

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)

3 de Diciembre de 2020

Departamento de Mecánica Computacional – Centro Atómico
Bariloche

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

A mi familia

Definiciones, acrónimos y símbolos

Acrónimos

LBE Lattice Boltzmann Equation

Símbolos

ρ Densidad

Índice de contenidos

Definiciones, acrónimos y 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	6
2.2. Discretización del espacio de velocidades	7
2.2.1. Adimensionalización	8
2.2.2. Expansión en series de Hermite	9
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	13
2.3. Discretización del espacio y tiempo	14
2.4. Operadores de colisión	16
2.4.1. Operador BGK	16
2.4.2. Operador MRT	16
2.5. La expansión de Chapman-Enskog	19
2.6. Lattice Boltzmann como método numérico	20
Bibliografía	23

Índice de figuras

2.1. Velocidades de grilla en los modelos D1Q3, D2Q9 y D3Q15.	14
2.2. Representación esquemática de las etapas principales de la solución de una LBE.	21
2.3. Algoritmo LB general	22

Índice de tablas

2.1. Definición de los principales onjuntos de velocidades de grilla.	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 tradicionalmente 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 (FDP, en inglés *particle distribution function* o pdf), 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 \mathbf{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 de orden cero, es decir:

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

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, la densidad de impulso y las densidades de energía total (E) e interna (e) pueden determinarse mediante momentos de primer y segundo orden:

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

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

$$\rho(\mathbf{x}, t) e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int |\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi. \quad (2.4)$$

2.1.1. Función de distribución de equilibrio

En el análisis original realizado para gases iluidos y monoatómicos, Maxwell [cita](#) 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 $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{u}$. En este caso, 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 como producto de funciones unidimensionales:

$$f^{eq}(|\mathbf{v}|^2) = f^{eq}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = f_{1D}^{eq}(v_x^2) f_{1D}^{eq}(v_y^2) f_{1D}^{eq}(v_z^2), \quad (2.5)$$

entonces puede demostrarse que dicha distribución queda definida como:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|^2, t) = e^{3a} e^{b|\mathbf{v}|^2}. \quad (2.6)$$

Como las colisiones de partículas monoatómicas conservan masa, impulso y energía, pueden encontrarse las constantes a y b imponiendo que $f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t)$ posea los mismos momentos que $f(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t)$. De esta manera, se puede establecer una expresión explícita para la distribución de equilibrio:

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

En este caso se utilizó la relación de gases ideales

$$\rho e = \frac{3}{2} \rho R T = \frac{3}{2} p, \quad (2.8)$$

donde R es una constante, p representa a la presión y T a la temperatura macroscópica del fluido.

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 de f respecto al tiempo resulta:

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) \frac{dt}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta} \right) \frac{dx_\beta}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} \right) \frac{d\xi_\beta}{dt}. \quad (2.9)$$

Este diferencial total puede reescribirse usando la definición de la velocidad de las partículas ($dx_\beta/dt = \xi_\beta$), e incorporando una fuerza volumétrica \mathbf{F} determinada por la segunda ley de Newton mediante $d\xi_\beta/dt = F_\beta/\rho$. Si se utiliza la notación tradicional $\Omega(f) = df/dt$ para el diferencial total respecto al tiempo se obtiene una expresión para describir la evolución de f , conocida como ecuación de Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\beta \frac{\partial f}{\partial x_\beta} + \frac{F_\beta}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} = \Omega(f). \quad (2.10)$$

La Ec. (2.10) 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 sobre la FDP. 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 :

$$\int \Omega(f) d^3\xi = 0 \quad (2.11a)$$

$$\int \boldsymbol{\xi} \Omega(f) d^3\xi = \mathbf{0} \quad (2.11b)$$

$$\int |\boldsymbol{\xi}|^2 \Omega(f) d^3\xi = 0 \quad (2.11c)$$

2.1.3. Ecuaciones de conservación macroscópicas

Las ecuaciones de conservación de propiedades macroscópicas pueden obtenerse como momentos de la ecuación de Boltzmann, es decir, multiplicando la Ec. (2.10) por funciones de $\boldsymbol{\xi}$ e integrando sobre todo el espacio de velocidades. Para simplificar este análisis, es necesario introducir previamente una notación general para los distintos momentos de f :

$$\Pi_0 = \int f \, d^3\xi = \rho \quad (2.12a)$$

$$\Pi_\alpha = \int \xi_\alpha f \, d^3\xi = \rho u_\alpha \quad (2.12b)$$

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int \xi_\alpha \xi_\beta f \, d^3\xi \quad (2.12c)$$

$$\Pi_{\alpha\beta\gamma} = \int \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma f \, d^3\xi \quad (2.12d)$$

