

TESIS CARRERA DE DOCTORADO EN CIENCIAS DE
LA INGENIERÍA

SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL FENÓMENO DE
EBULLICIÓN EMPLEANDO EL MÉTODO DE LATTICE
BOLTZMANN

Ezequiel O. Fogliatto

Doctorando

Dr. Federico E. Teruel

Director

Dr. Alejandro Clausse

Co-director

Miembros del Jurado

Dr. J. J. Jurado (Instituto Balseiro)

Dr. Segundo Jurado (Universidad Nacional de Cuyo)

Dr. J. Otro Jurado (Univ. Nac. de LaCalle)

Dr. J. López Jurado (Univ. Nac. de Mar del Plata)

Dr. U. Amigo (Instituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche)

2 de Septiembre de 2020

Departamento de Mecánica Computacional – Centro Atómico
Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A mi familia

Índice de símbolos

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xi
1. Introducción	1
2. Fundamentos de lattice Boltzmann	3
2.1. Naturaleza cinética del método	3
2.1.1. Función de distribución de equilibrio	4
2.1.2. La ecuación de Boltzmann	5
2.1.3. Ecuaciones de conservación macroscópicas	5
2.2. Discretización del espacio de velocidades	7
2.2.1. Adimensionalización	8
2.2.2. Expansión en series de Hermite	8
2.2.3. Discretización de la función de distribución de equilibrio	11
2.2.4. Discretización de la función de distribución	12
2.2.5. Conjunto discreto de velocidades	12
2.3. Discretización del espacio y tiempo	13
2.4. Operadores de colisión	15
2.5. La expansión de Chapman-Enskog	15
2.6. Overview de LBM	15
3. Simulación de flujo multifásico	17
3.1. Lattice Boltzmann para flujo multifásico	17
3.2. El modelo pseudopotential	23
3.2.1. Ecuaciones de estado y la regla de construcción de Maxwell	24
3.2.2. Incorporación de ecuaciones de estado en el potencial de interacción	28
3.2.3. Adicionales?	29

3.2.4. La condición de estabilidad mecánica y el problema de inconsistencia termodinámica	29
3.3. El modelo isotérmico de Li et al.	30
3.4. Validación	34
3.4.1. Construcción de Maxwell	34
3.4.2. Estratificación de un fluido van der Waals	34
Bibliografía	37

Índice de figuras

3.1. Diagrama $p - v$ para la ecuación de van der Waals. Se destacan las isothermas supercríticas (rojo), crítica (negro) y subcríticas (azul). . . .	25
3.2. Ejemplo de aplicación de la regla de construcción de Maxwell. Dada una isoterma del diagrama $p - v$, los volúmenes de coexistencia son aquellos para los que las áreas A y B son iguales.	26
3.3. Densidades de coexistencia, en unidades reducidas, para diferentes ecuaciones de estado.	28

Índice de tablas

2.1. Ejemplos de conjuntos de velocidades	14
---	----

Capítulo 1

Introducción

Sarasa

Capítulo 2

Fundamentos de lattice Boltzmann

En este capítulo se describirán los fundamentos necesarios y la sarasa obligatoria para más o menos entender el detalle de un modelo de lattice Boltzmann. Poner acá la idea de mostrar este camino para llegar a lo que nos interesa de LB. Se puede comenzar mencionando el origen como autómatas celulares, y el posterior descubrimiento como forma discreta de la ecuación de Boltzmann. En definitiva, ésta última es la que abre el camino a usarlo como método de resolución de PDE's. Ver rápido en Huang, Sukop, Lu.

2.1. Naturaleza cinética del método

La descripción matemática de la dinámica de fluidos se basa en la hipótesis de un medio continuo, con escalas temporales y espaciales suficientemente mayores que las asociadas a la naturaleza atomística subyacente. En este contexto, suelen encontrarse referencias a descripciones microscópicas, mesoscópicas o macroscópicas. La descripción microscópica, por un lado, hace referencia a una descripción molecular, mientras que la macroscópica involucra una visión continua completa, con cantidades tangibles como densidad o velocidad del fluido. Por otro lado, entre ambas aproximaciones se encuentra la teoría cinética mesoscópica, la cuál no describe el movimiento de partículas individuales, sino de distribuciones o colecciones representativas de dichas partículas.

La variable fundamental de la teoría cinética se conoce como función de distribución de partículas (*particle distribution function*, o pdf por sus siglas en inglés), que puede verse como una generalización de la densidad ρ y que a su vez tiene en cuenta la velocidad microscópica de las partículas $\boldsymbol{\xi}$. Por lo tanto, mientras que $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ representa la densidad de masa en el espacio físico, la función de distribución $f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ corresponde a la densidad de masa tanto en el espacio físico como en el espacio de velocidades.

La función de distribución f se relaciona con variables macroscópicas como densidad ρ y velocidad \boldsymbol{u} a través de momentos, es decir, integrales de f con funciones de peso

dependientes de $\boldsymbol{\xi}$ sobre todo el espacio de velocidades. En particular, la densidad de masa macroscópica puede obtenerse como el momento

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi, \quad (2.1)$$

en el cual se considera la contribución de partículas con todas las velocidades posibles en la posición \mathbf{x} a tiempo t . Por otro lado, puede determinarse la densidad de impulso mediante

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi. \quad (2.2)$$

De forma similar, la densidad de energía total corresponde al momento

$$\rho(\mathbf{x}, t)E(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi. \quad (2.3)$$

2.1.1. Función de distribución de equilibrio

En el análisis original realizado para gases iluidos y monoatómicos, Maxwell menciona que cuando un gas permanece sin perturbaciones por un período de tiempo suficientemente largo, la función de distribución $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ alcanza una distribución de equilibrio $f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ que es isotrópica en el espacio de velocidades en torno a $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{u}$. De esta manera, si se toma un marco de referencia que se desplaza con velocidad \mathbf{u} , entonces dicha distribución de equilibrio puede expresarse como $f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t)$. Por otro lado, si se supone que la distribución de equilibrio puede expresarse de forma separable, es decir

$$f^{eq}(|\mathbf{v}|^2) = f^{eq}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = f_{1D}^{eq}(v_x^2) f_{1D}^{eq}(v_y^2) f_{1D}^{eq}(v_z^2), \quad (2.4)$$

entonces puede demostrarse que dicha distribución queda definida como

$$f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|^2, t) = e^{3a} e^{b|\mathbf{v}|^2}. \quad (2.5)$$

Por otro lado, considerando que las colisiones monoatómicas conservan masa, momento y energía, y usando además la relación de gases ideales:

$$\rho e = \frac{3}{2} RT = \frac{3}{2} p, \quad (2.6)$$

finalmente puede encontrarse una expresión explícita para la distribución de equilibrio

$$f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t) = \rho \left(\frac{3}{4\pi e} \right)^{3/2} e^{-3|\mathbf{v}|^2/(4e)} = \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-|\mathbf{v}|^2/(2RT)} \quad (2.7)$$

2.1.2. La ecuación de Boltzmann

La función de distribución $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ establece propiedades tangibles de un fluido a través de sus diferentes momentos. Asimismo, es posible determinar una ecuación que permita modelar su evolución en el espacio físico, de velocidades, y el tiempo. En el análisis siguiente, se omitirá la dependencia de f con $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ por claridad.

Como f es una función de la posición \mathbf{x} , de la velocidad de las partículas $\boldsymbol{\xi}$, y del tiempo t , la derivada total respecto al tiempo resulta

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) \frac{dt}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta} \right) \frac{dx_\beta}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} \right) \frac{d\xi_\beta}{dt}. \quad (2.8)$$

En este caso $dt/dt = 1$, la velocidad de las partículas se obtiene como $dx_\beta/dt = \xi_\beta$, y la fuerza volumétrica \mathbf{F} queda determinada por la segunda ley de Newton $d\xi_\beta/dt = F_\beta/\rho$. Utilizando la notación tradicional $\Omega(f) = df/dt$ para el diferencial total respecto al tiempo, se obtiene la ecuación de Boltzmann para describir la evolución de f :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\beta \frac{\partial f}{\partial x_\beta} + \frac{F_\beta}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} = \Omega(f). \quad (2.9)$$

La Ec. (2.9) puede verse como una ecuación de advección para f , donde los dos primeros términos del miembro izquierdo corresponden a la advección de f con la velocidad de partículas $\boldsymbol{\xi}$, mientras que el tercero representa el efecto de las fuerzas externas. Por otro lado, el miembro derecho contiene un término de fuente conocido como operador de colisión, que representa la redistribución local de f debido a colisiones entre las propias partículas. Estas colisiones conservan masa, momento y energía, lo que se traduce en restricciones para los momentos de Ω :

$$\int \Omega(f) d^3\xi = 0 \quad (2.10a)$$

$$\int \boldsymbol{\xi} \Omega(f) d^3\xi = \mathbf{0} \quad (2.10b)$$

$$\int |\boldsymbol{\xi}|^2 \Omega(f) d^3\xi = 0 \quad (2.10c)$$

2.1.3. Ecuaciones de conservación macroscópicas

Las ecuaciones de conservación macroscópicas pueden obtenerse como momentos de la ecuación de Boltzmann, es decir, multiplicando la Ec. (2.9) por funciones de $\boldsymbol{\xi}$ e integrando sobre todo el espacio de velocidades. Para ello, es necesario introducir una

notación general para los momentos de f

$$\Pi_0 = \int f d^3\xi = \rho \quad (2.11a)$$

$$\Pi_\alpha = \int \xi_\alpha f d^3\xi = \rho u_\alpha \quad (2.11b)$$

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int \xi_\alpha \xi_\beta f d^3\xi \quad (2.11c)$$

$$\Pi_{\alpha\beta\gamma} = \int \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma f d^3\xi \quad (2.11d)$$

La ecuación más simple de obtener corresponde a la de conservación de masa. Integrando la Ec. (2.9) en el espacio de velocidades, y usando las Ecs. (2.10) y (2.11), se obtiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\beta)}{\partial x_\beta} = 0. \quad (2.12)$$

De manera similar, multiplicando la Ec. (2.9) por ξ_α e integrando en el espacio de velocidades se obtiene la ecuación de conservación de momento:

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = F_\alpha. \quad (2.13)$$

donde $\Pi_{\alpha\beta}$ se define como el tensor de flujo de impulso. Si se descompone la velocidad de las partículas como $\mathbf{x}\mathbf{i} = \mathbf{u} + \mathbf{v}$, entonces la Ec. (2.13) puede reescribirse como

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + F_\alpha. \quad (2.14)$$

con $\sigma_{\alpha\beta}$ representando el tensor de tensiones:

$$\sigma_{\alpha\beta} = - \int v_\alpha v_\beta f d^3\xi \quad (2.15)$$

Finalmente, puede seguirse un procedimiento similar para encontrar una ecuación macroscópica de conservación de energía. Multiplicando la Ec. (2.9) por $\xi_\alpha \xi_\beta$ e integrando en el espacio de velocidades se obtiene:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Pi_{\alpha\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = F_\beta u_\beta. \quad (2.16)$$

Descomponiendo el momento como en la ecuación de conservación de impulso y usando la Ec. (2.14) multiplicada por u_α , la Ec. (2.16) puede reescribirse como:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\beta e)}{\partial x_\beta} = \sigma_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{\partial q_\beta}{\partial x_\beta}, \quad (2.17)$$

donde el flujo de calor \mathbf{q} está definido por el momento

$$q_\beta = \frac{1}{2} \int v_\alpha v_\alpha v_\beta f d^3\xi \quad (2.18)$$

En este punto es interesante destacar que si bien la conservación de masa queda definida exactamente, las ecuaciones de impulso y energía dependen de la forma de f , que todavía no es conocida. En el caso particular en que $f \simeq f^{eq}$, se obtienen las ecuaciones de Euler para impulso y energía:

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + F_\alpha \quad (2.19a)$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_\beta e)}{\partial x_\beta} = -p \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\beta} \quad (2.19b)$$

Este hecho muestra que los procesos macroscópicos de disipación viscosa y difusión de calor se encuentran directamente vinculados a la desviación de f respecto de su valor de equilibrio.

