

"Elaboración y comparación de dos códigos abiertos de CFD para el análisis de un fluido en estado transitorio mediante la aplicación de las ecuaciones de Navier Stokes y el método de Lattice Boltzmann"

María José Acosta Ayala
Ricardo David Ortega del Ángel

Asesor: Rafael Medina Noguerón

Instituto Politécnico Nacional
Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica Unidad Ticomán
Ciudad de México, México

22 de julio de 2020

1. Introducción

Durante los últimos años, la industria de la ingeniería ha intentado reducir costos y tiempos de respuesta ante las problemáticas diarias a las que se enfrenta, por ejemplo, el diseño de un nuevo producto o el análisis de errores durante los procesos de manufactura e investigaciones de accidentes (industria aeronáutica). Para ello, se han desarrollado métodos de simulación numérica que pretenden recrear la realidad con el fin de estudiar los fenómenos físicos. Estos métodos se han desarrollado de manera particular y se han comercializado mediante la venta de licencias para software. Ante el alto costo monetario de las licencias, la industria ha optado por la implementación del código abierto aplicado a la dinámica de fluidos computacionales (CFD por sus siglas en inglés *Computational Fluid Dynamics*). Esta herramienta no exige un costo por su utilización y, de igual manera, busca en un futuro sustituir la elaboración de prototipos para pruebas experimentales, reduciendo así costos y tiempos durante la optimización de un producto [1].

Un código abierto consiste en el desarrollo colaborativo de un software cuyo código fuente, documentación y herramientas es accesible a todo público [2].

El presente trabajo plantea el desarrollo de dos códigos libres de CFD. El primero será capaz de aplicar la teoría de medio continuo, mediante el uso de la discretización de las ecuaciones de Navier Stokes y el segundo código utilizará la aproximación a la teoría de la dinámica molecular a través del método de Lattice Boltzmann Bhatnagar-Gross-Krook por sus siglas en inglés (BGK-LBM).

Ambos códigos serán comparados con el fin de que el lector aprenda y comprenda las ventajas y desventajas de cada uno, contribuyendo a motivar a la industria a buscar alternativas prácticas que permitan un desarrollo de la tecnología.

2. Antecedentes

2.1. Uso de la teoría de medio continuo y la discretización por diferencias finitas

Para resolver un fluido mediante la teoría de medio continuo se utiliza la discretización en tiempo y espacio de las ecuaciones de Navier Stokes.

Existen diferentes métodos de discretización. Cada uno ofrece ciertas ventajas y desventajas y por ello las aplicaciones son diferentes. Los métodos de discretización más comunes son los siguientes:

- Método de diferencias finitas (FDM)
- Método de volúmenes finitos (FVM)
- Método de elementos finitos (FEM)

El método de las diferencias finitas ha sido utilizado para desarrollar códigos de CFD de capacidades limitadas, debido a su alta precisión pero poca adaptabilidad a geometrías complejas y en algunas ocasiones lentitud de obtener un resultado convergente. Se puede encontrar en el área académica y de investigación más que en una aplicación industrial con

casos de estudio sencillos como el escalón, Ahmed body, un cilindro perpendicular al flujo, esfera, etc.

Las aproximaciones por diferencias finitas son los más simples y antiguos métodos para resolver ecuaciones diferenciales parciales. Ya era usado por Euler en el año 1700 aplicado a una dimensión y fue extendido a a dos dimensiones por Runge en 1908. Sin embargo, la verdadera investigación de las técnicas de diferencias finitas en aplicaciones numéricas comenzó en los años 50 con la aparición de las primeras computadoras que ofrecieron las condiciones mas convenientes para indagar en los métodos numéricos.

En el ámbito académico se pueden encontrar un sinfín de códigos basados en diferencias finitas, pues el objetivo es introducir a los estudiantes a la formación en la dinámica de fluidos computacional, lo cual se logra fácilmente con el método de diferencias finitas ya que es el más sencillo de entender y de programar. Es también sin duda, el método sobre el cual se basan las otras metodologías.

