ANEXO: DESARROLLO DE LAS ECUACIONES DEL TRABAJO

0.1. ECUACIÓN DE CONTINUIDAD:

Consideremos un cubo infinitesimal de fluido, de aristas dx, dy, dz. Tomaremos este cubo infinitesimal como fijo y solo analizaremos al flujo de fluido a través suyo. El volumen de esta región infinitesimal será por tanto constante, $dV = dxdydz$. Queremos conocer cómo varía la masa en una de estas regiones infinitesimales debido al flujo del fluido, esto es, conocer $\partial m/\partial t$. La definición de densidad permite escribir esta variación neta de masa como

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho dV = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t}\, dxdydz\ .$$

Por otra parte, esta variación de masa se debe producir necesariamente por un flujo neto de materia a través de las paredes de nuestro cubo infinitesimal. Supondremos que en cada cara de nuestro cubo infinitesimal podemos considerar la densidad como una constante. Si consideramos, por ejemplo, el flujo a través de las caras perpendiculares al eje X tenemos que en la cara situada en x (A_x) la variación de masa es

$$\left.\frac{\partial m}{\partial t}\right|_x = \left.\frac{\partial}{\partial t}\right|_x \int_V \rho\, dxdydz = \int_{A_x} \rho v_x\, dydz$$

siendo v_x la componente en el eje X de la velocidad del fluido en la cara dada por $dydz$. En la cara situada en $x + dx$ el flujo de fluido, ρv_x, es distinto que en la cara situada en x. Desarrollando este flujo a primer orden podemos tomar

$$[\rho v_x]|_{x+dx} = [\rho v_x]|_x + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x)\, dx$$

con lo que la variación de masa en la cara situada en $x + dx$ resulta

$$\left.\frac{\partial m}{\partial t}\right|_{x+dx} = [\rho v_x\, dydz]|_{x+dx} = \int_{A_x} \rho v_x\, dydz + \int_V \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x)\, dxdydz\ .$$

Por lo tanto, el flujo neto de fluido a través de las caras perpendiculares al eje X es

$$\left.\frac{\partial m}{\partial t}\right|_x - \left.\frac{\partial m}{\partial t}\right|_{x+dx} = -\int_V \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x)\, dxdydz\ .$$

Repitiendo el mismo proceso para los ejes Y y Z obtenemos

$$\left.\frac{\partial m}{\partial t}\right|_y - \left.\frac{\partial m}{\partial t}\right|_{y+dy} = -\int_V \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y)\, dxdydz\ ,$$

$$\left.\frac{\partial m}{\partial t}\right|_z - \left.\frac{\partial m}{\partial t}\right|_{z+dz} = -\int_V \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z)\, dxdydz\ ,$$

con lo que la variación neta de masa en nuestro cubo infinitesimal es

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dxdydz = -\int_V [\frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z)] dxdydz = -\int_V \nabla\cdot(\rho\vec{v}) dxdydz.$$

Juntando la segunda igualdad con la cuarta en esta última expresión obtenemos la conocida como **ecuación de continuidad** de los fluidos en su expresión diferencial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}) = 0 \, . \tag{1}$$

En el caso de que tengamos un fluido cuya densidad sea constante tanto en el espacio como en el tiempo, como es el caso de los fluidos incompresibles, la ecuación de continuidad adopta la forma:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \tag{2}$$

0.2. ECUACIÓN DE EULER:

Vista la ecuación de continuidad, uno puede preguntarse por como aplicar el principio de conservación de la energía a un fluido, es decir, como varía el movimiento de un fluido cuando se aplica sobre el una fuerza. Para ello, consideremos de nuevo el cubo infinitesimal de aristas dx, dy, dz. La fuerza total que actúa sobre este cubo infinitesimal, $d\vec{F}$, será la suma de la fuerza debida a la presión del fluido sobre las paredes del cubo, $d\vec{F}_p$, y las fuerzas externas que actúen sobre este cubo de fluido, $d\vec{F}_{ext}$.

