant mode. In the absence of an external gravitational field, the particle oscillates around the pressure node in agreement with previous numerical simulations ([26]). In the presence of an external gravitational field, the particle oscillates a small distance below the pressure node. The particle always oscillates with the frequency of the sound source and its harmonics but for some values of the external parameters, a smaller frequency appears and for others the motion is aperiodic, although we could not establish that it is chaotic. We end with some conclusions in Sec. B.6.

B.3. The lattice Boltzmann equation method

In the $D2Q9$ model, space is discretized in a two dimensional square lattice and only nine velocities are allowed: $\mathbf{c}_0 = (0, 0)$, $\mathbf{c}_1 = (1, 0)$, $\mathbf{c}_2 = (0, 1)$, $\mathbf{c}_3 = (-1, 0)$, $\mathbf{c}_4 = (0, -1)$, $\mathbf{c}_5 = (1, 1)$, $\mathbf{c}_6 = (-1, 1)$, $\mathbf{c}_7 = (-1, -1)$, and $\mathbf{c}_8 = (1, -1)$. The particle distribution functions $f_i(\mathbf{r}, t)$, $i = 0, \dots, 8$, are defined as the fluid density at a site \mathbf{r} in a square lattice at time t with velocity \mathbf{c}_i , $i = 0, \dots, 8$. The distribution functions evolve according to the lattice Boltzmann equation

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau} \left[f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (\text{B.1})$$

where τ is the dimensionless relaxation time and $f_i^{(eq)}$ are the local equilibrium distribution functions,

$$f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) = w_i \rho \left[1 + 3\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2} (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} u^2 \right]. \quad (\text{B.2})$$

In this equation $w_i = 4/9, 1/9, 1/36$ for $|\mathbf{c}_i| = 0, 1$ and $\sqrt{2}$ respectively, and ρ and \mathbf{u} are the density and velocity defined by

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{r}, t) \mathbf{c}_i. \quad (\text{B.3})$$

The viscosity ν is related to the relaxation time τ by $\nu = c_s^2(\tau - 1/2)$, $c_s = 1/\sqrt{3}$ is the speed of sound and $p = \rho c_s^2$ where p is the pressure.

The right hand side of Eq. (B.1) is a relaxation term that approximates Boltzmann's collision term ([?]) and the first term on the left hand side takes into account streaming to neighbouring sites. It is convenient to consider that during an iteration step, the fluid evolves by collisions (relaxations to local equilibrium) followed by streaming. To simulate the acoustic source of the levitator, the term $3w_i P c_{iy}$ is added to Eq. (B.1) on the sites of the lattice that coincide with the acoustic source. It is not hard to show that in the collision step this term introduces a change in momentum density $\Delta(\rho \mathbf{u})$ in the y direction of magnitude P . Then, there is a pressure density of the acoustic source that is also proportional to P . In what follows we let P oscillate, $P = P_o \cos \omega_o t$, where P_o and ω_o are the amplitude and frequency of the momentum density applied at every site of the acoustic source, or the pressure amplitude and frequency of the acoustic source.

No slip boundary conditions are simulated on the surface of the solid particle and the total force and torque are evaluated ([?]). With these quantities one can find how the position of the particle and the angular velocity change. The walls of the cavity are simulated using bounceback boundary conditions reversing the direction of the incoming distributions. To validate our numerical scheme we simulated several flows. We found good agreement with the results of the sedimentation of a circular particle in a narrow channel for different Reynolds numbers reported by [?]. We measured the acoustic force on a rigid cylinder in a plane standing wave and found a good agreement with the results reported by [?]. To determine an appropriate

Figura B.1: (a) Single axis acoustic levitator with a plane reflector. The vibrating source is located at the top of the cavity; $b^* = 5.092$. (b) Single axis acoustic levitator with a rounded reflector with $b^* = 5.092$, $B^* = 2b^*$, $R^* = 12.244$, $h_b^* = 0.1377$, $W^* = 30$, and $h_a^* = 0.01028$. For both cavities H^* is adjusted to the second resonant mode, $\tau = 0.6$, and $\rho_f = 0.6$.

lattice size, we compared our results with those of [?] for the rotation of a particle in Couette flow. When the radius of the particle is 9.5 lattice units, we found an error smaller than 3 %. On the other hand, in acoustic levitation in a rounded three dimensional cavity [?] used a particle of $2mm$ radius. From these two values we found the size of the lattices of the two cavities used in the simulations.