En el ámbito industrial, la metodología de las diferencias finitas no es muy útil ya que no resulta eficiente para la evaluación de productos con geometrías complejas como un perfil alar, un avión, un auto, entre otros.

A pesar de sus limitantes existen ciertos softwares comerciales aplicados a la industria que utilizan esta metodología, entre los cuales se pueden encontrar:

FLOW-3D

En su ultima versión ofrece los tres métodos de discretización conocidos entre los cuales esta el método de diferencias finitas. El método de diferencias finitas es utilizado en conjunto con el método de volúmenes finitos.

HEAT 2 and HEAT 3

Es un código de computadora para flujos bidimensionales (HEAT 2) y tridimensionales (HEAT 3) en estado transitorio y estacionario usado principalmente por universidades e institutos de investigación.

Ambos programas resuelven la ecuación de conducción de calor por el método explícito de las diferencias finitas.

Dune (Distributed and Unified Numerics Environment)

DUNE es de carácter libre registrado bajo la licencia pública. La principal idea de DUNE es crear interfaces que permitan el uso eficiente de antiguas y nuevas librerías, soportando aplicaciones de alto desempeño computacional. No es un software basado en el método de diferencias finitas, sin embargo permite la implementación de este y cualquier modificación al algoritmo de MDF (Método de diferencias finitas).

2.2. El método de Lattice Boltzmann

En 1988 el Método de lattice Boltzmann, también conocido en castellano como *el método de boltzmann por redes* fue presentado por McNamara y Zanetti para dar solución a los inconvenientes mostrados por los autómatas celulares de un gas reticular (**Lattice Gas Cellular Automata, LGCA**). La investigación de dicho autómata prometía una forma revolucionaria de llegar a la solución de un fluido, sin embargo presentaba muchas dificultades.

Se trabaja con promedios obtenidos en ciertas regiones de un reticulado o enrejado, de manera que los valores que forman el promedio varíen muy poco en tiempo y espacio. El promedio de estas variables es representado por una función de distribución la cual será usada para cubrir una cierta área del reticulado en vez de un solo nodo.

Los valores promedio resultantes permiten la obtención de agrupaciones de propiedades que pueden ser tratadas como una sola, esto dará lugar a un incremento en el espaciado (incremento de micro-escala a meso-escala) y un nuevo paso temporal (*timestep*). Con el tiempo la solución planteada por McNamara y Zanetti cambiaría hasta llegar a la siguiente ecuación.

$$f_i(r + v_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(r, t) + \frac{\Delta t}{\tau} [f_i^{eq}(r, t) - f_i(r, t)] \quad (1)$$

La ecuación 1 representa la aproximación BGKW del método de lattice Boltzmann y es la principal herramienta de trabajo para la solución de fluidos. Se discretiza y se asume que es válida únicamente a lo largo de direcciones específicas (*enlaces*) en un enrejado. A partir de este punto se obtienen diferentes modelos de redes entre los cuales se pueden encontrar *D1Q3*, *D2Q5*, *D3Q15*, mismos modelos que son el fundamento de la programación del método de lattice Boltzmann.

El uso de la aproximación BGKW promete una mayor estabilidad comparado con la discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes ya que evita el uso de una ecuación de acoplamiento como la ecuación de Poisson y es regido únicamente por la ecuación 1 en su forma unidimensional, bidimensional o tridimensional según sea requerida. [4]

Algunos códigos y softwares que utilizan el método de lattice Boltzmann son los siguientes:

2.2.1. OpenLB

Es un código libre basado totalmente en el método de lattice boltzmann, se puede utilizar para simulaciones en 2D y 3D. Esta hecho en lenguaje C++ y ofrece una gran versatilidad de condiciones de frontera para redes ya programadas las cuales gracias a la orientación de objetos se pueden combinar y fácilmente utilizar en una misma simulación.