Para estudiar el efecto de la presión del fluido procedemos de manera análoga al caso de la ecuación de continuidad. Empezamos, sin pérdida de generalidad, por la cara perpendicular al eje X situada en x. La fuerza (perpendicular a esta cara) debido a la presión del fluido es

$$d\vec{F}_p(x) = p(x)\vec{\imath}\, dydz \, ,$$

mientras que en la cara situada en $x + dx$ es

$$d\vec{F}_p(x+dx) = -p(x+dx)\vec{\imath}\, dydz = -[p(x) + \frac{\partial p}{\partial x}dx]\vec{\imath}\, dydz \, ,$$

de forma que la fuerza neta en el eje X debido a la presión del fluido es

$$d\vec{F}_{p;x} = d\vec{F}_p(x) + d\vec{F}_p(x+dx) = -\frac{\partial p}{\partial x}\vec{\imath}\, dxdydz \, .$$

Este resultado se extiende inmediatamente a los ejes Y y Z, obteniendo

$$d\vec{F}_{p;y} = d\vec{F}_p(y) + d\vec{F}_p(y+dy) = -\frac{\partial p}{\partial y}\vec{\jmath}\, dxdydz \, ,$$

$$d\vec{F}_{p;z} = d\vec{F}_p(z) + d\vec{F}_p(z+dz) = -\frac{\partial p}{\partial z}\vec{k}\, dxdydz \, ,$$

obteniendo una fuerza neta debido a la presión del fluido en nuestro cubo infinitesimal de

$$d\vec{F}_p = d\vec{F}_{p;x} + d\vec{F}_{p;y} + d\vec{F}_{p;z} = -\nabla p\, dxdydz \, .$$

En cuanto a las fuerzas externas, podemos expresarlas en general como

$$d\vec{F}_{ext} = \vec{g}\, dm = \rho\vec{g}\, dxdydz$$

donde, con frecuencia, la fuerza externa que actuará sobre nuestro fluido será la gravedad y $\vec{g} = -g\vec{k}$ siendo g la aceleración de la gravedad en la superficie terrestre.

Estas fuerzas que actúan sobre nuestro cubo infinitesimal provocan una variación del momento lineal expresada como

$$d\vec{F} = dm\frac{d\vec{v}}{dt} = \rho\frac{d\vec{v}}{dt}\,dxdydz\ .$$

De esta forma, obtenemos la siguiente igualdad, que expresa la condición de conservación de la energía en nuestro fluido:

$$d\vec{F}_p + d\vec{F}_{ext} = (-\nabla p + \rho\vec{g})\,dxdydz = \rho\frac{d\vec{v}}{dt}\,dxdydz = d\vec{F}\ .$$

Combinando la segunda y la tercera ecuación en la expresión anterior obtenemos la **ecuación de Euler**:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \vec{g} \tag{3}$$

0.3. ECUACIONES DE NAVIER-STOKES:

Como ya hemos mencionado, todos los fluidos presentan viscosidad, por lo que la ecuación de Euler no describe rigurosamente la dinámica de un fluido. Esta viscosidad produce la aparición de una fuerza de rozamiento en el fluido, $d\vec{F}_{roz}$, en la dirección del movimiento. Esta fuerza de rozamiento, que varía a lo largo del fluido, al actuar sobre una superficie diferencial, dS, provoca la aparición de una tensión tangencial, que se define como $\tau_{ij} = dF_{roz;i}/dS_j$, es decir, un tensor cuyas componentes son las derivadas de la componente de la fuerza de rozamiento en el eje i sobre la superficie perpendicular al eje j.

En general, la expresión de esta tensión tangencial puede ser muy compleja, sin embargo, hay un caso sencillo de especial importancia: los conocidos como **fluidos newtonianos**. Estos fluidos son aquellos en los que se satisface la siguiente relación lineal entre la tensión tangencial y el gradiente de la velocidad:

$$\tau_{ij} = \mu\frac{\partial v_i}{\partial n_j}\ ,$$

donde $\partial v_i/\partial n_j$ es la derivada de la componente de la velocidad en la dirección en la dirección i con respecto a la dirección del eje j y μ es el coeficiente de viscosidad dinámica. Esta condición de fluido newtoniano puede parecer demasiado restrictiva, sin embargo, en la práctica muchos fluidos de interés (el agua y el aire, por ejemplo) satisfacen esta relación para la tensión tangencial.

Para introducir la viscosidad en la ecuación de Euler volvemos a considerar el cubo infinitesimal de fluido de aristas dx, dy, dz pero teniendo en cuenta que ahora no solo tenemos que considerar las fuerzas debidas a la presión del fluido y las fuerzas externas, sino también la contribución de las fuerzas de rozamiento.

