

Métodos Lattice Boltzmann

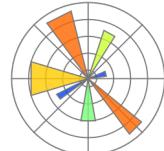
Métodos Numéricos

Johan S. Méndez

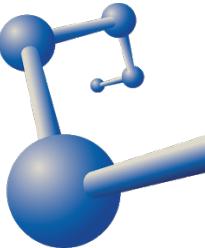
Universidad Nacional Autónoma de México

Instituto de Ciencias Nucleares

Agosto 2020



Instituto de
Ciencias
Nucleares
UNAM





Contenido

1. Fundamento Físico

1.1 Teorema de Liouville

1.2 Distribución de Boltzmann

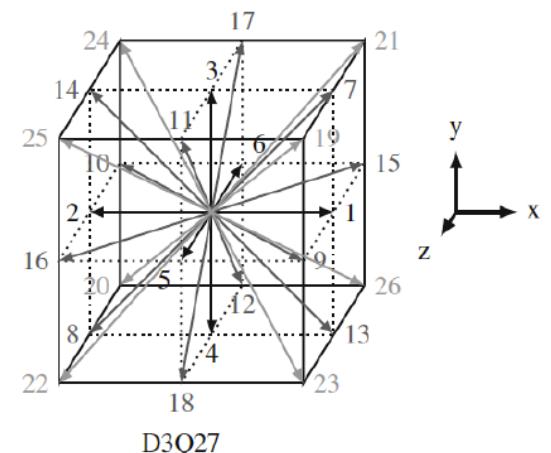
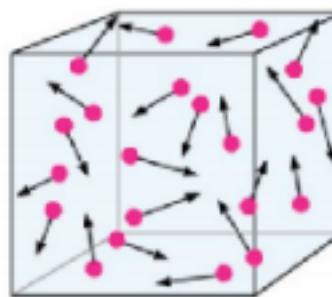


2. Implementación Numérica

2.1 Discretización

2.2 Algoritmo

2.3 Cantidades Macroscópicas



3. Problemas particulares

3.1 Flujo de Poiseuille

3.2 Vórtices de Von Kármán

$$\phi_v = \frac{\pi r^4 \Delta P}{8\eta L}$$

Fundamento Físico

Teorema de Liouville

Consideremos un gran número de partículas N

Probabilidad de hallar el sistema alrededor del estado (q, p) en el tiempo t

La densidad de partículas en el espacio de Fase es constante

$$\rho(q_i, p_i)$$

$$\frac{d\rho}{dt} = 0$$

¿Cómo cambia la densidad de estados en el tiempo?

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

Continuidad en el espacio de fase

$$\vec{v} = (q_i, p_i)$$

Estado en el espacio de fase



Teorema de Liouville

¿Cómo cambia la densidad de estados en el tiempo?

$$\frac{d\rho}{dt} = 0$$

La densidad de partículas en el espacio de Fase es constante



$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} + \frac{\partial(\rho \dot{p}_i)}{\partial q_i} \right) = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{p}_i \right)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad \dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad \xrightarrow{\hspace{1cm}} \quad \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} = \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_i} = -\frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i}$$

Dinámica de Hamilton

Teorema de Liouville

¿Cómo cambia la densidad de estados en el tiempo?

$$\frac{d\rho}{dt} = 0$$

La densidad de partículas en el espacio de Fase es constante



El cambio en el tiempo de la función de distribución

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right)$$

Se considera un función de distribución particular para poder estudiar el grupo de **N** partículas

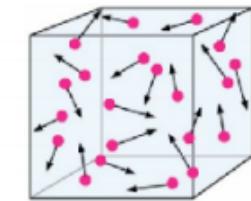
Distribución de Boltzmann

¿Cómo se sabe la probabilidad de encontrar una partícula en determinado estado?