2.3. Palabos

Esta programado en lenguaje C++.

Contiene interfaces de programación adicionales para lenguajes python y java. No cuenta con una interfaz gráfica y se necesita cierta programación para correr una simulación.

Se recomienda únicamente a investigadores e ingenieros con bases sólidas acerca del método de lattice boltzmann. Es capaz de combinar una vasta cantidad de modelos físicos y aun así mantener la eficiencia que caracteriza al método de lattice boltzmann en simulaciones en paralelo.

2.4. PowerFLOW

Es el único código de CFD comercial utilizado en la industria. Su potencial se ubica en la industria automotriz para velocidades en donde el flujo se puede considerar incompresible. Utiliza los dos métodos descritos anteriormente, las ecuaciones de Navier-Stokes y lattice Boltzmann. Para zonas de desprendimiento de flujo se debe establecer regiones en donde se construirán las redes de Boltzmann con un determinado tamaño. De esta manera resuelve el fluido alrededor del carro mediante las ecuaciones de Navier-Stokes y en las zonas de alta probabilidad de desprendimiento de flujo, utiliza el método de lattice Boltzmann, el cual solo esta disponible en 3 modos de redes (D3Q15, D3Q19 y D3Q27) según el nivel de detalle que se necesite. Es utilizado por compañías como Ford y Volvo en la industria automotriz comercial y en la industria de carreras para categorías GT, NASCAR y LeMans.

3. Marco teórico

El método favorito de la industria para resolver un fluido es la aplicación de la teoría del medio continuo mediante las ecuaciones de Navier-Stokes. Este método consiste en la obtención de una solución aproximada de dichas ecuaciones utilizando métodos numéricos, los cuales son programados y ejecutados mediante computadoras, tomando en cuenta múltiples variables físicas en un cierto número de iteraciones y un tiempo de simulación dado, con el fin de obtener un resultado final convergente y cercano a la realidad.

El uso de un método numérico incorrecto para resolver el fluido puede causar inestabilidad, imprecisión en el resultado final o consumir más tiempo computacional del que es necesario para converger, esto también depende de la manera en la que el algoritmo de solución del software maneje los errores acumulados de los métodos numéricos en las diferentes variables del fluido como la viscosidad, la presión, la velocidad, densidad, etc.

Se puede apreciar entonces, que la dinámica de fluidos computacional (**CFD**) es multidisciplinaria, incluyendo aspectos puramente matemáticos, computacionales e ingenieriles, y el resultado final es la suma total de la interacción de diferentes procesos que involucran estas tres disciplinas.

El método de las diferencias finitas es el enfoque más antiguo para discretizar las ecuaciones diferenciales parciales de Navier-Stokes en su forma diferencial. Se toma una ecuación diferencial parcial y se sustituye por un conjunto finito de ecuaciones algebraicas en términos de una o más variables dependientes evaluadas en las coordenadas indicadas. Un ejemplo de un conjunto de ecuaciones algebraicas son las series de Taylor.

El método de las diferencias finitas dificulta la solución del fluido alrededor de geometrías complejas, sin embargo, para geometrías fácilmente adaptables a una malla cartesiana (*figuras cuadradas*), y con flujo a un Reynolds moderado, la solución se ha encontrado precisa y estable. Se debe tomar en cuenta que existe un error de truncamiento, el cual naturalmente se obtiene, al usar un método de aproximación y no un método matemático exacto.

La escala que se aprecia en el método de las diferencias finitas es macroscópica y utiliza la teoría del medio continuo.

Existe un enfoque discreto en el que se analiza cada una de las partículas que forman un dominio, para ello se deben identificar las fuerzas inter-moleculares, la posición y velocidad de cada partícula en cada instante de tiempo y resolver ecuaciones diferenciales ordinarias. A este

enfoque se le conoce como dinámica molecular (MD) y tiene gran versatilidad pero su costo computacional es exageradamente alto.