Empezamos, de nuevo, considerando las fuerzas en la dirección del eje X sobre las distintas caras del cubo, teniendo en cuenta que, debido a las fuerzas de rozamiento, tendremos contribución a las fuerzas en el eje X sobre las caras perpendiculares a los ejes Y y Z. Sobre la cara situada en x tenemos

$$d\vec{F}_{xx}(x) = (p(x) - \tau_{xx}(x))\vec{\imath}\,dydz\ ,$$

mientras que sobre la cara situada en $x + dx$ tenemos

$$d\vec{F}_{xx}(x+dx) = -(p(x+dx)-\tau_{xx}(x+dx))\vec{\imath}dydz = -(p(x)+\frac{\partial p}{\partial x}dx-\tau_{xx}(x)-\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}dx)\vec{\imath}dydz,$$

luego la fuerza neta en la dirección del eje X sobre las caras perpendiculares al eje X es

$$d\vec{F}_{xx} = d\vec{F}_{xx}(x) + d\vec{F}_{xx}(x+dx) = (-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x})\vec{\imath}\,dxdydz\;.$$

Para las caras perpendiculares a los ejes Y y Z se procede de forma análoga, teniendo en cuenta que no hay contribución a la fuerza en la dirección del eje X sobre estas caras debida a la presión sino solo contribución de las fuerzas de rozamiento:

$$d\vec{F}_{xy} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y}\vec{\imath}\,dxdydz\;,$$

$$d\vec{F}_{xz} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z}\vec{\imath}\,dxdydz\;,$$

por lo tanto, la fuerza neta en la dirección del eje X sobre todas las caras del cubo infinitesimal de fluido resulta:

$$d\vec{F}_{x} = (-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z})\vec{\imath}\,dxdydz\;.$$

Siguiendo el mismo razonamiento sobre los ejes Y y Z se obtiene

$$d\vec{F}_{y} = (-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z})\vec{\jmath}\,dxdydz\;,$$

$$d\vec{F}_{z} = (-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z})\vec{k}\,dxdydz\;.$$

Haciendo uso de la condición de fluido newtoniano, podemos expresar los términos que dependen del tensor de tensiones tangenciales en función de la velocidad del fluido, obteniendo una fuerza neta debido a la presión y las fuerzas de rozamiento de

$$d\vec{F} = (-\nabla p + \mu\nabla^2\vec{v})\,dxdydz\;.$$

Introduciendo esta fuerza en la ecuación de Euler obtenemos las conocidas como **ecuaciones de Navier-Stokes**, que ya incorporan a la dinámica del fluido los efectos de la viscosidad:

$$\rho\frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla p + \mu\nabla^2\vec{v} + \rho\vec{g}\;. \tag{4}$$

Observamos que, suponiendo la viscosidad del fluido nula, se recupera la ecuación de Euler como cabría esperar.

0.4. EXPANSIÓN DE CHAPMAN-ENSKOG:

Como se ha señalado en el trabajo, la mejora que introduce el LBM frente al LGA consiste en la sustitución de las variables booleanas en cada nodo por funciones de distribución, f_i, que describen un promedio estadístico. La ecuación que describe la evolución temporal de estas funciones es:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e_i}\cdot\Delta x, t+\Delta t) = f_i(\mathbf{x},t) + \Omega_i(f(\mathbf{x},t))\;, \tag{5}$$

donde Δx es la mínima distancia entre dos primeros vecinos de la malla y Δt es el paso de tiempo. De nuevo, Ω es un operador de colisión que refleja la evolución de las funciones de distribución f_i tras una colisión en un nodo.

Dada la definición de las funciones f_i como promedios estadísticos de las partículas virtuales, es inmediato que se pueden recuperar algunas magnitudes macroscópicas como la densidad del fluido (ρ) o la velocidad macroscópica del fluido ($\mathbf{u}$) a partir de estas funciones de distribución como

$$\rho(\mathbf{x},t) = \sum_i f_i(\mathbf{x},t) \qquad \rho(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = \sum_i f_i(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{e_i}(\mathbf{x},t)\,. \tag{6}$$

Para garantizar que este método permite discribir razonadamente la dinámica de fluidos se debe comprobar que en el límite macroscópico se recuperan las ecuaciones de Navier-Stokes. Esto se consigue por medio del conocido como método de **expansión de Chapman-Enskog**, que consiste en desarrollar la función de distribución f_i y el operador de colisión Ω_i en series de potencias. El primer orden de este desarrollo permite recuperar la ecuación de continuidad mientras que el segundo recupera las ecuaciones de Navier-Stokes.