2.2. Discretización del espacio de velocidades

El desarrollo mostrado en la Sección. (2.1) evidencia la posibilidad de representar adecuadamente el comportamiento de un fluido usando una función de distribución $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$. Sin embargo, dicha distribución se encuentra definida en un espacio con 7 dimensiones, es decir, 3 coordenadas espaciales, 3 para el espacio de velocidades, y una para el tiempo, de modo que la resolución de ecuaciones en este espacio multidimensional involucra un esfuerzo computacional considerable. Por otro lado, es necesario considerar que este enfoque no es siempre justificable, dado que en definitiva son los momentos de la ecuación de Boltzmann (integrales en el espacio de velocidades) los que conducen a ecuaciones macroscópicas de conservación de masa, impulso y energía.

Estas características originaron la búsqueda de versiones simplificadas de la ecuación de Boltzmann que no sacrifiquen el comportamiento macroscópico, es decir, de sus momentos. Entre estas alternativas podemos encontrar las expansiones en base al número de Mach [1] o en series de Hermite [2]. Si bien ambas conducen a la misma representación de Navier-Stokes, la representación en series de Hermite presenta una base matemática más sólida, y es la que se utilizará a continuación.

La idea fundamental de la expansión usando polinomios de Hermite consiste en simplificar la función de distribución de equilibrio f^{eq} y discretizar el espacio de velocidades, pero manteniendo las leyes de conservación macroscópicas. En particular, como f^{eq} tiene una forma exponencial conocida, puede ser expresada a través de la función generatriz de dichos polinomios. Por otro lado, los momentos de masa e impulso son

representados como integrales discretas de f^{eq} usando los polinomios de Hermite.

2.2.1. Adimensionalización

Antes de proceder con la discretización de f y f^{eq} en series de Hermite, es conveniente reescribir las ecuaciones gobernantes de forma adimensional, con el objetivo de simplificar los pasos siguientes.

La función de distribución $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ representa la densidad de masa en el espacio físico tridimensional y en el espacio de velocidades, también tridimensional. Por lo tanto, las unidades de f en el SI son:

$$[f] = \text{kg} \times \frac{1}{\text{m}^3} \times \frac{1}{(\text{m/s})^3} = \frac{\text{kg s}^3}{\text{m}^6}. \quad (2.20)$$

Las propiedades de un fluido pueden analizarse en términos de una longitud característica l , velocidad característica V y densidad característica ρ_0 . Si se denota con $*$ a las cantidades adimensionales, entonces podemos escribir los operadores diferenciales adimensionales como:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{l}{V} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \frac{\partial}{\partial x^*} = l \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial \xi^*} = V \frac{\partial}{\partial \xi}. \quad (2.21)$$

Esto lleva a escribir a la forma adimensional de la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{\partial f^*}{\partial t^*} + \xi_\alpha^* \frac{\partial f^*}{\partial x_\alpha^*} + \frac{F_\alpha^*}{\rho^*} \frac{\partial f^*}{\partial \xi_\alpha^*} = \Omega^*(f^*), \quad (2.22)$$

donde $f^* = fV^d/\rho_0$, $\mathbf{F}^* = \mathbf{F}l/(\rho_0V^2)$, $\rho^2 = \rho/\rho_0$ y $\Omega^* = \Omega lV^2/\rho_0$. Siguiendo el mismo procedimiento, la función de equilibrio adimensional resulta:

$$f^{eq*} = \left(\frac{\rho^*}{2\pi\theta^*} \right)^{d/2} e^{-(\boldsymbol{\xi}^* - \mathbf{u}^*)^2/(2\theta^*)} \quad (2.23)$$

En este caso, θ^* corresponde a la temperatura adimensional $\theta^* = RT/V^2$. En las secciones siguientes se trabajará exclusivamente con cantidades adimensionales, omitiendo el superíndice $*$ por claridad.

2.2.2. Expansión en series de Hermite

Las bases de la teoría cinética muestran que el operador de colisión preserva ciertos momentos de la función de distribución, lo que a su vez implica que los momentos de

f^{eq} y f deben coincidir:

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) d^3\xi = \rho(\mathbf{x}, t) \quad (2.24a)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \mathbf{x} \boldsymbol{\xi} d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \mathbf{x} \boldsymbol{\xi} d^3\xi = \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \quad (2.24b)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \frac{|\boldsymbol{\xi}|^2}{2} d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \frac{|\boldsymbol{\xi}|^2}{2} d^3\xi = \rho(\mathbf{x}, t) E(\mathbf{x}, t) \quad (2.24c)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \frac{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}|^2}{2} d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \frac{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}|^2}{2} d^3\xi = \rho(\mathbf{x}, t) e(\mathbf{x}, t) \quad (2.24d)$$

Las cantidades conservadas de la Ec. (2.24) pueden obtenerse como integrales de f o f^{eq} en el espacio de velocidades. Por lo tanto, la expansión en series de Hermite contribuye a transformar esas integrales continuas en sumas discretas evaluadas en puntos específicos del espacio de velocidades.

Los polinomios de Hermite se definen en un espacio d -dimensional como: [2, 3]

$$\mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}) = (-1)^n \frac{1}{\omega(\mathbf{x})} \boldsymbol{\nabla}^{(n)} \omega(\mathbf{x}), \quad (2.25)$$

donde $\omega(\mathbf{x})$ es una función generatriz:

$$\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{-\mathbf{x}^2/2} \quad (2.26)$$

Tanto $\mathbf{H}^{(n)}$ como $\boldsymbol{\nabla}^{(n)}$ son tensores de rango n , de modo que sus d^n componentes pueden expresarse como $H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}$ y $\nabla_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}$, donde $\{\alpha_1 \dots \alpha_n\}$ son índices comprendidos entre 1 y d . Para el caso particular de una dimensión, los polinomios se reducen a

$$H^{(n)}(x) = (-1)^{(n)} \frac{1}{\omega(x)} \frac{d^n}{dx^n} \omega(x), \quad \omega(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \quad (2.27)$$

Los polinomios de Hermite son ortogonales respecto a la función de peso $\omega(\mathbf{x})$ y constituyen una base completa en \Re^n [4], de modo que es posible representar cualquier función $f(\mathbf{x})$ suficientemente suave mediante:

$$f(\mathbf{x}) = \omega(\mathbf{x}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)} \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{a}^{(n)} = \int f(\mathbf{x}) \mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}) d^n x \quad (2.28)$$

Esta propiedad permite aplicar la expansión en series de Hermite a la función de distribución de equilibrio en el espacio de velocidades

$$f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) = \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta) \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \quad (2.29a)$$

$$\mathbf{a}^{(n)eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta) = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d^d \xi \quad (2.29b)$$

En particular, puede verse que la función de distribución de equilibrio tiene la misma forma funcional que la función generatriz $\omega(\mathbf{x})$

$$f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\rho}{\theta^{d/2}} \omega\left(\frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}}{\sqrt{\theta}}\right), \quad (2.30)$$

de modo que el cálculo de los coeficientes $\mathbf{a}^{(n)}$ puede simplificarse mediante:

$$\mathbf{a}^{(n)eq} = \rho \int \omega(\boldsymbol{\eta}) \mathbf{H}^{(n)}(\sqrt{\theta} \boldsymbol{\eta} - \mathbf{u}) d^d \eta, \quad (2.31)$$

donde $\boldsymbol{\eta} = (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})/\sqrt{\theta}$. El cálculo de estas integrales puede realizarse directamente, de modo que los primeros coeficientes resultan:

$$a^{(0),eq} = \rho \quad (2.32a)$$

$$a_{\alpha}^{(1),eq} = \rho u_{\alpha} \quad (2.32b)$$

$$a_{\alpha\beta}^{(2),eq} = \rho [u_{\alpha} u_{\beta} + (\theta - 1) \delta_{\alpha\beta}] \quad (2.32c)$$

$$a_{\alpha\beta\gamma}^{(3),eq} = \rho [u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma} + (\theta - 1)(\delta_{\alpha\beta} u_{\gamma} + \delta_{\beta\gamma} u_{\alpha} + \delta_{\gamma\alpha} u_{\beta})]. \quad (2.32d)$$

A partir de la Ec. (2.32) puede observarse que los coeficientes de la serie de Hermite están directamente relacionados con las principales cantidades conservadas. En esta línea, puede demostrarse que existe una relación similar para los coeficientes de la expansión en series de Hermite de la función de distribución f :

$$a^{(0),eq} = \int f^{eq} d^d \xi = \rho = \int f d^d \xi = a^{(0)} \quad (2.33a)$$

$$a_{\alpha}^{(1),eq} = \int \xi_{\alpha} f^{eq} d^d \xi = \rho u_{\alpha} = \int \xi_{\alpha} f d^d \xi = a_{\alpha}^{(1)} \quad (2.33b)$$

$$\frac{a_{\alpha\alpha}^{(2),eq} + \rho d}{2} = \int \frac{|\boldsymbol{\xi}|^2}{2} f^{eq} d^d \xi = \rho E = \int \frac{|\boldsymbol{\xi}|^2}{2} f d^d \xi = \frac{a_{\alpha\alpha}^{(2)} + \rho d}{2} \quad (2.33c)$$

La representación adecuada de las leyes de conservación macroscópica puede alcanzarse con pocos términos de las series de Hermite, aunque se ha observado que la inclusión de términos de mayor orden contribuyen a mejorar la precisión y estabilidad del método numérico final [5]. De esta forma, la representación en serie de f^{eq} con sólo

$N = 3$ términos puede aproximarse por:

$$f^{eq} \approx \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{N=3} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n),eq} \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \quad (2.34)$$

$$\approx \omega(\boldsymbol{\xi}) \rho [1 + \xi_\alpha u_\alpha + (u_\alpha u_\beta + (\theta - 1) \delta_{\alpha\beta}) (\xi_\alpha \xi_\beta - \delta_{\alpha\beta})] \quad (2.35)$$