La ecuación más simple de obtener corresponde a la de conservación de masa. Integrando la Ec. (2.10) en el espacio de velocidades, y usando las Ecs. (2.11) y (2.12), se obtiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\beta)}{\partial x_\beta} = 0. \quad (2.13)$$

De manera similar, multiplicando la Ec. (2.10) por ξ_α e integrando en el espacio de velocidades se obtiene la ecuación de conservación de impulso lineal:

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

donde $\Pi_{\alpha\beta}$ se define como el tensor de flujo de impulso. Si se descompone la velocidad de las partículas como $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}$, entonces la Ec. (2.14) puede reescribirse como

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + F_\alpha. \quad (2.15)$$

donde $\sigma_{\alpha\beta}$ representan un tensor de tensiones:

$$\sigma_{\alpha\beta} = - \int v_\alpha v_\beta f \, d^3\xi \quad (2.16)$$

Finalmente, puede seguirse un procedimiento similar para encontrar una ecuación macroscópica de conservación de energía. Multiplicando la Ec. (2.10) por $\xi_\alpha \xi_\beta$ e integrando en el espacio de velocidades se obtiene:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\Pi_{\alpha\alpha\beta}}{\partial x_\beta} = F_\beta u_\beta. \quad (2.17)$$

Por otro lado, si se descompone el momento como en la ecuación de conservación de impulso y usando la Ec. (2.15) multiplicada por u_α , la Ec. (2.17) puede reescribirse como:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{(\rho u_\beta e)}{\partial x_\beta} = \sigma_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{\partial q_\beta}{\partial x_\beta}, \quad (2.18)$$

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

$$q_\beta = \frac{1}{2} \int v_\alpha v_\alpha v_\beta f \, d^3\xi \quad (2.19)$$

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. Por ejemplo, en el caso particular en que $f \simeq f^{eq}$, las ecuaciones de conservación se convierten en las ecuaciones de Euler para impulso y energía:

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + F_\alpha, \quad (2.20a)$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{(\rho u_\beta e)}{\partial x_\beta} = -p \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\beta}. \quad (2.20b)$$

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, y constituye un concepto fundamental en la comprensión de la forma final de la técnica numérica.

2.2. Discretización del espacio de velocidades

El desarrollo mostrado en la Sección 2.1 destaca 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, porque 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 es posible 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 detallará 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 estos polinomios (también exponencial), mientras que los momentos de masa e impulso son representados como integrales de f^{eq} multiplicadas por los polinomios de Hermite. Estas características permiten, por un lado, encontrar una expresión reducida de f^{eq} a través de una suma truncada de polinomios de Hermite, mientras que se conservan adecuadamente los primeros momentos. Por otro lado, esta representación permite evaluar dichos momentos mediante sumas discretas donde el integrando está evaluado en coordenadas específicas ξ_i , llamadas absisas. Estas técnicas pueden extenderse a la representación de la función de distribución f .

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:

$$[f] = \text{kg} \times \frac{1}{\text{m}^3} \times \frac{1}{(\text{m/s})^3} = \frac{\text{kg s}^3}{\text{m}^6}. \quad (2.21)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{l}{V} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \frac{\partial}{\partial x^*} = l \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial \xi^*} = V \frac{\partial}{\partial \xi}. \quad (2.22)$$

Esto lleva a escribir a la forma adimensional de la ecuación de Boltzmann en d

dimensiones:

$$\frac{\partial f^*}{\partial t^*} + \xi_\alpha^* \frac{\partial f^*}{\partial x_\alpha^*} + \frac{F_\alpha^*}{\rho^*} \frac{\partial f^*}{\partial \xi_\alpha^*} = \Omega^*(f^*), \quad (2.23)$$

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:

$$f^{eq*} = \left(\frac{\rho^*}{2\pi\theta^*} \right)^{d/2} e^{-(\boldsymbol{\xi}^* - \mathbf{u}^*)^2/(2\theta^*)} \quad (2.24)$$

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:

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) d^3\xi = \rho(\mathbf{x}, t) \quad (2.25a)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\xi} d^3\xi = \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \quad (2.25b)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \frac{|\boldsymbol{\xi}|^2}{2} d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \frac{|\boldsymbol{\xi}|^2}{2} d^3\xi = \rho(\mathbf{x}, t) E(\mathbf{x}, t) \quad (2.25c)$$

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \frac{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}|^2}{2} d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \frac{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}|^2}{2} d^3\xi = \rho(\mathbf{x}, t) e(\mathbf{x}, t) \quad (2.25d)$$

Las cantidades conservadas de la Ec. (2.25) 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]

$$\mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}) = (-1)^n \frac{1}{\omega(\mathbf{x})} \nabla^{(n)} \omega(\mathbf{x}), \quad (2.26)$$

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

$$\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{-\mathbf{x}^2/2} \quad (2.27)$$

Tanto $\mathbf{H}^{(n)}$ como $\nabla^{(n)}$ 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

$$H^{(n)}(x) = (-1)^{(n)} \frac{1}{\omega(x)} \frac{d^n}{dx^n} \omega(x), \quad \omega(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \quad (2.28)$$

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:

$$f(\mathbf{x}) = \omega(\mathbf{x}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)} \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{a}^{(n)} = \int f(\mathbf{x}) \mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}) d^n x \quad (2.29)$$

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

$$f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) = \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta) \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \quad (2.30a)$$

$$\mathbf{a}^{(n)eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta) = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d^d \boldsymbol{\xi} \quad (2.30b)$$

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

$$f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\rho}{\theta^{d/2}} \omega\left(\frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}}{\sqrt{\theta}}\right), \quad (2.31)$$

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

$$\mathbf{a}^{(n)eq} = \rho \int \omega(\boldsymbol{\eta}) \mathbf{H}^{(n)}(\sqrt{\theta} \boldsymbol{\eta} - \mathbf{u}) d^d \boldsymbol{\eta}, \quad (2.32)$$

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

$$a^{(0),eq} = \rho \quad (2.33a)$$

$$a_{\alpha}^{(1),eq} = \rho u_{\alpha} \quad (2.33b)$$

$$a_{\alpha\beta}^{(2),eq} = \rho [u_{\alpha} u_{\beta} + (\theta - 1) \delta_{\alpha\beta}] \quad (2.33c)$$

$$a_{\alpha\beta\gamma}^{(3),eq} = \rho [u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma} + (\theta - 1) (\delta_{\alpha\beta} u_{\gamma} + \delta_{\beta\gamma} u_{\alpha} + \delta_{\gamma\alpha} u_{\beta})]. \quad (2.33d)$$

A partir de la Ec. (2.33) 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 :

$$a^{(0),eq} = \int f^{eq} d^d \xi = \rho = \int f d^d \xi = a^{(0)} \quad (2.34a)$$

$$a_{\alpha}^{(1),eq} = \int \xi_{\alpha} f^{eq} d^d \xi = \rho u_{\alpha} = \int \xi_{\alpha} f d^d \xi = a_{\alpha}^{(1)} \quad (2.34b)$$

$$\frac{a_{\alpha\alpha}^{(2),eq} + \rho d}{2} = \int \frac{|\xi|^2}{2} f^{eq} d^d \xi = \rho E = \int \frac{|\xi|^2}{2} f d^d \xi = \frac{a_{\alpha\alpha}^{(2)} + \rho d}{2} \quad (2.34c)$$

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:

$$\begin{aligned} f^{eq} &\approx \omega(\xi) \sum_{n=0}^{N=3} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n),eq} \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\xi) \\ &\approx \omega(\xi) \rho [1 + \xi_{\alpha} u_{\alpha} + (u_{\alpha} u_{\beta} + (\theta - 1) \delta_{\alpha\beta}) (\xi_{\alpha} \xi_{\beta} - \delta_{\alpha\beta})] \\ &\approx \omega(\xi) \rho \hat{Q}(\mathbf{u}, \theta, \xi), \end{aligned} \quad (2.35)$$

donde $\hat{Q}(\mathbf{u}, \theta, \xi)$ es un polinomio multidimensional.