Si consideramos que en nuestra red Δx y Δt son parámetros del mismo orden ($\Delta x \sim \Delta t \sim \epsilon$), podemos desarrollar el término de la izquierda en la ecuación (5) por medio de una serie de Taylor hasta segundo orden

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{e_i}\cdot\epsilon, t+\epsilon) = f_i(\mathbf{x},t)+\epsilon\left[\mathbf{e_i}\cdot\nabla f_i + \frac{\partial f_i}{\partial t}\right]+\epsilon^2\left[\frac{1}{2}(\mathbf{e_i}\cdot\nabla)^2 f_i + \mathbf{e_i}\cdot\nabla\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2}\right]+O(\epsilon^3).$$

Introduciendo este desarrollo en la ecuación (5), se llega a

$$\mathbf{e_i}\cdot\nabla f_i + \frac{\partial f_i}{\partial t} + \epsilon\left[\frac{1}{2}(\mathbf{e_i}\cdot\nabla)^2 f_i + \mathbf{e_i}\cdot\nabla\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2}\right] = \frac{\Omega_i(f_i)}{\epsilon}\,. \tag{7}$$

El objetivo ahora es obtener un desarrollo del operador de colisión en función de f_i. Para ello, se considera que la función f_i se puede expresar como la suma de dos contribuciones: una función de equilibrio (f_i^{eq}) y un término perturbativo de primer orden (f_i^{neq}). Para poder recuperar las ecuaciones de Navier-Stokes en el límite macroscópico se impone que la función de equilibrio, al igual que f_i, debe satisfacer las condiciones en (6).

Para desarrollar el límite macroscópico, el método de Chapman-Enskog distingue dos órdenes de tiempo en las derivadas:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon\frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2\frac{\partial}{\partial t_2} \qquad ; \qquad \nabla = \epsilon\,\nabla_1\,,$$

donde t_1 hace referencia a la escala de tiempo relacionada con la convección y t_2 a la escala de tiempo relacionada con la difusión, cuya contribución se supone de menor orden que la de convección. Análogamente, el término de no equilibrio de la función de distribución también se desarrolla en su contribución de convección y su contribución de difusión como

$$f_i = f_i^{eq} + \epsilon f_i^{neq} = f_i^{eq} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)}\,,$$

donde los términos de convección y difusión deben satisfacer las condiciones

$$\sum_i f_i^{(k)} = 0 \qquad ; \qquad \sum_i f_i^{(k)}\mathbf{e_i} = 0\,,$$

con $k = 1, 2$.

El objetivo es desarrollar en series de potencias todos los términos en el lado izquierdo de la ecuación (7) y comparar términos de igual orden en ϵ. En primer lugar, el operador de colisión se puede desarrollar hasta segundo orden como

$$\Omega_i(f_i) = \Omega_i(f_i^{eq}) + \epsilon \, \frac{\partial \Omega_i(f_i^{eq})}{\partial f_j} \, f_j^{(1)} + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \Omega_i(f_i^{eq})}{\partial f_j} \, f_j^{(2)} + \frac{\partial^2 \Omega_i(f_i^{eq})}{\partial f_j \partial f_k} \, f_j^{(1)} f_k^{(1)} \right) .$$

Teniendo en cuenta que, despejando Ω_i en la ecuación (7), se comprueba que $\Omega_i \longrightarrow 0$ cuando $\epsilon \longrightarrow 0$, concluimos que $\Omega_i(f_i^{eq}) = 0$. A continuación, despreciamos los términos con derivadas superiores y mantenemos exclusivamente los términos con derivada primera:

$$\Omega_i(f_i) = \epsilon \, \frac{\partial \Omega_i(f_i^{eq})}{\partial f_j} \left(f_j^{(1)} + \epsilon f_j^{(2)} \right) = \epsilon \, \frac{\partial \Omega_i(f_i^{eq})}{\partial f_j} f_j^{neq} = \frac{\partial \Omega_i(f_i^{eq})}{\partial f_j} (f_j - f_j^{eq}) .$$

En este punto, se introduce la conocida como aproximación **Bhatnagar–Gross–Krook (BGK)**, que consiste en tomar como termino de colisión

$$\frac{\partial \Omega_i(f_i^{eq})}{\partial f_j} = -\frac{1}{\tau} \delta_{ij} ,$$

siendo τ un tiempo de relajación característico del fluido. De esta forma, el operador de colisión en aproximación BGK se obtiene como:

$$\Omega_i(f_i) = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{eq}) . \tag{8}$$