2.2.3. Discretización de la función de distribución de equilibrio

La expansión de la función de distribución de equilibrio $f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ en series de Hermite es apropiada, ya que la forma funcional de $f^{eq}(\boldsymbol{\xi})$ es similar a la de la función generatriz $\omega(\mathbf{x}\mathbf{i})$, y los primeros coeficientes de la serie están directamente relacionados con los principales momentos conservados (densidad, velocidad y energía). Por otro lado, el empleo de polinomios de Hermite permite calcular integrales de determinadas funciones utilizando la evaluación de dicha función en un intervalo discreto de puntos (abscisas), mediante la regla conocida como cuadratura de Gauss-Hermite. En particular, esta técnica permite calcular exactamente ciertas integrales de polinomios mediante:

$$\int \omega(\mathbf{x}) P^{(N)}(\mathbf{x}) d^d x = \sum_{i=1}^n w_i P^{(N)}(\mathbf{x}_i) \quad (2.36)$$

donde $P^{(N)}$ es un polinomio de grado N , n es al menos $n = (N + 1)/2$, y w_i son pesos asociados a las abscisas \mathbf{x}_i . En este caso, cada componente del punto multidimensional \mathbf{x}_i , es decir, $x_{i\alpha}$ con $\alpha = 1 \dots d$, es una raíz del polinomio de Hermite unidimensional $H^n(x_{i\alpha}) = 0$. De esta forma, la cuadratura de Gauss-Hermite puede usarse para reescribir los coeficientes de la serie de f^{eq} mediante un conjunto discreto de velocidades $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$:

$$\mathbf{a}^{(n),eq} = \int f^{eq}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d^d \xi = \rho \sum_{i=1}^n w_i Q(\boldsymbol{\xi}_i) \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_i) \quad (2.37)$$

Esta discretización lleva a describir n cantidades $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$, correspondientes a la función de distribución de equilibrio evaluada en la velocidad $\boldsymbol{\xi}_i$. Por lo tanto, podemos reemplazar a la función continua $f^{eq}(\boldsymbol{\xi})$ por un conjunto discreto

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[1 + \xi_{i\alpha} u_\alpha + \frac{1}{2} (u_\alpha u_\beta + (\theta - 1) \delta_{\alpha\beta}) (\xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta}) \right] \quad (2.38)$$

El conjunto f_i^{eq} es continuo en espacio y tiempo, y satisface las mismas leyes de conservación para los primeros tres momentos de $f^{eq}(\boldsymbol{\xi})$. Finalmente, asumiendo un comportamiento isotérmico ($\theta = 1$) y reescribiendo las velocidades de las partículas como

$$\mathbf{e}_i = \frac{\boldsymbol{\xi}_i}{\sqrt{3}}, \quad (2.39)$$

podemos escribir una forma final para la distribución de equilibrio discreta:

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[1 + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta (e_{i\alpha} e_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} \right] \quad (2.40)$$

donde además se definió convenientemente a la constante c_s , llamada velocidad del sonido.

2.2.4. Discretización de la función de distribución

El procedimiento aplicado para aproximar la dependencia de f^{eq} en el espacio de velocidades $\boldsymbol{\xi}$ también puede ser usado con la función de distribución f :

$$\boldsymbol{a}^{(n)}(\boldsymbol{x}, t) = \int f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{e}, t) \boldsymbol{H}^{(n)}(\boldsymbol{e}) d^d e \approx \sum_{i=1}^q f_i(\boldsymbol{x}, t) \boldsymbol{H}^{(n)}(\boldsymbol{e}_i) \quad (2.41)$$

Ahora se tiene un conjunto de q funciones $f_i(\boldsymbol{x}, t)$, relacionadas con las velocidades discretas \boldsymbol{e}_i y continuas en el espacio y tiempo. Usando este conjunto es posible reescribir la ecuación de Boltzmann, pero esta vez discreta en el espacio de velocidades:

$$\partial_t f_i + e_{i\alpha} \partial_\alpha f_i = \Omega(f_i), \quad i = 1 \dots q, \quad (2.42)$$

donde los momentos macroscópicos se pueden calcular usando sumas discretas:

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq} \quad (2.43a)$$

$$\rho \boldsymbol{u} = \sum_i f_i \boldsymbol{e}_i = \sum_i f_i^{eq} \boldsymbol{e}_i \quad (2.43b)$$

2.2.5. Conjunto discreto de velocidades

La descomposición de las funciones de distribución usando series de Hermite mostró que el espacio de velocidades puede ser discretizado, pero hasta este punto no se estableció de qué manera. Los conjuntos de velocidades $\{\boldsymbol{e}_i\}$ admisibles deben cumplir dos propiedades fundamentales; por un lado, presentar una resolución suficiente que permita capturar los fenómenos físicos deseados, y por otro contener la menor cantidad de componentes posibles para reducir el costo computacional involucrado.

Tradicionalmente, los conjuntos de velocidades suelen identificarse con la notación $DdQq$ introducida por [6], donde d corresponde al número de dimensiones espaciales y q a la cantidad de velocidades discretas. Estos conjuntos quedan determinados por las velocidades $\{\boldsymbol{e}_i\}$, los pesos $\{w_i\}$ y la velocidad del sonido c_s^2 . Si bien existen numerosos mecanismos para construir conjuntos de velocidades con las propiedades deseadas, la

alternativa más sencilla y directa consiste en evaluar la isotropía rotacional de los tensores de grilla [7, 8], es decir, de aquellos momentos con factores de peso $\{w_i\}$. Esta simetría implica que los tensores de grilla de hasta orden 5 satisfagan

$$\sum_i w_i = 1 \quad (2.44a)$$

$$\sum_i w_i e_{i\alpha} = 0 \quad (2.44b)$$

$$\sum_i w_i e_{i\alpha} e_{i\beta} = c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (2.44c)$$

$$\sum_i w_i e_{i\alpha} e_{i\beta} e_{i\gamma} = 0 \quad (2.44d)$$

$$\sum_i w_i e_{i\alpha} e_{i\beta} e_{i\gamma} e_{i\mu} = c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\mu} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma}) \quad (2.44e)$$

$$\sum_i w_i e_{i\alpha} e_{i\beta} e_{i\gamma} e_{i\mu} e_{i\nu} = 0. \quad (2.44f)$$

Una vez establecidas este tipo de restricciones, el procedimiento habitual consiste en definir el conjunto de velocidades discretas, y posteriormente determinar $\{w_i\}$ y c_s^2 . La dimensión de $\{e_i\}$ dependerá de la cantidad de restricciones de la Ec. (2.44) que quieran satisfacerse simultáneamente: para resolver adecuadamente ecuaciones macroscópicas como Navier-Stokes se necesita cumplir con los primeros 6 tensores de grilla, mientras que para ecuaciones de advección-difusión lineales, alcanza con satisfacer los primeros 4.

La Ec. (2.42) suele discretizarse grillas espaciales regulares de espaciado Δx , y en intervalos de tiempo regulares Δt . Por lo tanto, es conveniente elegir el conjunto de velocidades $\{e_i\}$ de modo que conecten exclusivamente nodos vecinos. De esta forma surgen los modelos de grilla tradicionales como D1Q3, D2Q9 y D3Q15, los cuales se ilustran en la **figura de velocidades de grilla**. En la Tabla 2.1 se resumen las principales propiedades de cada modelo de grilla.

2.3. Discretización del espacio y tiempo

Hasta este punto, sólo se aplicó la discretización de la ecuación de Boltzmann en el espacio de velocidades. El paso final hacia la ELB debe completarse con la discretización del espacio y tiempo.

La ecuación de Boltzman discreta (Ec. (2.42)) es una ecuación diferencial en derivadas parciales (EDP) de primer orden y parabólica. Una de las técnicas más usadas en la resolución de este tipo de ecuaciones es aquella que se conoce como método de las características, que consiste en parametrizar las variables independientes de la

Modelo	$\{\mathbf{e}_i\}$	$\{w_i\}$	c_s^2
D1Q3	(0)	2/3	$1/\sqrt{3}$
	(± 1)	1/6	
D2Q9	(0,0)	4/9	$1/\sqrt{3}$
	($\pm 1, 0$), ($0, \pm 1$)	1/9	
	($\pm 1, \pm 1$)	1/36	
D3Q15	(0,0,0)	2/9	$1/\sqrt{3}$
	($\pm 1, 0, 0$), ($0, \pm 1, 0$), ($0, 0, \pm 1$)	1/9	
	($\pm 1, \pm 1, \pm 1$)	1/72	

Tabla 2.1: Ejemplos de conjuntos de velocidades

EDP para transformarla en una ecuación diferencial ordinaria (EDO). En este caso, es posible expresar la solución de 2.42 como $f_i = f_i(\mathbf{x}(\zeta), t(\zeta))$, donde ζ parametriza una trayectoria en el espacio. De esta manera, la (2.42) puede reescribirse usando un diferencial total:

$$\frac{df}{d\zeta} = \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \zeta} + \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} \frac{\partial x_\alpha}{\partial \zeta} = \Omega_i(\mathbf{x}(\zeta), t(\zeta)) \quad (2.45)$$

Por inspección, debe cumplirse

$$\frac{\partial t}{\partial \zeta} = 1, \quad \frac{\partial x_\alpha}{\partial \zeta} = e_{i\alpha}. \quad (2.46)$$

de modo que las soluciones f_i siguen una trayectoria dada por $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{e}_i t$, donde \mathbf{x}_0 es una constante arbitraria. Si se considera la trayectoria que pasa a través del punto (\mathbf{x}_0, t_0) , con $t(\zeta = 0) = t_0$ y $\mathbf{x}(\zeta = 0) = \mathbf{x}_0$, entonces la integración de la Ec. (2.45) resulta:

$$f_i(\mathbf{x}_0 + \mathbf{e}_i \Delta t, t_0 + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}_0, t_0) = \int_0^{\Delta t} \Omega_i(\mathbf{x}_0 + \mathbf{e}_i \zeta, t_0 + \zeta) d\zeta. \quad (2.47)$$

Como el punto (\mathbf{x}_0, t_0) es arbitrario, la integración puede generalizarse como:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \int_0^{\Delta t} \Omega_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \zeta, t + \zeta) d\zeta. \quad (2.48)$$

A partir de la integración de la Ec. (2.48) resulta explícito el acople entre la discretización espacial y temporal, y refuerza la practicidad de emplear conjuntos de velocidades que, en un intervalo de tiempo Δt , se vinculen con las posiciones vecinas en la grilla espacial.

Sólo resta integral el término derecho de la Ec. (2.48). Empleando em método de

Euler explícito, puede obtenerse finalmente la ecuación de lattice Boltzmann

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Delta t \Omega_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.49)$$

La discretización de Euler empleada conduce a una aproximación de primer orden en la discretización de espacio y tiempo. Sin embargo, puede demostrarse que si se realiza dicha integración mediante el método trapezoidal [9], y con una redefinición adecuada de la función de distribución discreta, es posible obtener una ecuación igual a 2.49. Por lo tanto, es posible afirmar que la Ec. (2.49) constituye una aproximación de segundo orden también en espacio y tiempo.

2.4. Operadores de colisión

LBGK y MRT. Matrices de transformación?

2.5. La expansión de Chapman-Enskog

Podemos ponerla acá, aunque hay que ver como queda con las cuentas más adelante. Hay que ver, pero podrían ir acá las cuentas de la ecuación básica.

2.6. Overview de LBM

Algoritmo, colision, streaming, etc.