2.2.3. Discretización de la función de distribución de equilibrio

La expansión de la función de distribución de equilibrio $f^{eq}(\mathbf{x}, \xi, t)$ en series de Hermite es apropiada, ya que la forma funcional de $f^{eq}(\xi)$ es similar a la de la función generatriz $\omega(\xi)$, 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:

$$\int \omega(\mathbf{x}) P^{(N)}(\mathbf{x}) d^d x = \sum_{\alpha=1}^n w_{\alpha} P^{(N)}(\mathbf{x}_{\alpha}), \quad (2.36)$$

donde $P^{(N)}$ es un polinomio de grado N , n es al menos $n = (N + 1)/2$, y w_{α} son pesos asociados a las abscisas \mathbf{x}_{α} . En este caso, cada componente del punto multidimensional \mathbf{x}_{α} , es decir, $x_{\alpha\beta}$ con $\beta = 1 \dots d$, es una raíz del polinomio de Hermite unidimensional $H^n(x_{\alpha\beta}) = 0$. De esta forma, la cuadratura de Gauss-Hermite puede usarse para rees-

cribir los coeficientes de la serie de f^{eq} mediante un conjunto discreto de velocidades $\{\xi_\alpha\}$:

$$\mathbf{a}^{(n),eq} = \int f^{eq}(\xi) \mathbf{H}^{(n)}(\xi) d^d \xi = \rho \sum_{\alpha=1}^q w_\alpha Q(\xi_\alpha) \mathbf{H}^{(n)}(\xi_\alpha). \quad (2.37)$$

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

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

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

$$\mathbf{e}_\alpha = \frac{\xi_\alpha}{\sqrt{3}}, \quad (2.39)$$

es posible escribir una forma final para la distribución de equilibrio discreta:

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

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 ξ también puede ser usado con la función de distribución f :

$$\mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{e}, t) \mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{e}) d^d \mathbf{e} \approx \sum_{\alpha=1}^q f_\alpha(\mathbf{x}, t) \mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{e}_\alpha) \quad (2.41)$$

Ahora se tiene un conjunto de q funciones $f_\alpha(\mathbf{x}, t)$ relacionadas con las velocidades discretas \mathbf{e}_α , también conocidas como velocidades de grilla. Usando este conjunto es posible reescribir la ecuación de Boltzmann, pero esta vez discreta en el espacio de velocidades:

$$\partial_t f_\alpha + e_{\alpha\beta} \partial_\beta f_\alpha = \Omega(f_\alpha), \quad \alpha = 1, \dots, q. \quad (2.42)$$

Los momentos macroscópicos se pueden calcular usando sumas discretas:

$$\rho = \sum_{\alpha} f_\alpha = \sum_{\alpha} f_\alpha^{eq}, \quad (2.43a)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{eq} \mathbf{e}_{\alpha}. \quad (2.43b)$$

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 $\{\mathbf{e}_{\alpha}\}$ 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 en su uso.

Tradicionalmente, los conjuntos de velocidades suelen identificarse con la notación $DdQq$ introducida por Qian [6], donde d corresponde al número de dimensiones espaciales y q a la cantidad de velocidades discretas. Estos conjuntos quedan determinados por las velocidades $\{\mathbf{e}_{\alpha}\}$, los pesos $\{w_{\alpha}\}$ 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 $\{w_{\alpha}\}$. Esta simetría implica que los tensores de grilla de hasta orden 5 satisfagan:

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} = 1 \quad (2.44a)$$

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} e_{\alpha\beta} = 0 \quad (2.44b)$$

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} e_{\alpha\beta} e_{\alpha\gamma} = c_s^2 \delta_{\beta\gamma} \quad (2.44c)$$

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} e_{\alpha\beta} e_{\alpha\gamma} e_{\alpha\delta} = 0 \quad (2.44d)$$

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} e_{\alpha\beta} e_{\alpha\gamma} e_{\alpha\epsilon} e_{\alpha\mu} = c_s^4 (\delta_{\beta\gamma} \delta_{\epsilon\mu} + \delta_{\beta\epsilon} \delta_{\gamma\mu} + \delta_{\beta\mu} \delta_{\gamma\epsilon}) \quad (2.44e)$$

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} e_{\alpha\beta} e_{\alpha\gamma} e_{\alpha\epsilon} e_{\alpha\mu} e_{\alpha\nu} = 0. \quad (2.44f)$$

Una vez establecidas estas restricciones, el procedimiento habitual consiste en definir el conjunto de velocidades discretas, y posteriormente determinar $\{w_{\alpha}\}$ y c_s^2 . La dimensión de $\{\mathbf{e}_{\alpha}\}$ 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 δ_x , y en

intervalos de tiempo regulares δ_t , por lo que resulta conveniente elegir el conjunto de velocidades $\{e_\alpha\}$ de modo que conecten exclusivamente nodos vecinos. De esta forma surgen los modelos de grilla tradicionales como D1Q3, D2Q9 y D3Q15, cuyas propiedades se resumen en la Tabla 2.1 y se muestran esquemáticamente en la Fig. 2.1

Modelo	$\{e_\alpha\}$	$\{w_\alpha\}$	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: Definición de los principales conjuntos de velocidades de grilla.