Volviendo a la ecuación (7), el lado izquierdo se puede desarrollar término a término hasta segundo orden en ϵ:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \epsilon \, \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t_1} + \epsilon^2 \left(\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t_1} + \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t_2} \right) ,$$

$$\mathbf{e_i} \cdot \nabla f_i = \epsilon \, \mathbf{e_i} \cdot \nabla_1 f_i^{eq} + \epsilon^2 \mathbf{e_i} \cdot \nabla_1 f_i^{(1)} ,$$

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} = \epsilon^2 \frac{\partial^2 f_i^{eq}}{\partial t_1^2} ,$$

$$(\mathbf{e_i} \cdot \nabla)^2 f_i = \epsilon^2 (\mathbf{e_i} \cdot \nabla_1)^2 f_i^{eq} ,$$

$$\mathbf{e_i} \cdot \nabla \frac{\partial f_i}{\partial t} = \epsilon^2 \, \mathbf{e_i} \cdot \nabla_1 \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t_1} .$$

Igualando los términos del mismo orden en ϵ en la ecuación (7) se obtienen las siguientes dos ecuaciones:

$$\frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t_1} + \mathbf{e_i} \cdot \nabla_1 f_i^{eq} = -\frac{f_i^{(1)}}{\tau} ,$$

$$\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t_1} + \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t_2} + \mathbf{e_i} \cdot \nabla_1 f_i^{(1)} + \frac{1}{2} (\mathbf{e_i} \cdot \nabla_1)^2 f_i^{eq} + \mathbf{e_i} \cdot \nabla_1 \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t_1} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_i^{eq}}{\partial t_1^2} = -\frac{f_i^{(2)}}{\tau}$$

Sumando en la primera de estas ecuaciones a todos los primeros vecinos de cada nodo se recupera inmediatamente la ecuación de continuidad. La segunda ecuación conduce a la ecuación de Navier-Stokes, pero para ello, previamente se debe especificar la función de equilibrio que se debe emplear. El LBM emplea como función de equilibrio la distribución de Boltzmann (el empleo de esta distribución de probabilidad es lo que da nombre al método), que desarrollada hasta segundo orden en la velocidad del fluido toma la forma:

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left(1 + \frac{\mathbf{e_i} \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e_i} \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2c_s^2} \right) ,$$

donde c_s es la velocidad del sonido en el fluido y ω_i son los pesos que miden la probabilidad de interacción de un nodo con cada uno de sus vecinos. Estos pesos dependen de la malla que se considere para simular el fluido y se suelen escoger atendiendo a razonamientos geométricos.

En el caso de la malla D2Q9, los pesos tienen los valores

$$\omega_i(D2Q9) = \begin{cases} 4/9 & \text{si } i = 0 \\ 1/9 & \text{si } i = 1, 2, 3, 4 \\ 1/36 & \text{si } i = 5, 6, 7, 8 \, , \end{cases} \tag{9}$$

mientras que para la malla D3Q15 se tiene

$$\omega_i(D3Q15) = \begin{cases} 2/9 & \text{si } i = 0 \\ 1/9 & \text{si } i = 1, 2, 3, 4, 5, 6 \\ 1/72 & \text{si } i = 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14 \, . \end{cases} \tag{10}$$

Imponiendo que la función de equilibrio satisfaga las condiciones de suma a todos los primeros vecinos, se obtiene que el valor de la velocidad del sonido en el fluido en unidades de la red es $c_s = 1/\sqrt{3}$ y, por tanto, la función de equilibrio se escribe como

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left(1 + 3\mathbf{e_i} \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2}(\mathbf{e_i} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}|\mathbf{u}|^2 \right) \, . \tag{11}$$

Introduciendo esta expresión para la función de equilibrio en el desarrollo en serie a segundo orden y sumando a todos los vecinos, se obtiene

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \, \mathbf{u} \right) = -\frac{1}{3} \nabla \rho + \frac{2\tau - 1}{6} \rho \, \nabla^2 \mathbf{u} \, , \tag{12}$$

que se corresponde con la ecuación de Navier-Stokes sin gravedad, tomando $p = \rho/3$. Por comparación con Navier-Stokes, se concluye también que la viscosidad cinemática esta relacionada con el tiempo de relajación τ como

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \, . \tag{13}$$