Capítulo 3

Simulación de flujo multifásico

3.1. Lattice Boltzmann para flujo multifásico

En sintonía con el crecimiento de la mecánica de fluidos computacional, fueron desarrollándose numerosos métodos numéricos macroscópicos destinados a resolver las ecuaciones de Navier-Stokes en flujos multifásicos [10]. Entre los métodos más populares, pueden destacarse el de **front-tracking**, el método Volume of Fluid (VOF) y el método level set. A pesar de la amplia difusión adquirida, y de la demostrada capacidad para resolver con precisión diversos escenarios con flujos multifásicos, estas técnicas tradicionales continúan presentando limitaciones que dificultan el modelado de problemas complejos con transferencia de calor, como ebullición y condensación. En particular, el método de **front-tracking** generalmente no permite simular adecuadamente procesos de coalescencia y ruptura de una interfase [10, 11]. La aplicación de VOF y level set suele requerir pasos de reconstrucción o reinicialización de la interfase, que pueden no ser físicos y complejos de implementar [11]. Además, suelen originarse inestabilidades numéricas en el uso de VOF o level set para simular flujos dominados por tensión superficial en geometrías complejas [10].

En comparación con otros métodos computacionales, el MLB presenta ventajas adicionales para la simulación de flujos complejos. Por un lado, la naturaleza mesoscópica con base en la teoría cinética molecular permite generar modelos con sólidos fundamentos termodinámicos. Por otro lado, es posible incorporar directamente el uso de ecuaciones de estado en la resolución de Navier-Stokes en escala macroscópica, lo que a su vez elimina la necesidad de resolver una ecuación de Poisson para la presión. Finalmente, la mayoría de los modelos son sencillos de programar, y la naturaleza local de las operaciones involucradas facilita la explotación de arquitecturas con paralelismo masivo, como las unidades de procesamiento gráfico (GPU).

Las mencionadas características han motivado el desarrollo de esquemas para flujo multifásico desde los orígenes del método. A pesar de que se ha conformado un enorme

universo de modelos diferentes, la gran mayoría de estas alternativas pueden agruparse dentro de cuatro categorías principales: color-gradient [11, 12], pseudopotential [13, 14, 15], free-energy [16, 17] y phase-field [18, 19].

Color-gradient

El método color-gradient fue introducido por Gunstensen et al. [12], como una versión mejorada del modelo LGA multifásico de Rothman y Keller [20]. En este modelo las fases se denotan con diferentes colores, y la interacción entre partículas, responsable de la separación de fases, es modelada con gradientes locales de color asociado a la diferencia de densidad entre ambas fases. Tomando como ejemplo un sistema de dos fases, el modelo color-gradient original usa dos tipos de funciones de distribución, f_{ri} y f_{bi} , para representar a los fluidos rojo y azul respectivamente. La distribución total de la mezcla $f_i = f_{ri} + f_{bi}$ evoluciona como:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i^c + \Omega_i^p, \quad (3.1)$$

donde Ω_i^c denota los efectos de colisión y Ω_i^p se encuentra relacionado con la tensión interfacial. En este caso, las densidades y velocidades para cada fase se definen como

$$\begin{aligned} \rho_k &= \sum_i f_{ki}, & \rho_k \mathbf{u}_k &= \sum_i \mathbf{e}_i f_{ki}, & k &= r, b, \\ \rho &= \rho_r + \rho_b, & \rho \mathbf{u} &= \rho_r \mathbf{u}_r + \rho_b \mathbf{u}_b. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Si bien es posible emplear un operador LBGK para Ω_i^c , el término Ω_i^p se calcula empleando un parámetro de orden que tiene en cuenta la diferencia de densidad entre fases. Después de la colisión, las funciones de distribución parciales son sometidas a un paso de ajuste de color antes del streaming. Estos pasos adicionales del algoritmo contribuyen a producir inestabilidades numéricas, a la vez que reducen de forma drástica la eficiencia computacional por paso de tiempo [7].

Free-energy

El método free-energy fue propuesto originalmente por Swift et al. [16], y presenta un punto de partida asociado a consideraciones termodinámicas básicas. La idea detrás de estos métodos consiste en derivar una función de distribución de equilibrio adecuada, de forma que el momento de segundo orden correspondiente incluya un tensor de presión termodinámico no ideal. En particular, este tensor se deriva a partir de la energía libre de un fluido asociado a una ecuación de estado de Van der Waals, y puede escribirse

como:

$$P'_{\alpha\beta} = p\delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} \quad (3.3)$$

donde κ es una constante asociada al valor de tensión superficial en la interfase. Para lograr la recuperación de este tensor, Swift et al. sugirieron el uso de una ELB con operador de colisión LBGK

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i - f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \nabla \mathbf{u})], \quad (3.4)$$

mientras que la distribución de equilibrio satisface las siguientes restricciones:

$$\sum_i f_i^{eq} = \rho, \quad \sum_i \mathbf{e}_i f_i = \rho \mathbf{u}, \quad \sum_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i f_i = \mathbf{P}' + \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \quad (3.5)$$

De forma similar a lo que ocurre con el modelo estándar para flujos de una única fase, f^{eq} puede escribirse como un polinomio de \mathbf{u} :

$$f_i^{eq} = A + B(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + C u^2 + D(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 + G : \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i, \quad i \neq 0, \quad (3.6a)$$

$$f_i^{eq} = A_0 + C_0 u^2, \quad i = 0. \quad (3.6b)$$

Los coeficientes de f_i^{eq} para una grilla bidimensional pueden obtenerse empleando las restricciones de la Ec. (3.5):

$$\begin{aligned} A_0 &= \rho - 6A, & C_0 &= -\rho, \\ A &= \frac{1}{3}(p_0 - \kappa \rho \nabla^2 \rho), & B &= \frac{\rho}{3}, & C &= -\frac{\rho}{6}, & D &= \frac{2\rho}{3}, \\ G_{xx} = -G_{yy} &= \frac{\kappa}{3} \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right)^2 \right], & G_{xy} &= \frac{2\kappa}{3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial y}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

De esta forma, las ecuaciones macroscópicas recuperadas usando el método de Swift resultan:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p_0 + \nu \nabla^2 (\rho \mathbf{u}) + \nabla [\lambda \nabla \cdot (\rho \mathbf{u})] \quad (3.9)$$

$$- \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial p_0}{\partial \rho} \delta_t \nabla \cdot [\mathbf{u} \nabla \rho + (\nabla \rho) \mathbf{u}], \quad (3.10)$$

donde

$$\nu = \frac{\delta_t}{4} \left(\tau - \frac{1}{2} \right), \quad \lambda = \delta_t \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{1}{2} - \frac{\partial p_0}{\partial \rho} \right) \quad (3.11)$$

Falta decir qué es p_0 .

Las primeras versiones asociadas a esta familia sufrieron la falta de invariancia galileana debido a la recuperación de términos que no están relacionados con Navier-Stokes, originados por la misma incorporación del tensor de presión en la distribución de equilibrio [21]. Para recuperar esta invarianza es necesario, por lo tanto, incorporar términos de corrección en la función de distribución de equilibrio. Este tipo de adaptaciones son similares a aquellas adoptadas por las versiones posteriores de los métodos dentro de la familia color-gradient, y usualmente constituyen fuentes adicionales de inestabilidad numérica al incorporar términos como $\mathbf{u}\nabla\rho$ y $\mathbf{u} \cdot \nabla\rho$.

Phase-field

Esta categoría representa a los modelos basados en la teoría de phase-field, es decir, aquellos en los que la dinámica de la interfase se encuentra descrita por un parámetro de orden regido por una ecuación de Cahn-Hilliard o similar [22]. Esta aproximación a la simulación de flujos multifásicos con LB tiene su contraparte equivalente dentro de las técnicas tradicionales de CFD para modelos de interfase difusa, como el de Ding et. al [23].

La versión original de He et al. [18] hace uso de dos funciones de distribución, g y f , para recuperar las ecuaciones de Navier-Stokes y una del tipo Cahn-Hilliard para la evolución de la interfase respectivamente. Usando operadores de colisión LBGK, las ecuaciones corresponden a:

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_1} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + S_i(\mathbf{x}, t)\delta_t, \quad (3.12)$$

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_2} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + S'_i(\mathbf{x}, t)\delta_t, \quad (3.13)$$

donde la viscosidad cinemática se recupera mediante $\nu = (c_s^2)(\tau_1 - 0.5)\delta_t$, τ_2 se relaciona con la movilidad de la ecuación de Cahn-Hilliard, y S_i , S'_i son términos de fuente. Las funciones de distribución de equilibrio se definen mediante:

$$g_i^{eq} = w_i \left[p + \rho c_s^2 \left(\frac{e_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha e_{i\beta} u_\beta}{2c_s^4} - \frac{u_\alpha u_\alpha}{2c_s^2} \right) \right] \quad (3.14)$$

$$f_i^{eq} = w_i \phi \left[1 + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha e_{i\beta} u_\beta}{2c_s^4} - \frac{u_\alpha u_\alpha}{2c_s^2} \right] \quad (3.15)$$

donde p corresponde a la presión hidrodinámica. ϕ es el parámetro de orden que se utiliza, por ejemplo, para determinar la distribución de densidad:

$$\rho(\phi) = \rho_g + \frac{\phi - \phi_g}{\phi_l - \phi_g}(\rho_l - \rho_g) \quad (3.16)$$

En este caso, los subíndices l y g corresponden a las fases líquida y gaseosa respectivamente. Las variables macroscópicas del modelo de He et al. se calculan como:

$$\begin{aligned}\phi &= \sum_i f_i \\ p &= \sum_i g_i - \frac{\delta_t}{2} u_\beta \frac{\partial(p - \rho c_s^2)}{\partial x_\beta} \\ \rho u_\alpha c_s^2 &= \sum_i e_{i\alpha} g_i + \frac{\delta_t}{2} c_s^2 F_\alpha\end{aligned}\tag{3.17}$$

donde F_α representa las fuerzas externas, incluyendo las asociadas a la tensión interfacial. La expansión de Chapman-Enskog de las Ecs. (3.12)-(3.17) muestra que las ecuaciones macroscópicas recuperadas resultan:

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= -\nabla p + \nu \nabla \cdot [\rho(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{F} \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2\tau_2}\right) \nabla^2 (p - c_s^2 \phi)\end{aligned}\tag{3.18}$$

Pseudopotential

El método pseudopotencial, que podría considerarse como la técnica más sencilla para simular flujos multifásicos, fue propuesta por Shan y Chen [13, 14]. En este método, las interacciones entre partículas fluidas son imitadas mediante un potencial interpartícula, de modo que la separación de fases ocurre automáticamente, sin necesidad de recurrir a técnicas para capturar o reconstruir interfases. Este potencial es el responsable de inducir un tensor de presión no ideal, diferente al del método free-energy. La simplicidad conceptual y la elevada eficiencia computacional convirtieron a este método en uno de los más populares, habiendo sido utilizado con éxito en la resolución de diversos problemas.