[Insert Image
Here]

Figura 2.1: Velocidades de grilla en los modelos D1Q3, D2Q9 y D3Q15.

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 ecuación de lattice Boltzmann (en inglés

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

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

Por inspección, debe cumplirse

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

de modo que las soluciones f_α siguen una trayectoria dada por $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{e}_\alpha t$, 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) en un intervalo temporal δ_t resulta:

$$f_\alpha(\mathbf{x}_0 + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t_0 + \delta_t) - f_\alpha(\mathbf{x}_0, t_0) = \int_0^{\delta_t} \Omega_\alpha(\mathbf{x}_0 + \mathbf{e}_\alpha \zeta, t_0 + \zeta) d\zeta. \quad (2.47)$$

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

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = \int_0^{\delta_t} \Omega_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \zeta, t + \zeta) d\zeta. \quad (2.48)$$

A partir de la integración de la Ec. (2.48) resulta explícito el acople entre la discretización espacial y temporal, y se refuerza la practicidad de emplear conjuntos de velocidades que, en un intervalo de tiempo δ_t , se vinculen con las posiciones vecinas en la grilla espacial. Sólo resta integral el término derecho de la Ec. (2.48). Empleando el método de Euler explícito, puede obtenerse finalmente la forma popular de la LBE:

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = \delta_t \Omega_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (2.49)$$

La aproximación de Euler empleada conduce a una representación 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 aplicando 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

Desde un punto de vista cinético, el operador de colisión original de Boltzmann sólo es aplicable a simulaciones de gases, ya que únicamente considera colisiones binarias entre moléculas. Incluso con estas suposiciones, la descripción formal de este operador es complicada.

Afortunadamente, el operador de colisión puede simplificarse significativamente en usos prácticos, ya que no es necesario reproducir con exactitud la interacción microscópica de las FDP para determinar el comportamiento macroscópico de un fluido, sino que sólo es necesario analizar las cantidades conservadas o momentos. De esta manera, el operador de colisión puede construirse artificialmente, sujeto a las restricciones de conservación de los momentos adecuados.

2.4.1. Operador BGK

La expresión más sencilla y popular del operador de colisión está basada en la propuesta de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK), y considera una relación lineal entre la función de distribución y su versión de equilibrio:

$$\Omega_\alpha = -\frac{f_\alpha - f_\alpha^{eq}}{\tau}. \quad (2.50)$$

Con esta suposición, este operador puede interpretarse como la representación de la tendencia de f_α a alcanzar su estado de equilibrio después de un tiempo τ . Como se mostró en la Sección 2.1.3, la desviación de f respecto a su valor de equilibrio está vinculada a propiedades macroscópicas como viscosidad o difusividad térmica y, en consecuencia, al factor de relajación τ .

Esta aproximación del operador de colisión funciona en muchos casos, y ha contribuido a expandir la popularidad de la técnica gracias a la capacidad de reproducir ecuaciones de continuidad con un único factor de relajación. Sin embargo, esta simplicidad está asociada a problemas de precisión y estabilidad, que muchas veces sólo puede resolverse con incrementos significativos en la resolución de grilla.

2.4.2. Operador MRT

La aproximación BGK no es el único mecanismo válido para representar el operador de colisión. Una mejora directa surge de considerar tasas de colisión diferentes para cada componente de la función de distribución, $\Omega_\alpha = -\Lambda_\alpha(f_\alpha - f_\alpha^{eq})$, lo que da origen a la

familia de operadores de colisión de relajación múltiple [10] (MRT o *multiple relaxation times* por sus siglas en inglés). En este caso, las restricciones de conservación no se cumplen si los factores de relajación son diferentes, por lo que es necesario realizar un paso adicional, y considerar la relajación individual de momentos de la velocidad. De esta manera, la principal diferencia con el operador BGK radica en que la relajación al estado de equilibrio se realiza en el llamado espacio de momentos, y la resolución de la LBE se completa volviendo al espacio de poblaciones original.