B.4. Dimensionless quantities and acoustic levitators

The dimensionless quantities for the acoustic levitation problem, denoted by an asterisk, are

$$x^* = kx, \quad y^* = ky, \quad r^* = kr, \quad t^* = \frac{t}{T} \quad (\text{B.4})$$

where x , y , r and t are the horizontal and vertical position, the radius of the particle, and time respectively, T is the period and $k = 2\pi/\lambda$ is the wave number with λ the wavelength of the standing wave. The dimensionless momentum density P^* is

$$P^* = \frac{PkT}{\pi r^2 \rho_f}, \quad (\text{B.5})$$

where ρ_f is the fluid density.

Numerical simulations were carried out in two different single axis acoustic cavities shown schematically in Fig. B.1 (a) and (b). The first is formed by a plane vibrating source at the top and a plane reflector at the bottom with periodic boundary conditions in the horizontal direction. The second cavity has the same shape and parameters as the one presented by [?] but in two dimensions. The vertical walls are far away from the acoustic source. Since b^* has the same value in both cavities, the acoustic source inputs are equal.

B.5. Numerical simulations

The first step is to establish ω_o , the frequency of a standing wave in the second resonant mode in both cavities without a particle. We generate a standing wave by adding momentum at the sites of the vibrating source periodically, $P^* = P_o^* \cos \omega_o t$, as mentioned in Sec. B.3. The initial conditions for the numerical simulations are different for each cavity. For the flat cavity, we start with a given velocity and

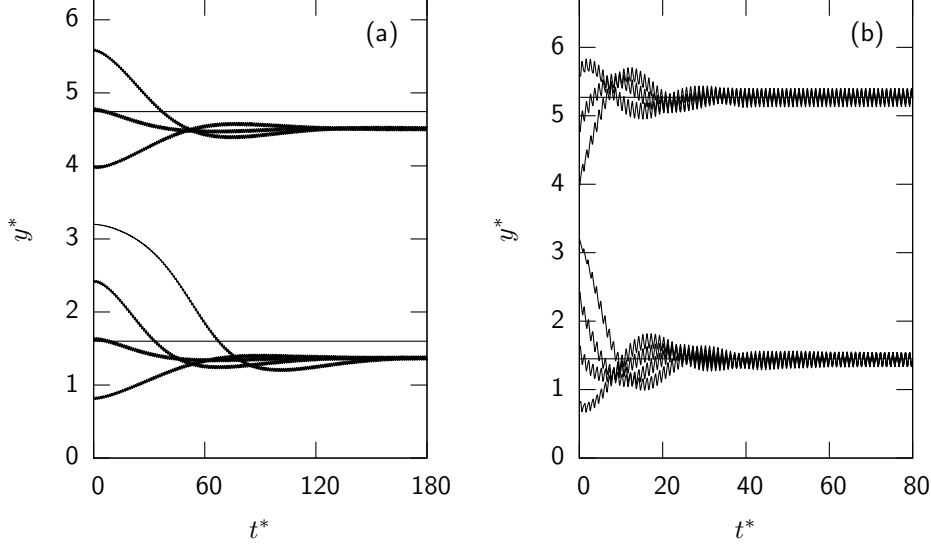


Figure B.2: Vertical positions of particles with $r^* = 0.25$ and twice the density of the fluid in the presence of gravity for (a) the flat cavity and (b) the rounded one. The horizontal lines represent the vertical position of the pressure node. The oscillations in the flat cavity are barely visible. For both cavities $P_o^* = 1.6 \times 10^{-3}$. Lattices of 163×201 and 901×251 nodes were used for the flat and rounded cavity respectively.

pressure profile knowing that in a standing wave the phase differs by $\pi/2$ and that $v_1 = p_1/\rho_f c_s$ with v_1 and p_1 the velocity and pressure amplitudes ($p_1 \propto P_o$). Then $\omega_o = 6\pi c_s/4H$ where H is the height of the cavity ([?]). For the rounded cavity, we start with the fluid at rest and add momentum periodically to the acoustic source of the levitator. After approximately 300 periods a standing wave is formed inside the cavity and we measure the maximum velocity amplitude. In the resonant modes the velocity amplitude is a maximum and this gives us the value of ω_o for the second resonant mode.