La ELB propuesta por Shan y Chen conserva la estructura estándar de los modelos de única fase con operador LBGK:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}^{eq})],\tag{3.19}$$

donde \mathbf{u}^{eq} se conoce como velocidad de equilibrio. En este modelo, los principales momentos quedan definidos por:

$$\sum_i f_i = \rho, \quad \sum_i \mathbf{e}_i f_i = \rho \mathbf{u}^*.\tag{3.20}$$

En este caso, la velocidad \mathbf{u}^* es utilizada para calcular \mathbf{u}^{eq} y la velocidad real del

fluido

$$\mathbf{u}^{eq} = \mathbf{u}^* + \frac{\mathbf{F}\tau}{\rho}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \frac{\mathbf{F}\delta_t}{2\rho} \quad (3.21)$$

El modelo original de Shan y Chen introduce el uso de una fuerza de interacción entre partículas vecinas definida como:

$$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}, t) = -G\psi(\mathbf{x}, t) \sum_i w_i \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) \mathbf{e}_i \quad (3.22)$$

donde G es un parámetro que controla la intensidad de la fuerza de interacción y ψ es un potencial dado por:

$$\psi(\rho) = \rho_0 \left[1 - e^{-\frac{\rho}{\rho_0}} \right], \quad (3.23)$$

donde ρ_0 es una constante arbitraria.

A pesar de la evolución y mejora de los diversos modelos multifásicos desde sus orígenes, siguen existiendo diferencias significativas en las capacidades de simulación de problemas multifásicos dinámicos, sobre todo cuando las relaciones de densidad entre fases (ρ_l/ρ_g) son elevadas. Como se menciona en el trabajo de Li et al. [24], estas limitaciones pueden deberse a diferentes causas. Por un lado, existen diferencias en las cantidades físicas que deben ser evaluadas a través de la interfase líquido-vapor; por ejemplo densidad en el modelo free-energy y potencial en pseudopotential. Por otro lado, cómo se mencionó previamente, las familias color-gradient y free-energy necesitan correcciones adicionales para recuperar adecuadamente el comportamiento de Navier-Stokes, y como estos términos dependen explícitamente del gradiente de densidad, suelen convertirse en fuentes de inestabilidad numérica [25, 26, 27]. Este hecho origina que los modelos color-gradient y free-energy encuentren severas limitaciones al momento de simular flujos con elevada relación de densidades y alto número de Reynolds, a pesar de los éxitos observados en casos estáticos o cuasi-estáticos.

A diferencia de color-gradient y free-energy, los modelos multifásicos agrupados dentro de las familias phase-field y pseudopotential han sido aplicados exitosamente en la simulación de problemas con elevada relación de densidades y número de Reynolds moderados, como impacto y colisión de droplets [28, 29] e incluso aplicaciones sencillas de transferencia de calor con cambio de fase [30, 31, 32]. En este último aspecto es dónde la familia de modelos pseudopotential presenta su mayor virtud: como se describe en las secciones siguientes, el potencial de interacción puede modificarse para incorporar ecuaciones de estado arbitrarias, de modo que los procesos asociados a la transferencia de masa entre fases quedan determinados exclusivamente por dicha ecuación. Además, a diferencia de los modelos phase-field, si se elige una ELB adecuada para recuperar macroscópicamente una ecuación de energía, entonces no es necesario reconstruir la interfase para estimar la fuente de masa en la ecuación de impulso correspondiente [30, 33]. De esta forma, los modelos LB para flujos multifásicos basados en la

familia pseudopotential permiten conservar la simplicidad y eficiencia computacional representativa de este método, aún en la simulación de flujos complejos.

3.2. El modelo pseudopotential

Originalmente, Shan y Chen introdujeron una interacción no local entre partículas fluidas, definiendo a la fuerza experimentada por las partículas en la posición \mathbf{x} respecto aquellas en \mathbf{x}' como:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\tilde{G}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)\psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}')(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (3.24)$$

donde \tilde{G} es una función de Green y ψ una masa efectiva que depende de la densidad local. La estructura de la fuerza dada por la Ec. (3.24) fue diseñada adecuadamente por Shan y Chen, ya que si bien este acoplamiento entre masas efectivas no conserva el impulso local durante el proceso de colisión, puede demostrarse que conserva el impulso total y, por lo tanto, no introduce impulso neto al sistema [14]. La fuerza de interacción total actuando sobre las partículas en \mathbf{x} resulta:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\psi(\mathbf{x}) \sum \tilde{G}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)\psi(\mathbf{x}')(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.25)$$

En un espacio discreto puede considerarse que cada nodo interactúa con N vecinos, y si se asume que esta interacción es isotrópica es decir $\tilde{G} = \tilde{G}(|\mathbf{e}_\alpha|)$, entonces puede expresarse a la fuerza de interacción discreta como:

$$\mathbf{F}_i = -G\psi(\mathbf{x})c_s^2 \sum_{\alpha=1}^N \omega(|\mathbf{e}_\alpha|^2)\psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha\delta_t)\mathbf{e}_\alpha, \quad (3.26)$$

donde G es la magnitud de la interacción y $\{\omega(|\mathbf{e}_\alpha|^2)\}$ son coeficientes asociados a la discretización isotrópica de \mathbf{F} . Estos pesos son diferentes de aquellos empleados en la función de distribución de equilibrio estándar (Ec. (2.40)).

La expansión en serie de Taylor de la Ec. (3.26) muestra que los términos dominantes están dados por [34]:

$$\mathbf{F}_i = -G \left[c_s^2 \psi \nabla \psi + \frac{c_s^4}{2} \psi \nabla (\nabla^2 \psi) + \dots \right] \quad (3.27)$$

Por lo tanto, a pesar de su aparente simplicidad, esta fuerza de interacción es capaz de incorporar elementos de fluidos no ideales, como una ecuación de estado relacionada con el primer término del miembro derecho de la Ec. (3.27), y el efecto de tensión superficial relacionado con el segundo término.

- Ecuación recuperada Origen del nombre pseudopotential

3.2.1. Ecuaciones de estado y la regla de construcción de Maxwell

En la sección anterior se mostró que los modelos pseudopotential permiten recuperar, a nivel macroscópico, una ecuación de conservación de impulso lineal en donde se identifica un tensor de presión que depende de la masa reducida o potencial de interacción. De esta manera, la elección de un potencial de interacción determina directamente la dependencia de la presión de equilibrio con propiedades macroscópicas del fluido, como densidad y temperatura, constituyendo una ecuación de estado para el fluido simulado.

La expresión para este potencial no es único, y es evidente que su elección está ligada al comportamiento de cada fase. Por lo tanto, antes de evaluar el efecto de este potencial en el resultado de la aplicación de un modelo pseudopotencial, es necesario remarcar cuáles son los vínculos entre flujos multifásicos y ecuaciones de estado termodinámicas.

El análisis de un sistema multifásico, como agua líquida y vapor de agua, busca responder aspectos termodinámicos fundamentales sobre la condición de equilibrio líquido-vapor. En particular, es necesario establecer una relación entre las densidades de la fase líquida (ρ_l) y de la fase gaseosa o de vapor (ρ_g), así como la dependencia de la presión con estas densidades. Este requerimiento físico de mantener una coexistencia de fases impone una restricción adicional en la ecuación de estado, es decir, en la ley que describe la compleja interdependencia entre la presión p , los volúmenes molares v (o densidades, ya que $v \propto 1/\rho$), y la temperatura T .

Las ecuaciones de estado más conocidas tienen su origen en la teoría cinética de gases [35]. El modelo de gases reales más utilizado es el de van der Waals (vdW), el cual resulta a su vez el más simple pero que permite incorporar dos ingredientes cruciales: interacciones moleculares y moléculas de tamaño distinto de cero. La ecuación de estado de van der Waals es:

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT, \quad (3.28)$$

donde p es la presión termodinámica, T la temperatura, R la constante universal de gases, y v el volumen molar, es decir, el volumen ocupado por 1 mol de moléculas del gas. En esta ecuación, la constante a parametriza la intensidad de interacción entre moléculas, mientras que la constante b incorpora el efecto del tamaño finito de las mismas. Si a y b son nulos, la ecuación de vdW se reduce a la de gases ideales, es decir, $pv = RT$. Además, este comportamiento también se recupera en el límite de densidades muy bajas ($v \gg b$ y $v \gg \sqrt{a/\rho}$). Por otro lado, cuando la densidad es alta y v se aproxima a b , el valor de presión p diverge.

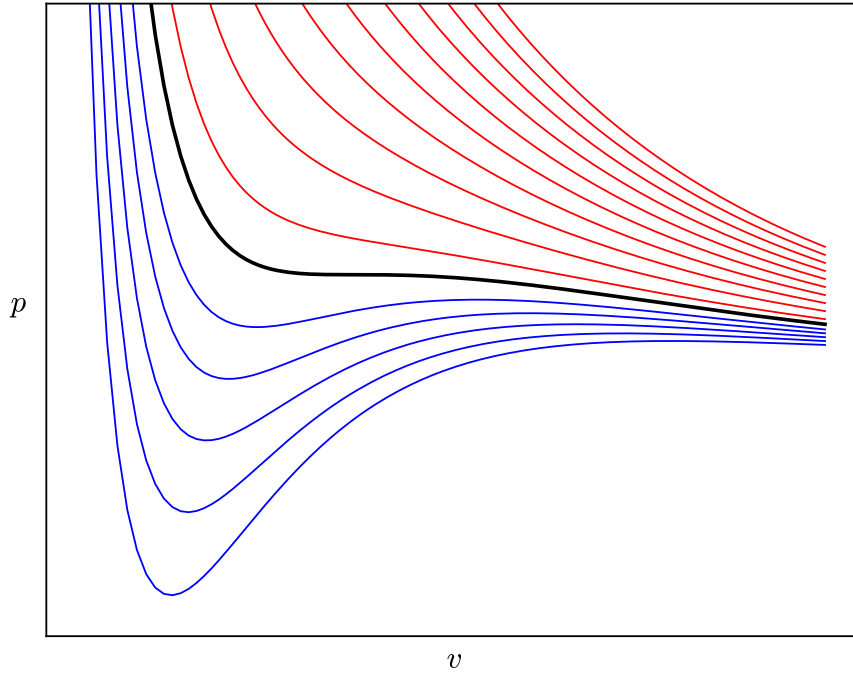


Figura 3.1: Diagrama $p - v$ para la ecuación de van der Waals. Se destacan las isothermas supercríticas (rojo), crítica (negro) y subcríticas (azul).