Suposiciones

1. El número de partículas con velocidad \vec{v} es proporcional al volumen en estudio
2. Los eventos son independientes en los grados de libertad
3. **Hipótesis de Isotropía :** No se distingue en los grados de libertad



Distribución de Boltzmann

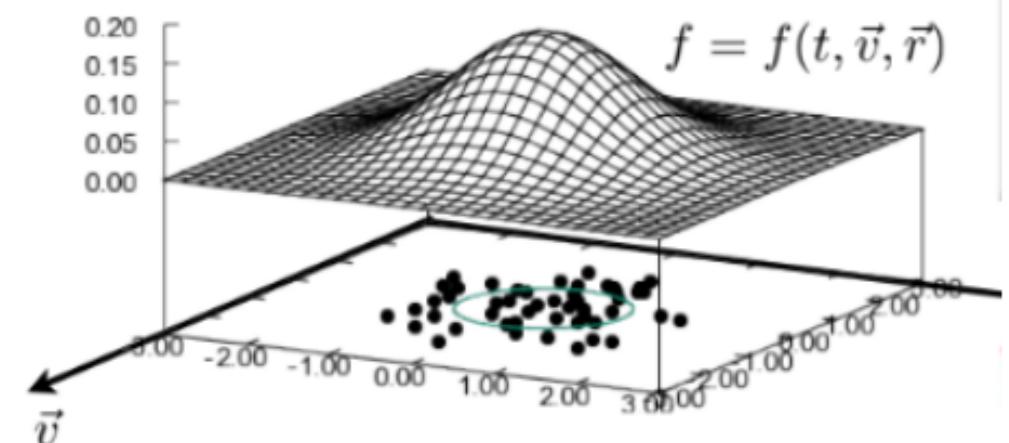
A partir de estas suposiciones se llega a la famosa función de distribución de Boltzmann

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \rho(\vec{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-mv^2/2kT}$$



Distribución en el equilibrio

Dada una función de distribución podemos ver su evolución en el tiempo



Distribución de Boltzmann

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \rho(\vec{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-mv^2/2kT}$$



Para introducirnos en el método, consideramos una f arbitraria
 $f = f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ Que evoluciona en el tiempo como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_\beta \frac{\partial f}{\partial x_\beta} + \frac{F_\beta}{\rho} \frac{\partial f}{\partial v} = \Omega(f)$$

Implementación Numérica

Implementación Numérica

Discretizando la ecuación de Boltzmann en el espacio de velocidades , en el espacio físico y el tiempo se encuentra la ecuación **Lattice Boltzmann**

$$f_i(\vec{r} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{r}, t) + \Omega_i(\vec{r}, t)$$

- las poblaciones $f_i(\vec{r}, t)$ se mueven con velocidad \vec{c}_i a un punto vecino $\vec{r} + \vec{c}_i \Delta t$
- Al mismo tiempo un operador de colisión Ω_i afecta la dinámica redistribuye las partículas en cada sitio
- Existen muchos operadores de colisión, se considera el más simple para simulaciones de Navier-Stokes

Implementación Numérica

$$f_i(\vec{r} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{r}, t) + \Omega_i(\vec{r}, t)$$

Operador de Colisión Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)

$$\Omega_i(f) = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau}$$

este operador relaja las poblaciones hacia el equilibrio f_i^{eq} a una tasa determinada por el tiempo de relajación τ

Este método describe el comportamiento físico a una escala mesoscópica en términos de una función de distribución $f_i(\vec{r}, t)$

$$\Omega_i = \Omega_i^{\text{BGK}} + \Delta\Omega_i = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} + \Delta\Omega_i$$

Este es el operador que se utiliza en esta implementación

Implementación Numérica

$$\Omega_i = \Omega_i^{\text{BGK}} + \Delta\Omega_i = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} + \Delta\Omega_i$$

Donde $\Delta\Omega_i$ define términos de fuente o sumidero de masa y forzamientos

¿Cúal es la forma discreta de la función de equilibrio?

la función de equilibrio continua está dada por

$$f^{eq}(\rho, \vec{u}, T, \vec{\xi}) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} e^{-(\xi-u)^2/2T} \quad \rightarrow \quad \rho(\vec{r}, t) = \int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^e \vec{\xi}$$

Cuyos momentos macroscópicos son



$$\rho(\vec{r}, t)E(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} \int |\vec{\xi}|^2 f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^e \vec{\xi} \quad \rho(\vec{r}, t)\vec{u}(\vec{r}, t) = \int \vec{\xi} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^e \vec{\xi}$$

Implementación Numérica

¿Cuál es la forma discreta de la función de equilibrio?

$$f^{eq}(\rho, \vec{u}, T, \vec{\xi}) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} e^{-(\xi - u)^2 / 2T}$$

Se expande la función de equilibrio en la base de los polinomios de Hermite

$$f^{eq} \approx \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a^{n, eq} H^{(n)} \vec{\xi}$$

Polinomios de Hermite



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

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

Implementación Numérica

¿Cuál es la forma discreta de la función de equilibrio?