Afortunadamente existe un punto medio entre estas dos maneras de abordar la dinámica de fluidos y se llama el **Método de Lattice Boltzmann (LBM)**. La principal idea de este método es eliminar la brecha entre la escala micrométrica de la dinámica molecular y la escala macrométrica de la teoría del medio continuo. El método de lattice Boltzmann pretende utilizar lo mejor de los dos mundos, no estudia el comportamiento de cada partícula en el fluido pero tampoco las considera a todas como similares (*teoría del medio continuo*). El método de lattice Boltzmann agrupa colecciones de partículas mediante conceptos de mecánica estadística y las trata como unidades en el volumen de control. La propiedad de cada agrupación de partículas es representada por una función de distribución.

4. Planteamiento del problema

Actualmente existen diferentes medios para estudiar la dinámica de fluidos como lo son el túnel de viento y software de CFD. Los software tienen como base las ecuaciones de Navier Stokes o el método de lattice Boltzmann. La selección de cualquiera de estos métodos repercutirá en el resultado final, en la estabilidad de la solución y su convergencia. Para el ingeniero de CFD resulta difícil encontrar la correcta combinación de variables que funcionen en un caso de estudio. Por ello, en el presente trabajo se estudian dos métodos con el fin de evaluar su comportamiento y los resultados que arrojan permitiendo al ingeniero de CFD a conocer cuales son las ventajas y desventajas, ya que el enfoque debe ser el correcto desde el inicio del planteamiento de una simulación.

5. Objetivo

5.1. Objetivo general

Elaborar dos códigos abiertos de CFD en Python, capaces de aplicar las ecuaciones de Navier Stokes utilizando el método de discretización de diferencias finitas, así como el método de Lattice Boltzmann respectivamente, con el fin de analizar un fluido en estado transitorio para el caso general del escalón.

5.2. Objetivos Específicos

- Programar el método para obtener la solución de un fluido en estado transitorio mediante las ecuaciones de Navier-Stokes.
- Programar el método de Lattice Boltzmann.
- Simular el caso general del escalón en ambos códigos
- Obtener y comparar resultados.

6. Hipótesis general

Es posible comparar el método de lattice Boltzmann y el método de discretización de las ecuaciones de Navier Stokes por diferencias finitas mediante el desarrollo de dos códigos abiertos de CFD en Python que resuelven un fluido en estado transitorio para el caso general del escalón.

6.1. Hipótesis particular

1. Es posible determinar qué método es más eficaz para el estudio de un fluido en estado transitorio.
2. Es posible determinar el método que involucra menor costo computacional.
3. Es posible que al comparar los resultados obtenidos por ambos métodos se observe gran afinidad.

7. Justificación

El método de Lattice Boltzmann es presentado en el campo de la dinámica de fluidos computacional como una herramienta para la investigación, sin embargo, su importancia recae no solo en aplicaciones académicas sino también en aplicaciones industriales.

Debido a su excelente estabilidad numérica y gran precisión, juega un papel esencial como herramienta para el entendimiento de los micro y macro fluidos.

Por otro lado, la teoría del medio continuo permite el análisis de un fluido a escala macroscópica. Esta teoría, a diferencia del método de lattice Boltzmann, requiere un alto costo computacional para mantener el detalle adecuado a nivel microscópico.

El correcto uso de cada uno de los métodos según las condiciones del problema a resolver resulta favorable en costo computacional y en precisión de los resultados.

Es por esto que el alumnado de ESIME Ticomán debe ampliar su criterio y comprender la manera correcta de utilizar los dos métodos de solución de un fluido, conocer sus ventajas y desventajas y obtener la experiencia en CFD adecuada mediante el uso del software libre descrito en este documento. Esto permitirá que los egresados de la carrera de Ingeniería Aero-náutica puedan incrementar su competitividad a nivel internacional y puedan apoyar el diseño y desarrollo de nuevas tecnologías y productos.