La Fig. 3.1 ejemplifica el comportamiento de la ecuación de van der Waals, donde cada línea corresponde a una isoterma. A medida que la temperatura descende, las isothermas pasan de un comportamiento similar a un gas ideal, en la esquina superior derecha de la figura, a exhibir un comportamiento en forma de S con un mínimo y un máximo locales, en la esquina inferior izquierda. De acuerdo a esas isothermas, existen tres valores de densidad asociadas a una misma presión. Sin embargo, en esa zona de S existe una región donde $(\partial v / \partial p)_T$ es positiva, y por lo tanto se tiene compresibilidad negativa, lo que implica que esa región es inestable frente a perturbaciones de presión [35]. La temperatura a partir de la cual se produce este cambio de comportamiento se conoce como temperatura crítica, y es la que se ilustra con una línea más gruesa en la Fig. 3.1. Esta isoterma presenta un punto de inflexión, conocido como punto crítico, sobre el que se definen propiedades características de la ecuación de estado. En particular, analizando las derivadas $(\partial p / \partial v)_T = 0$ y $(\partial^2 p / \partial v^2)_T = 0$, puede encontrarse cuál es ese punto crítico, es decir, los valores de presión crítica, volumen molar crítico y temperatura crítica que lo caracterizan:

$$\begin{aligned} p_c &= \frac{a}{27b^2} \\ v_c &= 3b \\ T_c &= \frac{8a}{27Rb} \end{aligned} \tag{3.29}$$

En la Fig. 3.1 se evidencia que para temperaturas por debajo del valor crítico, dos

volúmenes molares diferentes pueden adoptar el mismo valor de presión en equilibrio p_0 (en realidad son 3, pero uno es inestable). Por lo tanto, puede establecerse un estado de coexistencia entre dos fases, líquido y vapor, que compartan igual energía libre de Gibbs (o equivalentemente potencial químico). Esta restricción implica:

$$\int_{v_l}^{v_g} [p_0 - p(v', T)] dv' = 0, \quad (3.30)$$

donde $p_0 = p(v_l, T) = p(v_g, T)$. La Ec. (3.30) se conoce como regla de construcción de Maxwell, y determina los volúmenes de coexistencia de ambas fases para una determinada temperatura. Si se realiza un cambio de variables adecuado, la Ec. (3.30) puede reescribirse como:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} [p_0 - p(\rho', T)] \frac{1}{\rho'} d\rho' = 0, \quad (3.31)$$

donde $p_0 = p(\rho_l, T) = p(\rho_g, T)$. Gráficamente, resolver la regla de Maxwell implica encontrar los volúmenes para los que las áreas sombreadas de la Fig. 3.2 sean iguales.

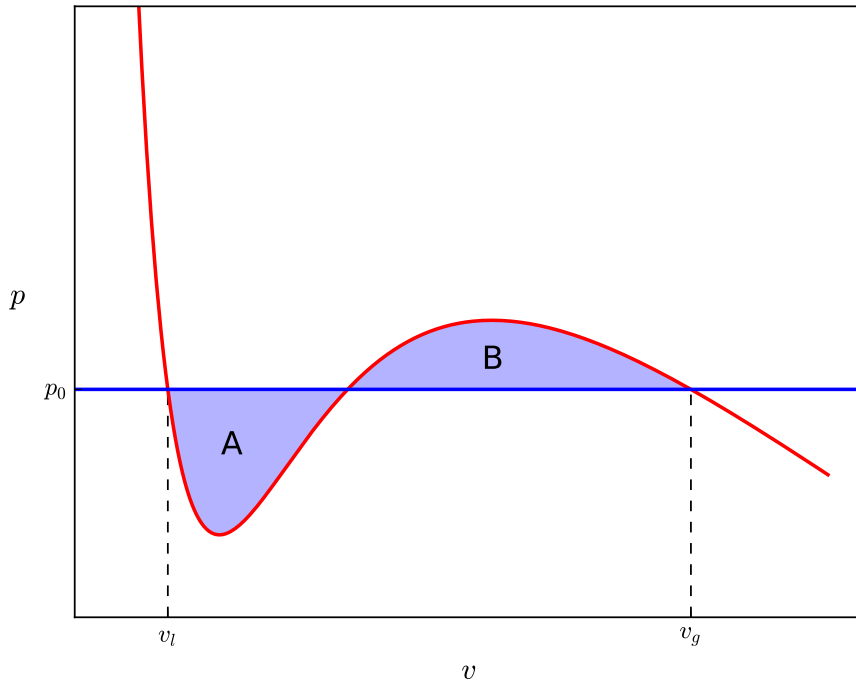


Figura 3.2: Ejemplo de aplicación de la regla de construcción de Maxwell. Dada una isoterma del diagrama $p-v$, los volúmenes de coexistencia son aquellos para los que las áreas A y B son iguales.

La regla de construcción de Maxwell aplica a cualquier ecuación de estado, e impone una restricción termodinámica a las simulaciones realizadas con modelos pseudopotencial: si se desea recuperar el comportamiento de un fluido regido por una ecuación de estado, entonces la “separación automática de fases” propia de esta familia debe ser capaz de reproducir las densidades de equilibrio dadas por la Ec. (3.30).

Otras ecuaciones de estado

La ecuación de estado de van der Waals ha alcanzado una notable popularidad, no sólo por ser la primera en modelar el comportamiento de gases reales, sino porque a pesar de su simplicidad, permite representar fenómenos complejos asociados a la coexistencia y cambio de fase. Sin embargo, esta ecuación no es la única, ya que se ha creado un amplio abanico de posibilidades en busca de una mejor representación de diversos tipos de fluidos. A continuación se detallan dos de las más conocidas, ampliamente utilizadas en la literatura de lattice Boltzmann.

Carnahan-Starling:

$$\begin{aligned}
 p &= \rho RT \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2, \\
 p_c &= \frac{0,07066 \, Ra}{b^2}, \\
 T_c &= \frac{0,37733 \, a}{Rb}, \\
 \rho_c &= \frac{0,5218}{b}
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Peng-Robinson:

$$\begin{aligned}
 p &= \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\varphi(\omega, T)\rho^2}{1 + 2b\rho - (b\rho)^2}, \\
 \varphi(\omega, T) &= \left[1 + (0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c}) \right], \\
 p_c &\approx \frac{0,01324 \, a}{b^2}, \\
 T_c &\approx \frac{0,17015 \, a}{Rb}, \\
 \rho_c &\approx \frac{0,253077}{b}
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

Poner acá otras propiedades derivadas, como calor latente?

Curvas de coexistencia

Como se mencionó previamente, la regla de construcción de Maxwell permite determinar las densidades de coexistencia en equilibrio para cualquier ecuación de estado. La determinación de los límites de esta integral no siempre es sencillo, dado que requiere la aplicación de un ciclo iterativo, con resultados que dependen de las constantes características de cada ecuación de estado. Este cálculo, así como la comparación objetiva entre diferentes ecuaciones de estado, puede simplificarse si se usa el concepto

de unidades reducidas [36]:

$$\rho_r = \rho/\rho_c, \quad T_r = T/T_c, \quad p_r = p/p_c, \quad (3.34)$$

donde los subíndices r y c denotan propiedades reducidas y críticas, respectivamente. De acuerdo a la ley de estados correspondientes, las propiedades reducidas deben ser las mismas independientemente del tipo de unidades utilizadas. Por lo tanto, la relación entre propiedades de coexistencia quedan unívocamente determinadas para cada ecuación de estado, si se emplean unidades reducidas. De esta forma pueden construirse las llamadas curvas universales de coexistencia, como las mostradas en la Fig. 3.3.

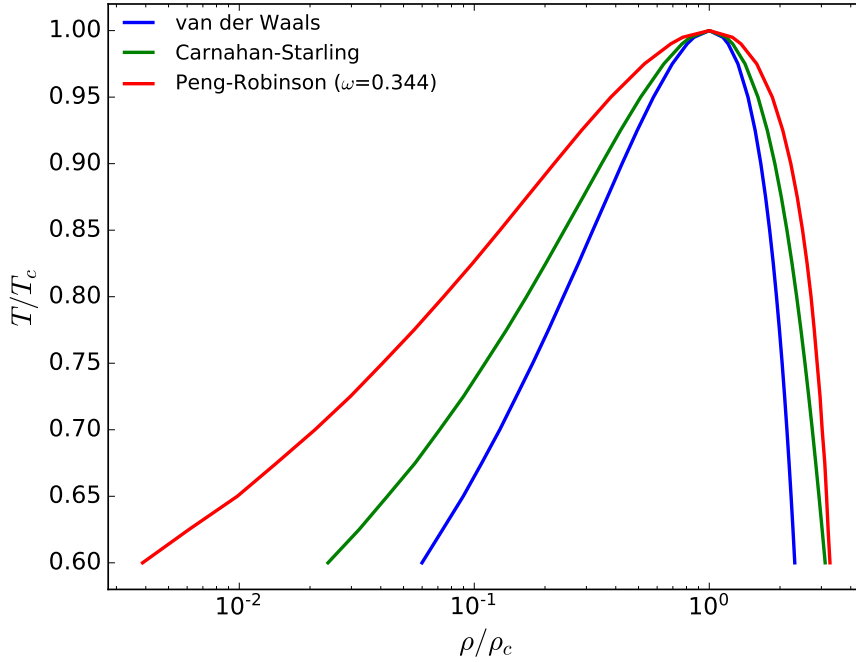


Figura 3.3: Densidades de coexistencia, en unidades reducidas, para diferentes ecuaciones de estado.

3.2.2. Incorporación de ecuaciones de estado en el potencial de interacción

La definición de masa efectiva dada por Shan y Chen se aproxima a un valor asintótico cuando la densidad es alta, lo que contribuye a evitar el colapso de la fase de mayor densidad y, por lo tanto, contribuir a mejorar la estabilidad de las simulaciones. Sin embargo, el uso de esta expresión fija la ecuación de estado final, lo que limita la aplicabilidad a diferentes fluidos. En 2006, Yuan y Schaefer [37] demostraron que es posible alcanzar relaciones de densidad elevadas en casos estáticos si se emplea la masa

efectiva introducida por He y Doolen [38]:

$$\psi(\rho) = \sqrt{\frac{2(p_{EOS} - \rho c_s^2)}{Gc^2}}, \quad (3.35)$$

donde p_{EOS} representa una ecuación de estado no ideal, como Van der Waals, Carnahan-Starling o Peng-Robinson.

3.2.3. Adicionales?

Podrían ponerse acá ciertos tópicos, como la recuperación de la tensión superficial

3.2.4. La condición de estabilidad mecánica y el problema de inconsistencia termodnámica

En el caso sin fuerzas de interacción, a nivel macroscópico se recupera una ecuación de estado ideal de la forma $p = \rho c_s^2$. Sin embargo, la incorporación de 3.26 produce una nueva ecuación de estado dependiente del potencial de interacción:

$$p = \rho c_s^2 + \frac{G}{2} c_s^2 \psi^2, \quad (3.36)$$

mientras que el tensor de presión \mathbf{P} queda definido como [38]:

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot (\rho c_s^2 \mathbf{I}) - \mathbf{F}. \quad (3.37)$$

Shan [34] demostró que para garantizar un balance mecánico exacto, debe considerarse una forma discreta del tensor de presión. En particular, esta expresión puede derivarse a partir de una integral de volumen de la Ec. (3.37):

$$\int (\nabla \cdot \mathbf{P}) d\Omega = \int \nabla \cdot (\rho c_s^2 \mathbf{I}) d\Omega - \int \mathbf{F} d\Omega, \quad (3.38)$$

donde Ω es un volumen cerrado. Si se aplica el teorema de integración de Gauss a la Ec. (3.38) resulta

$$\int \mathbf{P} d\mathbf{A} = \int \rho c_s^2 \mathbf{I} d\mathbf{A} - \int \mathbf{F} d\Omega, \quad (3.39)$$

donde $d\mathbf{A}$ es un diferencial de área. En forma discreta, esta integral puede escribirse como

$$\sum \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} = \sum \rho c_s^2 \mathbf{I} \cdot \mathbf{A} - \sum \mathbf{F}. \quad (3.40)$$

Por lo tanto, el tensor de presión finalmente puede escribirse como:

$$\mathbf{P} = \rho c_s^2 \mathbf{I} + \frac{G}{2} \psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^N w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha. \quad (3.41)$$