$$f^{eq}(\rho, \vec{u}, T, \vec{\xi}) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} e^{-(\xi - u)^2 / 2T} \quad f^{eq} \approx \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a^{n, eq} H^{(n)} \vec{\xi}$$

Para reproducir la física se necesita considerar nada mas hasta segundo orden

los coeficientes están dados por $a^{(n), eq} = \frac{\rho}{T^{d/2}} \int \omega \left(\frac{\vec{\xi} - \vec{u}}{\sqrt{T}} \right) H^{(n)}(\vec{\xi}) d^d \vec{x} i$

los tres primero son

Densidad

$$a^{0, eq} = \rho$$

Momento

$$a_{\alpha}^{1, eq} = \rho u_{\alpha}$$

Energía

$$a_{\alpha}^{2, eq} = \rho(u_{\alpha} u_{\beta} + (T - 1)\delta_{\alpha\beta})$$

Implementación Numérica

¿Cuál es la forma discreta de la función de equilibrio?

$$f^{eq}(\rho, \vec{u}, T, \vec{\xi}) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} e^{-(\xi - u)^2 / 2T} \quad f^{eq} \approx \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a^{n, eq} H^{(n)} \vec{\xi}$$

Obteniendo la función de equilibrio discreta

$$f_\alpha^{eq}(\rho, \vec{u}) = w_i \rho \left(1 + \frac{c_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \frac{Q_{\alpha i j} u_i u_j}{2c_s^4} \right) \quad Q_{\alpha i j} = c_{\alpha i} c_{\alpha j} - c_s^2 \delta_{i,j}$$

\vec{c}_α representa un conjunto de velocidades discreto donde α representa todas las direcciones

Implementación Numérica

Ingredientes

Evolución de las distribuciones

$$f_\alpha(\vec{r} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta) = f_\alpha(\vec{r}, t) - \frac{1}{\tau} (f_\alpha(\vec{r}, t) - f_\alpha^{eq}(\vec{r}, t)) + \boxed{\Delta\Omega_\alpha}$$

función de distribución discreta

$$f_\alpha^{eq}(\rho, \vec{u}) = w_i \rho \left(1 + \frac{c_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \frac{Q_{\alpha i j} u_i u_j}{2 c_s^4} \right) \quad Q_{\alpha i j} = c_{\alpha i} c_{\alpha l} \delta_{l,j} - c_s^2 \delta_{i,j}$$

Termino de forzamiento

Termino de fuente/sumidero

$$\Delta\Omega_\alpha^F = w_\alpha \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{c_{\alpha i} F_i}{c_s^2} + \frac{Q_{\alpha i j} u_i F_j}{2 c_s^4} \right) \quad \Delta\Omega_\alpha^q = w_\alpha \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{c_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \frac{Q_{\alpha i j} u_i u_j}{2 c_s^4} \right) q$$