Los momentos fueron introducidos como sumatorias de la FDP pesada con los polinomios de Hermite. Siguiendo una definición similar, es posible establecer que el momento m_k puede obtenerse en un espacio $DdQq$ a través de una matriz de transformación \mathbf{M} de dimensión $q \times q$:

$$m_k = \sum_{\alpha=0}^{q-1} M_{k\alpha} f_{\alpha}, \quad k = 0, \dots, q-1. \quad (2.51)$$

Esta expresión para los momentos puede reescribirse en notación vectorial usando:

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \mathbf{M} \mathbf{f}, \\ \mathbf{m} &= (m_0, \dots, m_{q-1})^T, \\ \mathbf{f} &= (f_0, \dots, f_{q-1})^T. \end{aligned} \quad (2.52)$$

La idea principal detrás del operador MRT radica en relajar momentos (en lugar de poblaciones) con tasas individuales. Si la matriz de transformación \mathbf{M} se elige adecuadamente, estos los momentos m_k pueden corresponder directamente con los momentos hidrodinámicos, como densidad o impulso lineal. Si bien existen numerosas alternativas para construir esta matriz, la más común se basa en definir las filas de \mathbf{M} usando un conjunto de vectores ortogonales. Como cada fila de \mathbf{M} produce el mapeo de f a un momento específico, es posible tomar los vectores asociados a la densidad y densidad de impulso, y completar el conjunto ortogonal mediante el proceso de Gram-Schmidt. De esta forma, es posible asegurar que los vectores son linealmente independientes y, por lo tanto, \mathbf{M}^{-1} existe.

La aplicación del procedimiento de ortogonalización genera la siguiente matriz para

el espacio D2Q9:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

mientras que para D3Q15 resulta:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 16 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

Una vez que se conoce la matriz de transformación \mathbf{M} sólo resta reescribir la LBE para incorporar la relajación individual de los momentos asociados. La LBE con ope-

rador BGK puede escribirse de forma vectorial como:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = -\Lambda [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)], \quad (2.55)$$

donde $\mathbf{\Lambda} = \Lambda \mathbf{I}$. En este caso, el operador de colisión permanece inalterado si se introduce una matriz identidad $\mathbf{I} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) &= -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} \Lambda [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)] \\ &= -\mathbf{M}^{-1} \Lambda \mathbf{M} [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)] \\ &= -\mathbf{M}^{-1} \Lambda [\mathbf{M} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M} \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)] \\ &= -\mathbf{M}^{-1} \Lambda [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)]. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Con esta idea, resulta natural extender la definición de $\mathbf{\Lambda}$ para incorporar la relajación individual de cada momento usando

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\Lambda_0, \dots, \Lambda_{q-1}). \quad (2.57)$$

De esta forma, el uso de un operador de colisión MRT involucra un mapeo del espacio de poblaciones al espacio de momentos usando una matriz de transformación \mathbf{M} . Si \mathbf{M} se elige adecuadamente, este proceso permite realizar la relajación de los momentos hidrodinámicos de manera individual, para luego volver a ser transformados al espacio de poblaciones original.

2.5. La expansión de Chapman-Enskog

En la Sección 2.1.2 se muestra que existe un vínculo directo entre la ecuación de Boltzmann, los primeros momentos de la FDP y las ecuaciones de conservación asociadas a la descripción continua de un fluido. Sin embargo, la convergencia hacia una LBE surge como producto de numerosas aproximaciones y simplificaciones, por lo que es necesario evaluar el comportamiento de la forma discreta de la ecuación de Boltzmann para justificar su uso como técnica numérica de resolución de mecánica de fluidos.

Un método robusto para estudiar la relación entre la LBE discreta y las ecuaciones hidrodinámicas recuperadas se conoce con el nombre de análisis de Chapman-Enskog. Esta metodología toma su nombre de los matemáticos Sydney Chapman y David Enskog, quienes desarrollaron técnicas para encontrar ecuaciones macroscópicas a partir de la ecuación de Boltzmann con el operador de colisión original [11]. Esencialmente, este análisis consiste en una expansión o perturbación de f_α en torno a la distribución de equilibrio f_α^{eq} , utilizando el número de Knudsen (Kn) como parámetro de expansión.