En el caso de considerar sólo interacciones con los vecinos cercanos (ubicados a una distancia máxima de $\sqrt{2}$ o $\sqrt{3}$ unidades de grilla en 2 o 3 dimensiones respectivamente), la expansión en serie de Taylor de la Ec. (3.41) resulta:

$$\mathbf{P} = \left(\rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2} \psi^2 + \frac{Gc^4}{12} \psi \nabla^2 \psi \right) \mathbf{I} + \frac{Gc^4}{6} \psi \nabla \nabla \psi. \quad (3.42)$$

La Ec. (3.42) puede usarse para determinar la presión normal a una interfase plana

$$P_n = \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2} \psi^2 + \frac{Gc^4}{12} \left[\alpha \left(\frac{d\psi}{dn} \right)^2 + \beta \psi \frac{d^2 \psi}{dn^2} \right], \quad (3.43)$$

donde n denota la dirección normal a la interfase, y en el caso de interacción de vecinos cercanos se cumple $\alpha = 0$ y $\beta = 3$. Por lo tanto, tomando como base la Ec. (3.43) y considerando que en equilibrio la presión P_n debe ser igual a la presión estática en el seno del fluido [34], puede derivarse la condición de estabilidad mecánica:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left(p_0 - \rho c_s^2 - \frac{Gc^2}{2} \psi^2 \right) \frac{\psi'}{\psi^{1+\varepsilon}} d\rho = 0, \quad (3.44)$$

donde $\psi' = d\psi/d\rho$, $\varepsilon = -2\alpha/\beta$ y $p_0 = p(\rho_l) = p(\rho_g)$. De esta forma, puede verse que la condición de estabilidad mecánica conduce a densidades de coexistencia que en general serán diferentes a las establecidas por la construcción de Maxwell (Ec. (3.31)), ya que si el potencial de interacción satisface la propuesta de He y Doolen, entonces en general no puede cumplirse que $\psi'/\psi^{1+\varepsilon} \propto 1/\rho^2$. Esta incompatibilidad se conoce con el nombre de inconsistencia termodinámica.

3.3. El modelo isotérmico de Li et al.

Los modelos pseudopotential proveen una alternativa sencilla y eficiente para poder simular numéricamente el comportamiento de flujos multifásicos. Esta simplicidad, sin embargo, tiene su precio: las primeras versiones encontraron rápidamente un límite de aplicabilidad, no sólo por el problema de inconsistencia termodinámica, sino por la fuerte presencia de corrientes espúreas en las interfases, aún en problemas estáticos o cuasi-estáticos. Esta combinación de factores llevó a que durante mucho tiempo, el uso del método pseudopotential se limitase a la resolución de problemas con baja relación de densidades y bajo número de Reynolds.

El camino hacia versiones más estables fue forjándose con trabajos que buscan identificar el origen de estas inestabilidades numéricas, junto con mecanismos teóricos para remediarlas (al menos parcialmente). A modo de ejemplo es interesante destacar el trabajo de Shan [39], en el cuál se describe a las corrientes espúreas como un fenómeno que tiene lugar cerca de la interfase de una burbuja estacionaria, y en el cual se produce un flujo pequeño pero finito alrededor de la misma. El patrón de este flujo presenta la misma simetría que la grilla subyacente, y su magnitud es inversamente proporcional a la viscosidad del fluido simulado. Shan demostró que existe una conexión directa entre este fenómeno y la falta de isotropía en ciertos operadores diferenciales discretos, en particular el empleado en la representación discreta de la fuerza de interacción (Ec. (3.26)). Denotando a los tensores

$$E_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)} = \sum_{\alpha} w(|\mathbf{e}_{\alpha}|^2) (\mathbf{e}_{\alpha})_{i_1} \cdots (\mathbf{e}_{\alpha})_{i_n}, \quad (3.45)$$

entonces puede escribirse el gradiente de una función f como:

$$\sum_{\alpha} w(|\mathbf{e}_{\alpha}|^2) f(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}) \mathbf{e}_{\alpha} = (\nabla f) \cdot \mathbf{E}^{(2)} + \frac{1}{3!} (\nabla^{(3)} f) \cdot \mathbf{E}^{(4)} + \frac{1}{5!} \nabla^{(5)} f \cdot \mathbf{E}^{(6)} + \dots \quad (3.46)$$

Por lo tanto, la mejor aproximación a ∇f se logra si todos los tensores $\mathbf{E}^{(n)}$ son isotrópicos, aunque este requisito no puede alcanzarse debido a que existe un número finito de velocidades discretas. Sin embargo, Shan demostró que pueden encontrarse conjuntos adecuados de pesos $\{w(\mathbf{e}_{\alpha})\}$ que mejoran notoriamente la isotropía de la aproximación, y por lo tanto, reducen la magnitud de las corrientes espúreas.

Dentro de un contexto similar al presentado por Shan, Sbragaglia y sus colaboradores adoptaron una nueva expresión para la fuerza de interacción en la que se tienen en cuenta las interacciones de rango medio, es decir, se consideran aquellos nodos que no son vecinos inmediatos [40]:

$$\mathbf{F}_i = -c_s^2 \psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha} w(|\mathbf{e}_{\alpha}|^2) [G_1 \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t) + G_2 \psi(\mathbf{x} + 2\mathbf{e}_{\alpha})] \quad (3.47)$$

Usando esta aproximación, Sbragaglia et al. demostraron analíticamente que, para una interfase plana, la Ec. (3.47) conduce a una tensión superficial que depende de las constantes G_1 y G_2 , y por lo tanto es ajustable. Por otro lado, la extensión del stencil en el cálculo de la fuerza de interacción permite reducir el espesor de la interfase y elevar la relación de densidades en simulaciones estacionarias.

poner cambios en esquemas de fuerzas

Las contribuciones de Shan y Sbragaglia ilustran la evolución que ha sufrido (y que continúa experimentando) el modelo original de Shan y Chen buscando mejorar

la precisión, estabilidad y aplicabilidad del método. En pocas palabras, estos esfuerzos pueden describirse como un compromiso entre la aplicación adecuada de la fuerza de interacción, y la preservación de un algoritmo eficiente y de sencilla implementación.

Mencionar que son modelos 2D Entre las alternativas pseudopotential más recientes, el modelo introducido por Li et al. [28] contiene esas características de equilibrio antes mencionadas. En esta propuesta se hace uso de un operador de colisión MRT, de modo que la ELB vectorial resulta:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{e}\delta_t, t + \delta_t) = \mathbf{M}^{-1} \left[\mathbf{m} - \mathbf{\Lambda}(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{eq}) + \delta_t \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{\Lambda}}{2} \bar{\mathbf{S}} \right) \right]. \quad (3.48)$$

Como se mostró en el **Capítulo 2**, $\mathbf{m} = \mathbf{M}\mathbf{f}$ corresponde a la proyección de la función de distribución \mathbf{f} en el espacio de momentos, y $\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{M}\mathbf{f}^{eq}$ a la transformación de la distribución de equilibrio. En este caso se usa la matriz de transformación y función de equilibrio estándar (**Ecuaciones XX y YY respectivamente**), de modo que la distribución de equilibrio en el espacio de momentos puede escribirse como:

$$\mathbf{m}^{eq} = \rho(1, -2 + 3|\mathbf{u}|^2, 1 - 3|\mathbf{u}|^2, u_x, -u_x, u_y, -u_y, u_x^2 - u_y^2, u_x u_y)^T. \quad (3.49)$$

La matriz $\mathbf{\Lambda}$ corresponde a una matriz diagonal cuyos componentes se denotan mediante

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\tau_\rho^{-1}, \tau_e^{-1}, \tau_\zeta^{-1}, \tau_j^{-1}, \tau_q^{-1}, \tau_j^{-1}, \tau_q^{-1}, \tau_\nu^{-1}, \tau_\nu^{-1}). \quad (3.50)$$

En este modelo, las cantidades macroscópicas conservadas corresponden a la densidad y velocidad, y pueden recuperarse siguiendo el esquema de fuerzas de Guo:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{\alpha} f_{\alpha}, \\ \rho \mathbf{u} &= \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha} + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{F}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

donde \mathbf{F} corresponde a la fuerza total actuando sobre el sistema. En la mayoría de los casos analizados, \mathbf{F} contiene una componente volumétrica (\mathbf{F}_b) y otra asociada al potencial de interacción, de modo que se utiliza $\mathbf{F} = \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_i$.

Siguiendo la idea detallada en un trabajo anterior de Li y sus colaboradores [41], la fuerza de interacción también debe incorporarse durante la colisión a través del término

de fuente $\bar{\mathbf{S}}$, definido en el espacio de momento como:

$$\bar{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F} + \frac{12\sigma|\mathbf{F}_i|^2}{\psi^2\delta_t(\tau_e - 0,5)} \\ -6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F} - \frac{12\sigma|\mathbf{F}_i|^2}{\psi^2\delta_t(\tau_\zeta - 0,5)} \\ F_x \\ -F_x \\ F_y \\ -F_y \\ 2(u_x F_x - u_y F_y) \\ (u_x F_y + u_y F_x) \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

La principal novedad del modelo de Li consiste en la incorporación de términos adicionales en las componentes 1 y 2 de la Ec. (3.52), que dependen linealmente de un parámetro libre σ . En particular, aplicando la expansión de Chapman-Enskog a las Ecs. (3.48)-(3.52) se demuestra que las variables macroscópicas satisfacen:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla \cdot (\rho c_s^2 \mathbf{I}) + \nabla \cdot \mathbf{\Pi} + \mathbf{F} - 2G^2 c^4 \sigma \nabla \cdot (|\nabla \psi|^2 \mathbf{I}), \quad (3.53)$$

de modo que el nuevo tensor de presión satisface:

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot (\rho c_s^2 \mathbf{I}) - \mathbf{F} + 2G^2 c^4 \sigma \nabla \cdot (|\nabla \psi|^2 \mathbf{I}) \quad (3.54)$$

y, de acuerdo a la metodología de Shan [34], puede escribirse como:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_{\text{orig}} + 2G^2 c^4 \sigma (|\nabla \psi|^2 \mathbf{I}), \quad (3.55)$$

donde \mathbf{P}_{orig} corresponde al tensor original definido por la Ec. (3.42). De este resultado se desprende que la nueva diferencia de presión a través de una interfase plana corresponde a:

$$P_n = \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 + \frac{Gc^4}{12} \left[(\alpha + 24G\sigma) \left(\frac{d\psi}{dn} \right)^2 + \beta\psi \frac{d^2\psi}{dn^2} \right], \quad (3.56)$$

y, por lo tanto, $\varepsilon = -2(\alpha + 24G\sigma)/\beta$. De esta manera, la condición de estabilidad mecánica (ε) ya no queda determinada sólo por el conjunto de velocidades de grilla, sino que puede ajustarse a través del parámetro libre σ . Esta nueva aproximación

sigue sin cumplir formalmente con la incompatibilidad planteada por la inconsistencia termodinámica, pero como se muestra en las secciones siguientes, permite alcanzar una excelente representación de las curvas de coexistencia para un amplio rango de temperaturas.

3.4. Validación

El modelo isotérmico de Li ha sido utilizado exitosamente en la simulación de problemas multifásicos diversos, como el impacto de droplets sobre una superficie plana o en la medición de frecuencia de oscilación de droplets aislados.