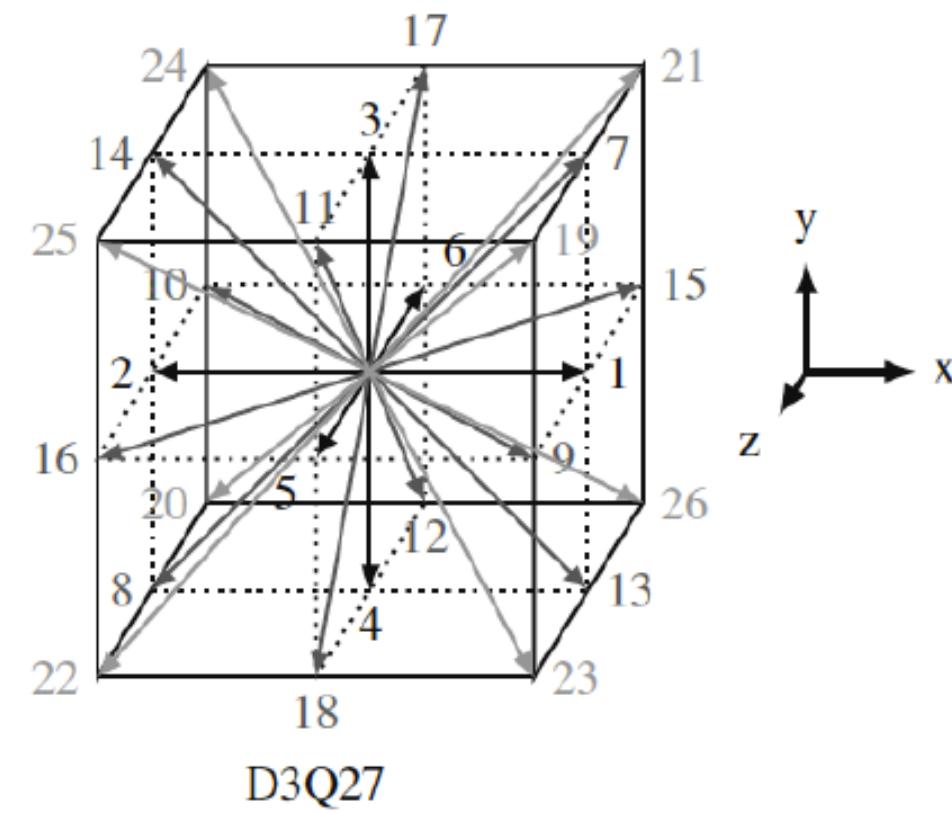
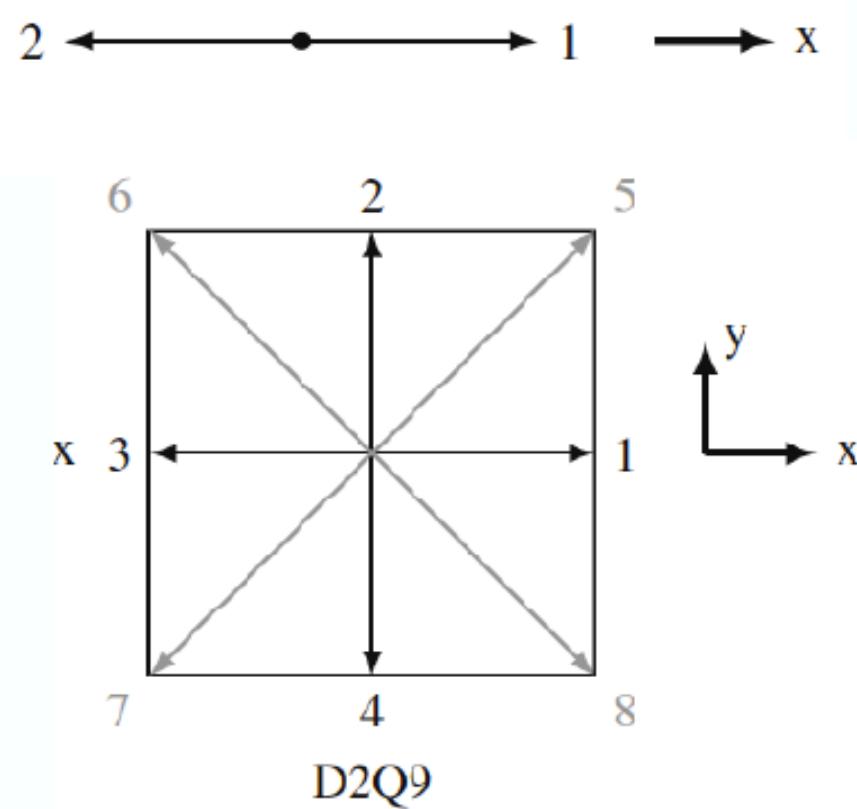
Implementación Numérica