In the absence of an external gravitational field, a particle will move to a pressure node. In the presence of gravity, the particle's stationary vertical position is shifted to a place where the time average acoustic force on the particle is equal to its weight. In Figs. B.2 (a) and (b) we show the vertical positions of several particles for both cavities. The horizontal lines indicate the position of the pressure nodes. The displacement of the stationary position from the pressure node is larger in the flat cavity than in the rounded one, which is barely noticeable. However, we find larger oscillations in the latter.

In the following, we report the results of numerical simulations in the second resonant mode with the particle initially near the pressure node closest to the reflec-

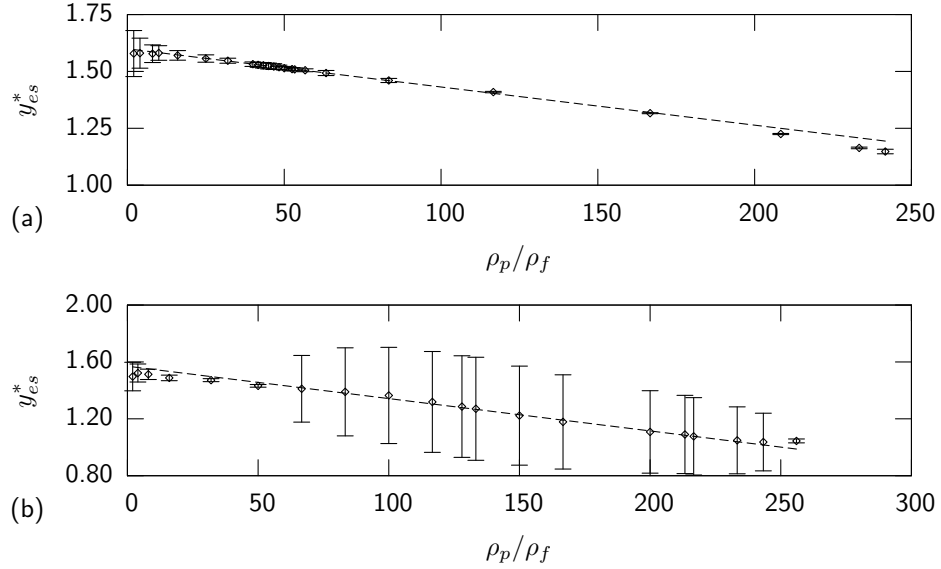


Figura B.3: Vertical stationary position y_s^* with its standard deviation as ρ_p/ρ_f varies for (a) the flat and (b) the rounded cavity. In the numerical simulations $P^* = 0.01$ for the flat cavity and $P^* = 0.0019$ for the rounded one. The slopes of the linear fit are (a) -0.00168 and (b) -0.00227 .

tor. In Figs. B.3 (a) and (b) we show y_s^* , the time average of the vertical position of the particle after a long transient, as the ratio of the density of the particle ρ_p and the fluid ρ_f varies for a fixed value of P_o^* . We also show the standard deviation which is a measure of the amplitude of oscillation of the particle around y_s^* . There is a near linear behaviour in both cavities which implies that the mean acoustical force is proportional to the deviation of y_s^* from the pressure node. A detailed analysis of all trajectories indicates the presence of a small amplitude oscillation with frequency ω_o and its harmonics. The large values of the standard deviation of y_s^* in the rounded cavity for $50 \lesssim \rho_p/\rho_f \lesssim 250$ are the consequence of large amplitude oscillations of frequency ω_1 and its harmonics with $\omega_1 \ll \omega_o$.