Como se detalla en la Sección 2.1.3, si $f \simeq f^{eq}$ entonces es posible recuperar las ecuaciones de Euler. Por lo tanto, cualquier comportamiento diferente al de estas ecuaciones está vinculado a los términos de no-equilibrio, es decir, a aquellas desviaciones de la distribución de equilibrio que se explicitan con la expansión de Chapman-Enskog.

Típicamente, la expansión de f_α se realiza usando el parámetro ε^n para indicar los términos de orden Kn^n . De esta manera, los componentes de la FDP discreta se escriben como:

$$f_\alpha = \sum_n \varepsilon^n f_\alpha^{(n)}, \quad (2.58)$$

donde $f_\alpha^{(0)} = f_\alpha^{eq}$. Como destaca Krüger [12], un concepto central de esta perturbación implica que, en una ecuación perturbada, cada orden en Kn forma una ecuación semi-independiente. De esta manera, cada ecuación posee un vínculo con el orden siguiente y este vínculo sólo incorpora términos de corrección, por lo que simplemente es necesario evaluar una cantidad reducida de órdenes.

El camino clásico usado para completar el análisis de expansión consiste en expresar las componentes de una LBE como funciones definidas en (\mathbf{x}, t) , y aplicar la expansión a las FDP y a los operadores diferenciales. Si se preservan los términos correspondientes a los primeros órdenes de ε , es posible separar la ecuación expandida en un conjunto de ecuaciones correspondientes a cada escala. De esta manera, tomando momentos a cada ecuación y luego recombinando, es posible encontrar cuáles son las ecuaciones macroscópicas recuperadas.

La aplicación de este análisis y la evaluación de sus resultados no es directa ni trivial. Sin embargo, en la bibliografía existen numerosos ejemplos del uso de esta técnica en el análisis de las formas más sencillas de ecuaciones de Boltzmann discretas [12, 13, 14, 7]. Por otro lado, en los Capítulos ?? y ?? se muestra, de manera detallada, cómo es el procedimiento necesario para efectuar el análisis de Chapman-Enskog sobre ecuaciones con operador de colisión MRT y términos de fuente.

2.6. Lattice Boltzmann como método numérico

La representación discreta de la ecuación de Boltzmann y sus principales momentos, junto con la construcción adecuada de un operador de colisión artificial, constituyen una técnica que permite, en principio, simular el comportamiento de fluidos. Por otro lado, la incorporación del análisis de Chapman-Enskog permite verificar formalmente cuál es el comportamiento hidrodinámico macroscópico, de modo que se logra alcanzar un conjunto de características que permiten clasificar a LB como un método numérico para mecánica de fluidos.

A diferencia de las técnicas tradicionales, con LB no se resuelven directamente las ecuaciones diferenciales de interés, sino que su solución se obtiene de manera indirecta,

es decir, a partir de la solución de otro tipo de ecuaciones. En este caso, se realiza el transporte de una FDP en una grilla regular, con momentos discretos que están asociados a propiedades macroscópicas del fluido. Si bien existen numerosas variantes del método, desarrolladas para incorporar características particulares de cada tipo de flujo, o aspectos numéricos como precisión y estabilidad, la integración de la ecuación de Boltzmann mediante el método de características da origen al algoritmo típico de LB, como se ejemplifica con el operador BGK:

$$\underbrace{f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t + \delta_t)}_{\text{advección}} = \underbrace{f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)] \delta_t}_{\text{colisión}} \quad (2.59)$$

Como se muestra en la ecuación, la implementación numérica de una LBE contiene dos partes claramente identificables. Por un lado, la relajación de cada componente (o de los diferentes momentos en un operador MRT), tiene lugar durante el proceso conocido como colisión. Durante esta etapa, típicamente se realizan operaciones locales sobre la FDP, es decir, empleando información de variables definidas en (\mathbf{x}, t) . Después de esta instancia, las componentes de la FDP se asocian a un estado conocido como post-colisión, usualmente denotado como f_α^* .

La segunda etapa del algoritmo LB general, conocida como advección o *streaming*, consiste en el desplazamiento de las componentes de post-colisión hacia los nodos vecinos. Como se muestra esquemáticamente en la Fig. 2.2, cada componente f_α^* debe reposicionarse en el nodo vecino conectado por la velocidad de grilla correspondiente.