DXQY

Algoritmo

Se considera alguna malla computacional

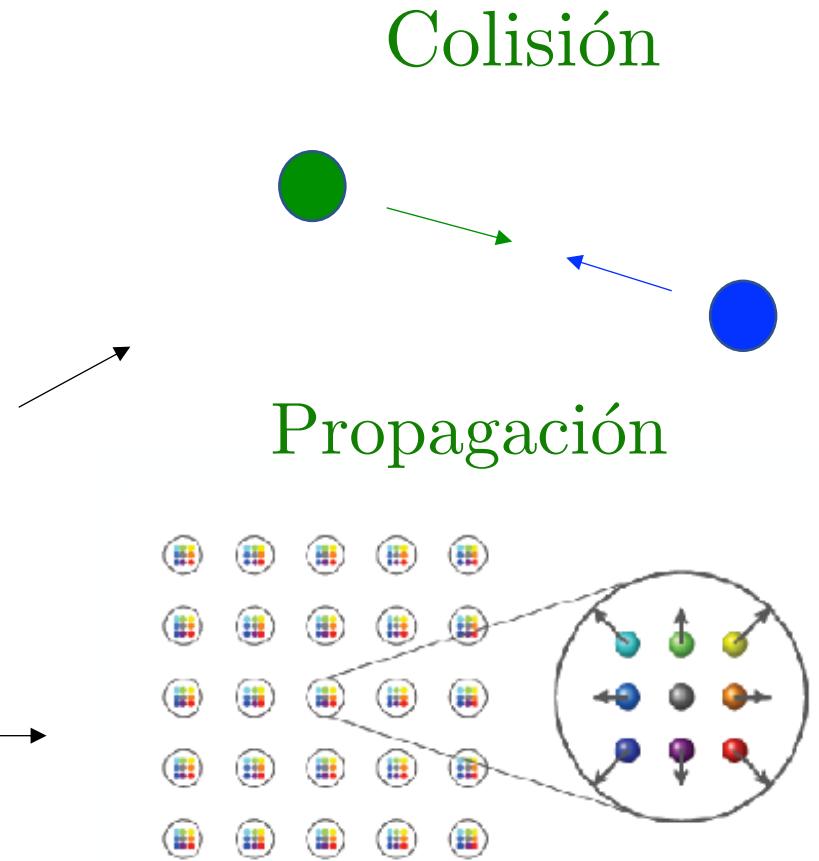
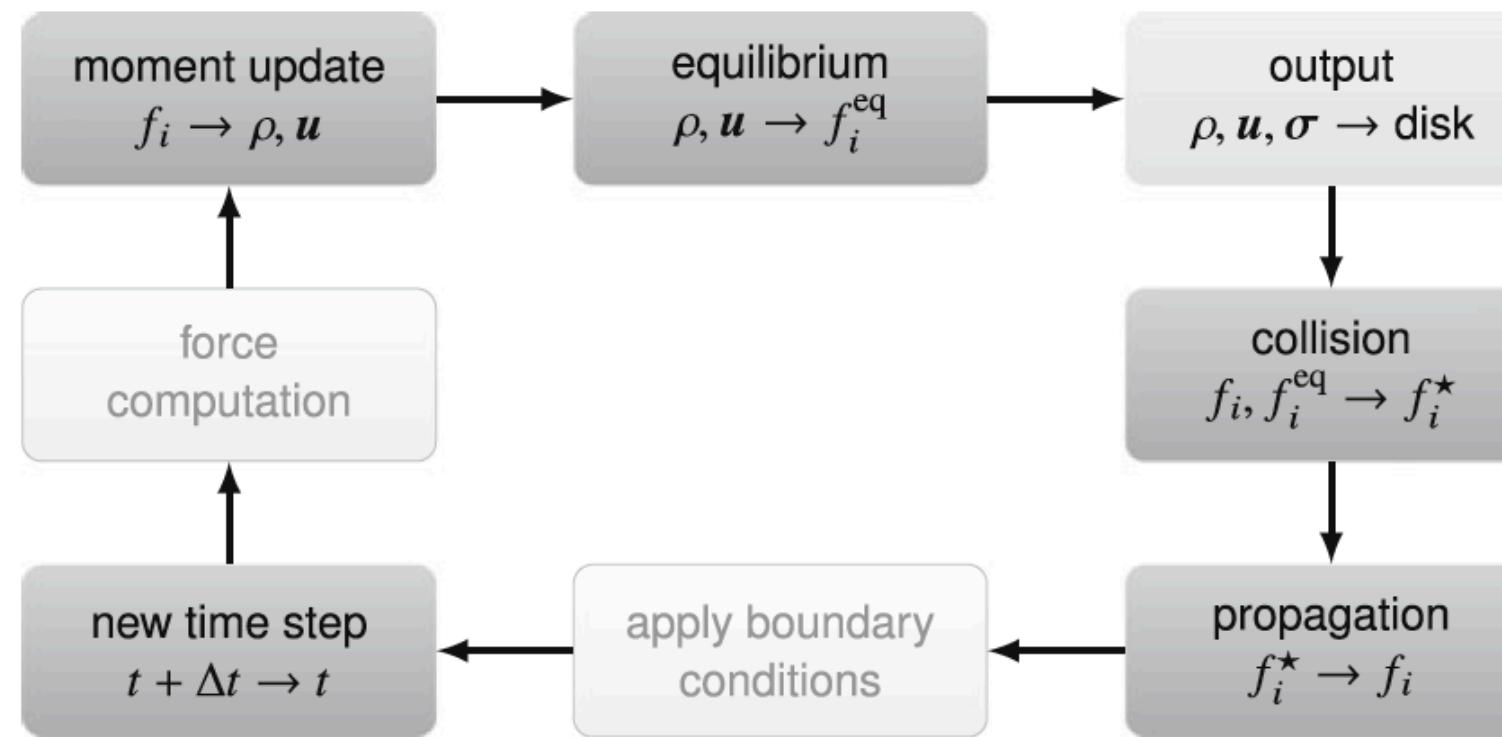
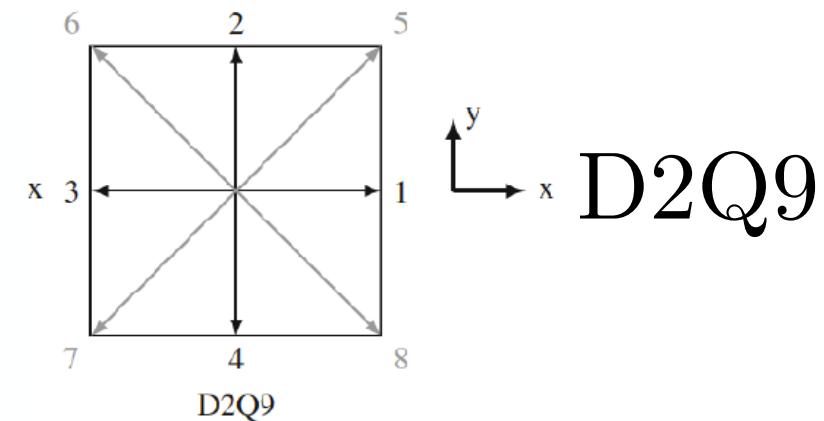
Dimensión del sistema
velocidades discretas



