

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)

19 de Agosto 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
Bibliografía	19

Índice de figuras

Índice de tablas

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

Capítulo 1

Introducción

Prueba de citas: [1]

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 $\mathbf{x}i = \mathbf{u} + \mathbf{v}$, 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 [2] o en series de Hermite [3]. 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:

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

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

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

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

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: [3, 4]

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

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

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

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 [5], 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 [6]. 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 :

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

Ahora se tiene un conjunto de q funciones $f_i(\mathbf{x}, t)$, relacionadas con las velocidades discretas \mathbf{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:

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

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

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 $\{\mathbf{e}_i\}$ 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 [7], donde d corresponde al número de dimensiones espaciales y q a la cantidad de velocidades discretas. Estos conjuntos quedan determinados por las velocidades $\{\mathbf{e}_i\}$, 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 [8, 9], 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 [10], 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 [11]. 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 [11, 12]. 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 [12]. Además, suelen originarse inestabilidades numéricas en el uso de VOF o level set para simular flujos dominados por tensión superficial en geometrías complejas [11].

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 [12, 13], pseudopotential [14, 15, 16], free-energy [17, 18] y phase-field [19, 20].

Color-gradient

El método color-gradient fue introducido por Gunstensen et al. [13], como una versión mejorada del modelo LGA multifásico de Rothman y Keller [21]. 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 [8].

Free-energy

El método free-energy fue propuesto originalmente por Swift et al. [17], 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.

Bibliografía

- [1] 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. 1
- [2] 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
- [3] 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
- [4] Grad, H. On the kinetic theory of rarefied gases. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **2** (4), 331–407, 1949. 9
- [5] Wiener, N. The Fourier integral and certain of its applications. Cambridge University Press, 1989. 9
- [6] 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
- [7] Qian, Y. H., d’Humières, D., Lallemand, P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *EPL (Europhysics Letters)*, **17** (6), 479, 1992. 12
- [8] Guo, Z., Shu, C. Lattice Boltzmann method and its applications in engineering. Advances in computational fluid dynamics. New Jersey: World Scientific, 2013. 13, 18
- [9] 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

- [10] He, X., Shan, X., Doolen, G. D. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases. *Physical Review E*, **57** (1), R13, 1998. 15
- [11] 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
- [12] 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
- [13] Gunstensen, A. K., Rothman, D. H., Zaleski, S., Zanetti, G. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids. *Physical Review A*, **43** (8), 4320, 1991. 18
- [14] Shan, X., Chen, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, **47** (3), 1815–1819, 1993. 18
- [15] 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
- [16] 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
- [17] 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
- [18] 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
- [19] 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] 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
- [21] Rothman, D. H., Keller, J. M. Immiscible cellular-automaton fluids. *Journal of Statistical Physics*, **52** (3-4), 1119–1127, 1988. 18