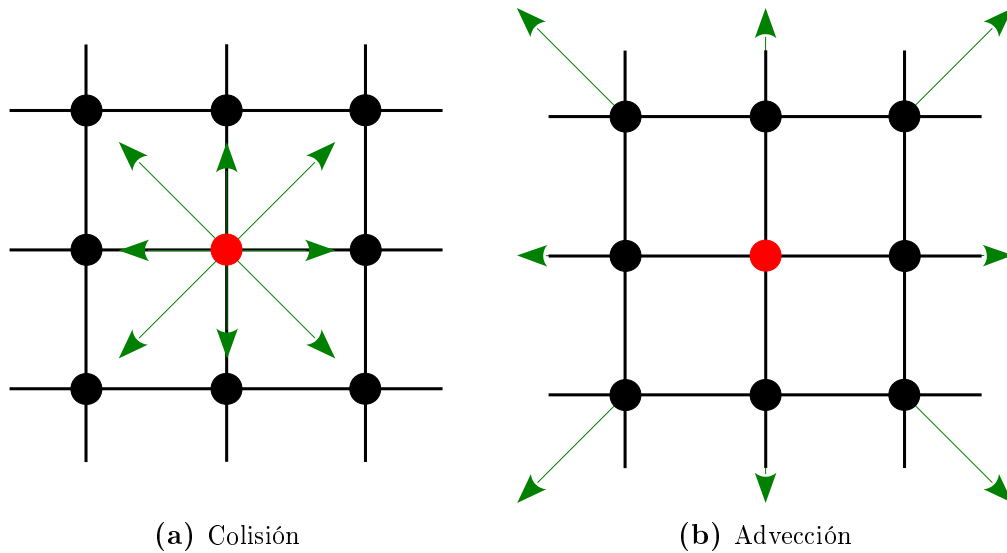


Figura 2.2: Representación esquemática de las etapas principales de la solución de una LBE.

Durante el desarrollo de la etapa de colisión es necesario involucrar a las variables macroscópicas definidas a tiempo t , a través de la función de distribución o términos

de fuente adicionales. Como esta información es requerida numerosas veces durante un mismo paso de tiempo, es conveniente definir (computacionalmente) explícitamente a las variables macroscópicas y actualizar los valores de cada nodo sólo una vez por paso de tiempo. Con esta alternativa se construye el algoritmo general para la resolución de una LBE, con los pasos que se resumen en el esquema de la Fig. 2.3. Este mecanismo de resolución es el empleado en el desarrollo de esta tesis.

[Insert Image
Here]

Figura 2.3: Algoritmo LB general

En la Fig. 2.3 se muestra un paso adicional (y fundamental) del algoritmo, y que consiste en la implementación de condiciones de contorno. Después del paso de advección, los nodos ubicados sobre la frontera del dominio computacional contienen componentes que no pueden ser actualizadas, ya que no existen nodos vecinos en ciertas direcciones. En el caso de LB, esta información puede reconstruirse con métodos específicos para obtener el comportamiento hidrodinámico deseado, como restricciones en el valor de las variables macroscópicas sobre paredes, condiciones periódicas o de flujo saliente. En los capítulos siguientes se aborda en detalle la incorporación de éstos métodos al algoritmo.

2.6.1. Propiedades macroscópicas recuperadas

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. 8
- [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. 8, 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. 10
- [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. 11
- [6] Qian, Y. H., d’Humières, D., Lallemand, P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *EPL (Europhysics Letters)*, **17** (6), 479, 1992. 13
- [7] Guo, Z., Shu, C. Lattice Boltzmann method and its applications in engineering. *Advances in computational fluid dynamics*. New Jersey: World Scientific, 2013. 13, 20
- [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] Lallemand, P., Luo, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, **61** (6), 6546, 2000. 17

- [11] Chapman, S., Cowling, T. G. The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. Cambridge university press, 1970. 19
- [12] Krüger, T., Kusumaatmaja, H., Kuzmin, A., Shardt, O., Silva, G., Viggen, E. M. The Lattice Boltzmann Method - Principles and Practice. Graduate Texts in Physics. Springer International Publishing Switzerland, 2017. 20
- [13] Succi, S. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford: Oxford University Press, 2001. 20
- [14] Succi, S. The lattice Boltzmann equation: for complex states of flowing matter. First edition ed^{ón}. Oxford: Oxford University Press, 2018. OCLC: 1022116988. 20