Implementación Numérica

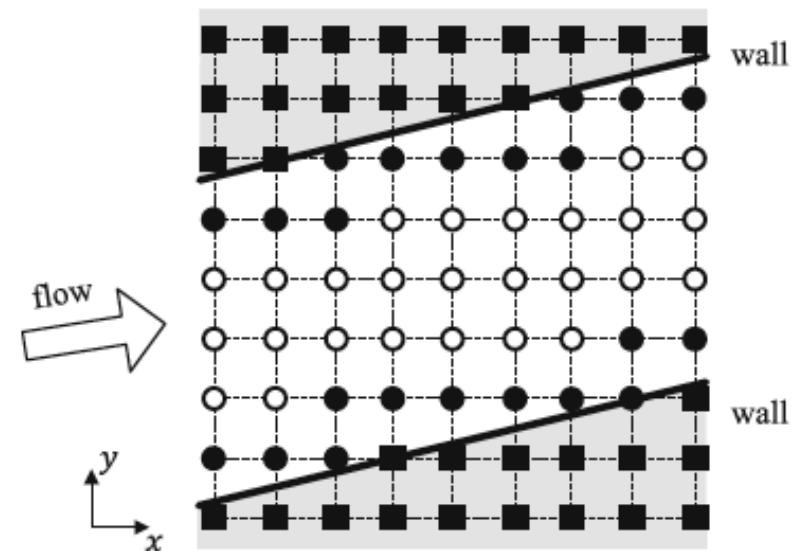
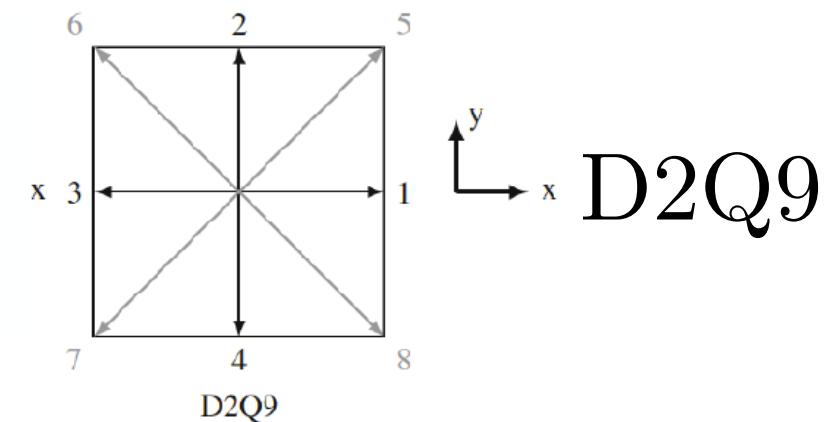
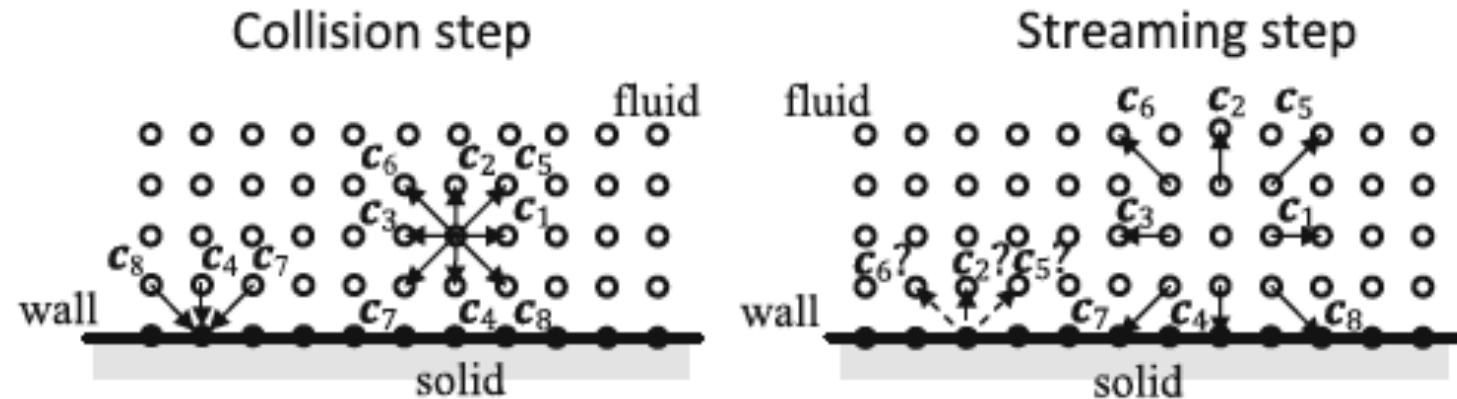
Algoritmo