In Figs. B.4 (a) and (b) we show y_s^* with its standard deviation as P_o^* , the amplitude of the applied external momentum varies, keeping ρ_p/ρ_f fixed. As P_o^* grows, y_s^* approaches the pressure node in the flat cavity. For the rounded cavity, the situation is more complex, since the pressure node's position depends on P_o^* as we also show in Fig. B.4 (b). In order to begin to explain the results found for the rounded cavity we show the vertical positions for three values of P_o^* in Figs. B.5. In Figs. B.5 (a) and (b) there is a small amplitude oscillation with frequency ω_o and its harmonics, while in Fig. B.5 (c) this oscillation has been filtered out. In Fig. B.5 (a), that corresponds to the smallest value of P_o^* in Fig. B.4 (b), the power spectrum shows a second frequency ω_1 , much smaller than ω_o , together with its harmonics. These low frequency oscillations are present in all the numerical simulations reported

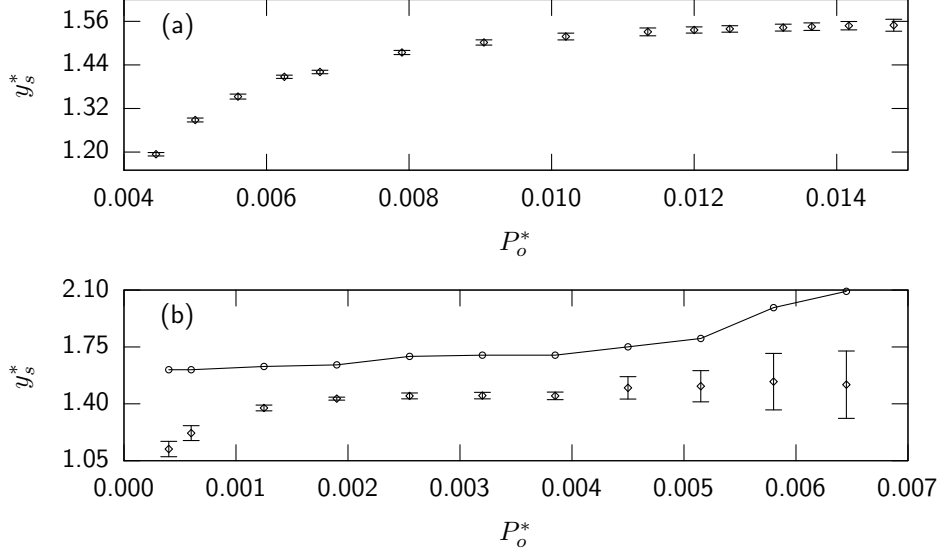


Figure B.4: Vertical stationary position y_s^* with its standard deviation as P_o^* varies with $\rho_p/\rho_f = 50$ for the (a) flat and (b) rounded cavities. In the flat cavity, the pressure node is at $y^* = 1.6$. The curve in (b) shows the vertical position of the pressure node.

in Fig. B.4 (b) except the one for the largest value of P_o^* . In Fig. B.5 (b), for P_o^* where the standard deviation of y_s^* in Fig. B.4 (b) begins to grow, and (c), for the last value of P_o^* in that Fig. the oscillations are more complex. The origin of this change is in the horizontal motion of the particle which was not present before due to a doubling of the pressure node nearest the rounded reflector for $P_o^* > P_{oc}^*$ with P_{oc}^* between 0.0032 and 0.0038 as we show in Fig. B.6. For $P_o^* > P_{oc}^*$, except for the last value of P_o^* shown in Fig. B.4 (b) the particle oscillates horizontally with frequencies ω_o and its harmonics and a much smaller frequency ω_2 and its harmonics.

The particle oscillation for the largest value of P_o^* of Fig. B.4 (b) is qualitatively different from the others. In Fig. B.5 (c) and (d) we show the vertical and horizontal motion of the particle. Large amplitude horizontal oscillations correspond to large amplitude vertical oscillations. The particle oscillates horizontally near one of the pressure nodes, then it oscillates around both of them until it is attracted by the other one. This behaviour goes on irregularly for a long time which is not shown in the Fig. and eventually ($t^* > 16,000$) the particle oscillates between both pressure nodes. Evidence of the aperiodic vertical oscillations can be found in the power spectrum shown in Fig. B.7 where we cannot identify a frequency ω_1 in contrast to the power spectrum for the vertical motion of the particle shown in Fig. B.5 (a) for which ω_1 is clearly distinguishable. From the time series of the horizontal or vertical position of the particle we evaluated the largest Lyapunov exponent and found a