3.4.1. Construcción de Maxwell

Los experimentos numéricos de construcción de Maxwell constituyen un paso obligado en la validación de cualquier modelo pseudopotential, ya que resulta necesario cuantificar la desviación entre las densidades simuladas y aquellas determinadas por la ecuación de estado adoptada.

3.4.2. Estratificación de un fluido van der Waals

La validación de un método numérico destinado a la resolución de flujo multifásico no es una tarea sencilla, ya que muchas veces no se cuenta con problemas o soluciones de referencia que sirvan como base de comparación. En el caso de lattice Boltzmann, tradicionalmente se ha utilizado una gran variedad de problemas como casos de validación; además de los ya mencionados, como medición del período de oscilación de droplets o estudio de impacto de droplets sobre superficies planas, es posible adicionar otros como el decaimiento de vórtices de Taylor [42], ondas de capilaridad [43] o inestabilidades de Rayleigh-Taylor [44]. En estos casos, la figura de mérito de la comparación suele ser una magnitud global de la simulación, como velocidad de avance de una interfase, o amplitud y período de una oscilación inducida. Si bien el seguimiento de estos parámetros es válido para establecer una caracterización de la precisión del método, en este proceso resulta difícil de identificar, en un mismo problema, características de una simulación propia de un modelo pseudopotential: densidades de coexistencia, ancho de interfase, efecto de fuerzas volumétricas o resolución de grilla.

Esta necesidad de complementar la validación de un modelo pseudopotential llevó a la adaptación y expansión de una solución analítica originalmente presentada por Berberan-Santos et al [45], que permite determinar el perfil de densidad de un fluido regido por la ecuación de estado de van der Waals, dentro de una cavidad y bajo acción de fuerzas gravitatorias. Los primeros resultados de este análisis fueron publicados

oportunamente en el trabajo de Fogliatto et al [46].

La idea detrás de este problema es conceptualmente sencilla. Si se tiene un fluido van der Waals en un campo gravitacional uniforme, con gravedad en el sentido negativo de la coordenada y , entonces la distribución estática de presión satisface:

$$\frac{dp}{dy} = -g\rho(y) = -MgC(y), \quad (3.57)$$

donde M corresponde a la masa molar y $C = 1/v$ a la concentración molar. Si la presión del fluido está asociada a la ecuación de estado de van der Waals

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} = \frac{RT}{1/C-b} - aC^2, \quad (3.58)$$

y se considera que la temperatura puede variar con la coordenada y , entonces la Ec. (3.57) puede escribirse como

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dy} &= \frac{\partial p}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial y} \\ &= \frac{\partial C}{\partial y} \left[\frac{RT(1/C^2) - 2aC(1/C-b)^2}{(1/C-b)^2} \right] + \frac{\partial T}{\partial y} \left(\frac{R}{1/C-b} \right) \end{aligned} \quad (3.59)$$

Combinando las Ecs. (3.57) y (3.59) puede obtenerse una ecuación diferencial para la distribución de la concentración molar:

$$\frac{\partial C}{\partial y} = - \left[MgC + \frac{\partial T}{\partial y} \left(\frac{RC}{1-bC} \right) \right] \left[\frac{RT}{(1-bC)^2} - 2aC \right]^{-1} \quad (3.60)$$

Bibliografía

- [1] He, X., Luo, L.-S. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier–Stokes equation. *Journal of statistical Physics*, **88** (3-4), 927–944, 1997. 7
- [2] Shan, X., Yuan, X.-F., Chen, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier–Stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics*, **550**, 413, 2006. 7, 9
- [3] Grad, H. On the kinetic theory of rarefied gases. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **2** (4), 331–407, 1949. 9
- [4] Wiener, N. The Fourier integral and certain of its applications. Cambridge University Press, 1989. 9
- [5] d’Humières, D., Ginzburg, I., Krafczyk, M., Lallemand, P., Luo, L.-S. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **360** (1792), 437–451, mar. 2002. 10
- [6] Qian, Y. H., d’Humières, D., Lallemand, P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *EPL (Europhysics Letters)*, **17** (6), 479, 1992. 12
- [7] Guo, Z., Shu, C. Lattice Boltzmann method and its applications in engineering. *Advances in computational fluid dynamics*. New Jersey: World Scientific, 2013. 13, 18
- [8] Frisch, U., d’Humières, D., Hasslacher, B., Lallemand, P., Pomeau, I., Rivet, J.-P. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems*, **1**, 649–707, 1987. 13
- [9] He, X., Shan, X., Doolen, G. D. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases. *Physical Review E*, **57** (1), R13, 1998. 15
- [10] Scardovelli, R., Zaleski, S. Direct numerical simulation of free surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **31** (1), 567–603, ene. 1999. 17

- [11] Liu, H., Valocchi, A. J., Kang, Q. Three-dimensional lattice Boltzmann model for immiscible two-phase flow simulations. *Physical Review E*, **85** (4), 046309, abr. 2012. 17, 18
- [12] Gunstensen, A. K., Rothman, D. H., Zaleski, S., Zanetti, G. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids. *Physical Review A*, **43** (8), 4320, 1991. 18
- [13] Shan, X., Chen, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, **47** (3), 1815–1819, 1993. 18, 21
- [14] Shan, X., Chen, H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*, **49** (4), 2941, 1994. 18, 21, 23
- [15] Chen, L., Kang, Q., Mu, Y., He, Y.-L., Tao, W.-Q. A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **76**, 210–236, sep. 2014. 18
- [16] Swift, M. R., Orlandini, E., Osborn, W. R., Yeomans, J. M. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. *Physical Review E*, **54** (5), 5041, 1996. 18
- [17] Inamuro, T., Konishi, N., Ogino, F. A Galilean invariant model of the lattice Boltzmann method for multiphase fluid flows using free-energy approach. *Computer Physics Communications*, **129** (1-3), 32–45, 2000. 18
- [18] He, X., Chen, S., Zhang, R. A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh–Taylor Instability. *Journal of Computational Physics*, **152**, 642–663, 1999. 18, 20
- [19] Liang, H., Shi, B. C., Guo, Z. L., Chai, Z. H. Phase-field-based multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for incompressible multiphase flows. *Physical Review E*, **89** (5), mayo 2014. 18
- [20] Rothman, D. H., Keller, J. M. Immiscible cellular-automaton fluids. *Journal of Statistical Physics*, **52** (3-4), 1119–1127, 1988. 18
- [21] Kuzmin, A., Mohamad, A. A., Succi, S. Multi-relaxation time lattice boltzmann model for multiphase flows. *International Journal of Modern Physics C*, **19** (06), 875–902, 2008. 20
- [22] Jacqmin, D. Calculation of Two-Phase Navier–Stokes Flows Using Phase-Field Modeling. *Journal of Computational Physics*, **155** (1), 96–127, oct. 1999. 20

-
- [23] Ding, H., Spelt, P. D., Shu, C. Diffuse interface model for incompressible two-phase flows with large density ratios. *Journal of Computational Physics*, **226** (2), 2078–2095, oct. 2007. 20
- [24] Li, Q., Luo, K., Kang, Q., He, Y., Chen, Q., Liu, Q. Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. *Progress in Energy and Combustion Science*, **52**, 62–105, feb. 2016. 22
- [25] Leclaire, S., Pellerin, N., Reggio, M., Trépanier, J.-Y. Unsteady immiscible multiphase flow validation of a multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **47** (10), 105501, 2014. 22
- [26] Leclaire, S., Pellerin, N., Reggio, M., Trépanier, J.-Y. Enhanced equilibrium distribution functions for simulating immiscible multiphase flows with variable density ratios in a class of lattice Boltzmann models. *International Journal of Multiphase Flow*, **57**, 159–168, 2013. 22
- [27] Huang, H., Huang, J.-J., Lu, X.-Y., Sukop, M. C. On simulations of high-density ratio flows using color-gradient multiphase lattice Boltzmann models. *International Journal of Modern Physics C*, **24** (04), 1350021, 2013. 22
- [28] Li, Q., Luo, K. H., Li, X. J. Lattice Boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model. *Physical Review E*, **87** (5), 2013. 22, 32
- [29] Lee, T., Lin, C.-L. A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. *Journal of Computational Physics*, **206** (1), 16–47, jun. 2005. 22
- [30] Safari, H., Rahimian, M. H., Krafczyk, M. Consistent simulation of droplet evaporation based on the phase-field multiphase lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, **90** (3), sep. 2014. 22
- [31] Márkus, A., Házi, G. On pool boiling at microscale level: The effect of a cavity and heat conduction in the heated wall. *Nuclear Engineering and Design*, **248**, 238–247, jul. 2012. 22
- [32] Gong, S., Cheng, P. Lattice Boltzmann simulations for surface wettability effects in saturated pool boiling heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **85**, 635–646, jun. 2015. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0017931015001714>. 22

-
- [33] Safari, H., Rahimian, M. H., Krafczyk, M. Extended lattice Boltzmann method for numerical simulation of thermal phase change in two-phase fluid flow. *Physical Review E*, **88** (1), 2013. 22
- [34] Shan, X. Pressure tensor calculation in a class of nonideal gas lattice Boltzmann models. *Physical Review E*, **77** (6), jun. 2008. 23, 29, 30, 33
- [35] Blundell, S., Blundell, K. Concepts in Thermal Physics. Oxford University Press, 2006. 24, 25
- [36] McQuarrie, D. A., Simon, J. D. Molecular Thermodynamics. University Science Books, 1999. 28
- [37] Yuan, P., Schaefer, L. Equations of state in a lattice Boltzmann model. *Physics of Fluids*, **18** (4), 042101, 2006. 28
- [38] He, X., Doolen, G. D. Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice Boltzmann models for multiphase flows. *Journal of Statistical Physics*, **107** (1-2), 309–328, 2002. 29
- [39] Shan, X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models. *Physical Review E*, **73** (4), 047701, 2006. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.73.047701>. 31
- [40] Sbragaglia, M., Benzi, R., Biferale, L., Succi, S., Sugiyama, K., Toschi, F. Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential. *Physical Review E*, **75** (2), feb. 2007. 31
- [41] Li, Q., Luo, K. H., Li, X. J. Forcing scheme in pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows. *Physical Review E*, **86** (1), 2012. 32
- [42] Guo, Z., Zheng, C., Shi, B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, **65** (4), abr. 2002. 34
- [43] McCracken, M. E., Abraham, J. Multiple-relaxation-time lattice-Boltzmann model for multiphase flow. *Physical Review E*, **71** (3), mar. 2005. 34
- [44] Li, Q., Luo, K. H., Gao, Y. J., He, Y. L. Additional interfacial force in lattice Boltzmann models for incompressible multiphase flows. *Physical Review E*, **85** (2), 2012. 34
- [45] Berberan-Santos, M. N., Bodunov, E. N., Pogliani, L. Liquid–vapor equilibrium in a gravitational field. *American Journal of Physics*, **70** (4), 438, 2002. 34

-
- [46] Fogliatto, E. O., Clausse, A., Teruel, F. E. Simulation of phase separation in a Van der Waals fluid under gravitational force with Lattice Boltzmann method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, **29** (9), 3095–3109, 2019. 35