8. Alcance

Este proyecto es un primer enfoque hacia el estudio de flujo transitorio mediante el uso de dos métodos diferentes para llegar a la solución de un fluido. Estos son: la teoría del medio continuo a través de la discretización de las ecuaciones de Navier Stokes y el método de Lattice Boltzmann.

El estudio de flujo transitorio es un ejemplo en el cual es necesario estudiar la estabilidad numérica de una solución, su tiempo computacional y la complejidad de alcanzar resultados precisos. Por tal motivo, en el presente documento, se estudiará el caso general del escalón puesto que su sencilla geometría da lugar a una amplia formación de zonas de desprendimiento de flujo que afectan las variables antes mencionadas. De igual manera, el caso general del escalón favorece la comparación de resultados con otros códigos de CFD.

Se pretende que esta herramienta, sirva como una fuente de aprendizaje a los alumnos de ESIME Ticomán y al ser un código libre continúe en desarrollo por la misma comunidad.

Esta tesis se enfoca en la programación de dos algoritmos numéricamente estables para implementar los dos métodos por separado, con el fin de obtener una comparación cuyos resultados establezcan las bases de un código robusto que, en un futuro, utilice los dos modos de solución de manera eficiente en una misma simulación.

8.1. Entregables

8.1.1. Código libre de CFD

Se entregará a la ESIME Ticomán el código libre, funcional y terminado según el alcance establecido en esta tesis. De igual manera se elaborará un manual de usuario con el fin de incentivar el uso de dicho software a otros alumnos.

9. Metodología a seguir

Para la estructura de esta investigación se utilizará una metodología Deductiva. Partiremos de lo general a lo específico utilizando artículos científicos, así como libros donde se expliquen las bases de estos métodos. Se partirán de las ecuaciones generales hasta llegar al desarrollo del código.

10. Contenido

Se desarrollarán nueve capítulos de los cuales, los primeros dos serán dedicados a una introducción a los diferentes métodos que se van a abordar. Posteriormente, en los capítulos tres y cuatro se describirá de manera breve la teoría detrás de los métodos de lattice Boltzmann y Navier Stokes. Los siguientes dos capítulos serán dedicados al planteamiento y desarrollo del código libre, así como se describirá de manera breve el caso general del escalón y la importancia de su estudio para la realización de la presente tesis. Los capítulos siete y ocho englobarán los resultados obtenidos utilizando cada método. Finalmente, el capítulo nueve será dedicado a un análisis y comparación de ambos métodos.

Sección I: Estado del Arte

Capítulo 1. El método de diferencias finitas en códigos de CFD

Capítulo 2. El método de lattice Boltzmann

Sección II: Marco Teórico

Capítulo 3. Navier-Stokes y el método de las diferencias finitas

Capítulo 4. Fundamentos teóricos del método de lattice Boltzmann

Sección III: Simulaciones de Navier-Stokes y lattice Boltzmann

Capítulo 5. Caso de estudio y condiciones

Capítulo 6. Desarrollo del código

Sección IV: Resultados y conclusiones

Capítulo 7. Resultados de Navier Stokes

Capítulo 8. Resultados de lattice Boltzmann

Capítulo 9. Conclusiones

Referencias

- [1] John D. Anderson. *Computational fluid dynamics : the basics with applications*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, New York, 1995.
- [2] R.Stallman. *Free Software Free Society*. Free software foundation, Boston, 2002. <https://www.gnu.org/philosophy/fsfs/rms-essays.pdf>.
- [3] H.K. Versteeg and W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Pearson Education Limited, 2007.
- [4] A. A Mohamad. *Lattice Boltzmann Method*. Springer Verlag, 1^a edition, 2011. Recuperado el 04 de julio de 2019, de <https://link-springer-com.focus.lib.kth.se/book/10.1007%2F978-0-85729-455-5>.
- [5] Shiyi Chen and Gary D. Doolen. Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30:329–364, 11 2003. Recuperado el 04 de julio de 2019, de <https://tinyurl.com/y2my87gy>.