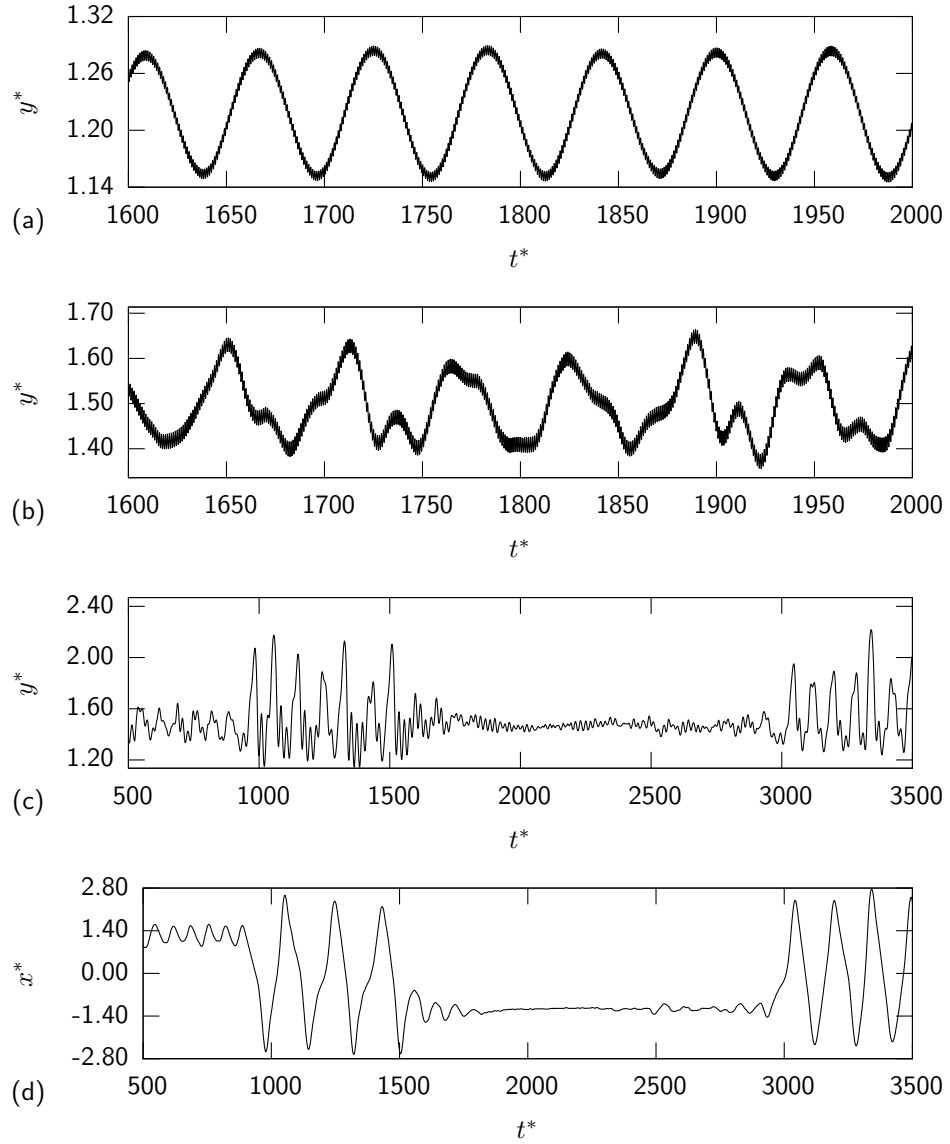


Figura B.5: Vertical positions for (a) $P_o^* = 6.0 \times 10^{-4}$ and (b) $P_o^* = 4.5 \times 10^{-3}$. Vertical (c) and horizontal (d) positions of a particle with $P_o^* = 6.45 \times 10^{-3}$. In the three simulations, $\rho_p/\rho_f = 50$ for the rounded cavity.

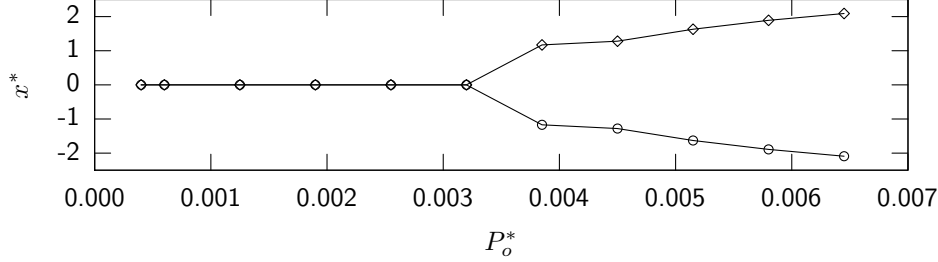


Figura B.6: Horizontal position of the pressure node with $\rho_p/\rho_f = 50$. We identify $P_{o_c}^*$ between 0.0032 and 0.0038.

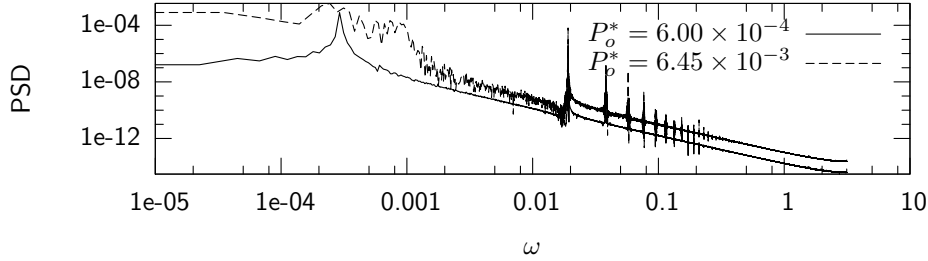


Figura B.7: Power spectra of the vertical motion shown in Fig. B.5 (a), continuous curve with $\omega_o = 0.019126$ and $\omega_1 = 0.0002913$ and the vertical motion shown in Fig. B.5 (c) with the same value of ω_o .

value much too small to conclude that the motion of the particle is chaotic ([?, ?]). It could happen that there is a chaotic transient ([?]) or a complex behaviour even if the maximum Lyapunov exponent is zero.

B.6. Concluding remarks

The lattice Boltzmann method can account for the interaction of a compressible fluid with a solid moving particle in acoustic levitation. We performed numerical simulations when the ratio of densities of the particle and fluid varies for one fixed value of the momentum added by the acoustic source for the flat and rounded cavities. The average height at which the particle oscillates varies linearly with the density ratio for both cavities. The particle oscillates with the frequency of the acoustic source and its harmonics and in some cases with a much smaller frequency. When the momentum of the acoustic source varies for a fixed value of the density ratio, the particle in the flat cavity oscillates around a vertical position that approaches the pressure node as the momentum increases, again with the frequency of the acoustic source and its harmonics and in some cases with a smaller

frequency. For the rounded cavity, the appearance of two pressure nodes destabilizes the oscillation which may turn to be aperiodic due to the horizontal motion of the particle around the two pressure nodes. We speculate that the particle is the source of an asymmetric horizontal force that gives rise to such an aperiodic behaviour. We could not find a chaotic motion but we did not explore the whole parameter space.

Although we have focused on the motion of the particle, we can also focus on the fluid. For example, we measured the streaming velocity defined as the time averaged velocity at a site and our results agree with those of ([?], who found that the maximum streaming velocity is almost 2 % of the maximum velocity inside the cavity.

Using the LBM, simulations in complicated geometries can be carried out. These may help to determine the shift in the resonant frequency due to the presence of a particle and optimize the geometry of the reflector for a single or multiple axis levitator.

Acknowledgments

The authors thank Guadalupe Huelsz for suggesting the study of acoustic levitation and proofreading the manuscript. The authors also thank Héctor Cortés, Francisco Mandujano, Eduardo Ramos, and Jorge Rojas for fruitful discussions and suggestions. Partial economic support from CONACyT project U41347 is acknowledged. G. Barrios thanks CONACyT for a postgraduate scholarship.