Se considera alguna malla computacional



Implementación Numérica

Condiciones de frontera



- Bounce-Back (Rebote)
- Periódicas
- Libres

Resultados particulares

Flujo de Poisseuille

Flujo laminar unidireccional

Considerando $(u, \vec{0}, 0)$, se debe cumplir la ecuación de continuidad $\nabla \cdot \vec{u} = 0$. Entonces el perfil de velocidad debe tener la forma siguiente

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \longrightarrow u = u(y, z)$$

Ahora se consideran las ecuaciones de Navier-Stokes

$$\rho(\partial_t u_i + u_j \partial_j u_i) = -\partial_i p + F_i \partial_i \tau_{ij} \quad \partial_t \rho + \partial_i(\rho u_i) = 0$$

Dada la condición impuesta por la dirección de la velocidad se tiene

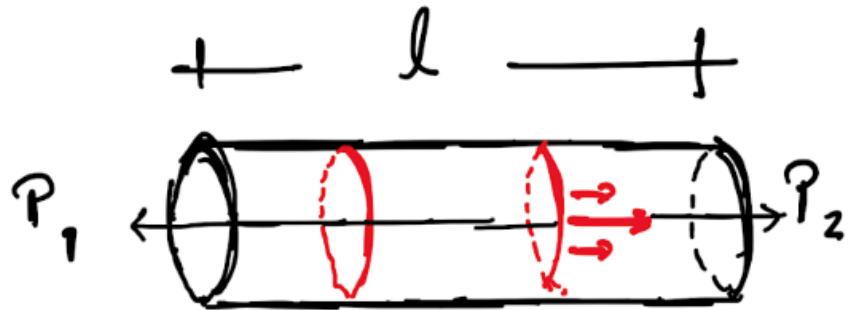
Solo la presión puede cambiar la dirección del flujo

$$-\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0 \quad \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad -\frac{\partial p}{\partial z} = 0}_{\text{Presión constante en estas direcciones}} \quad p = p(x) \neq p(y, z)$$

Flujo de Poisseuille

Flujo laminar unidireccional

$$-\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0 \quad -\frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad -\frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad \longrightarrow$$



La expresión para la comparación será

$$u = -\frac{1}{2\eta} (y - y_{bot})(y - y_{top})$$

Diferencia de presión

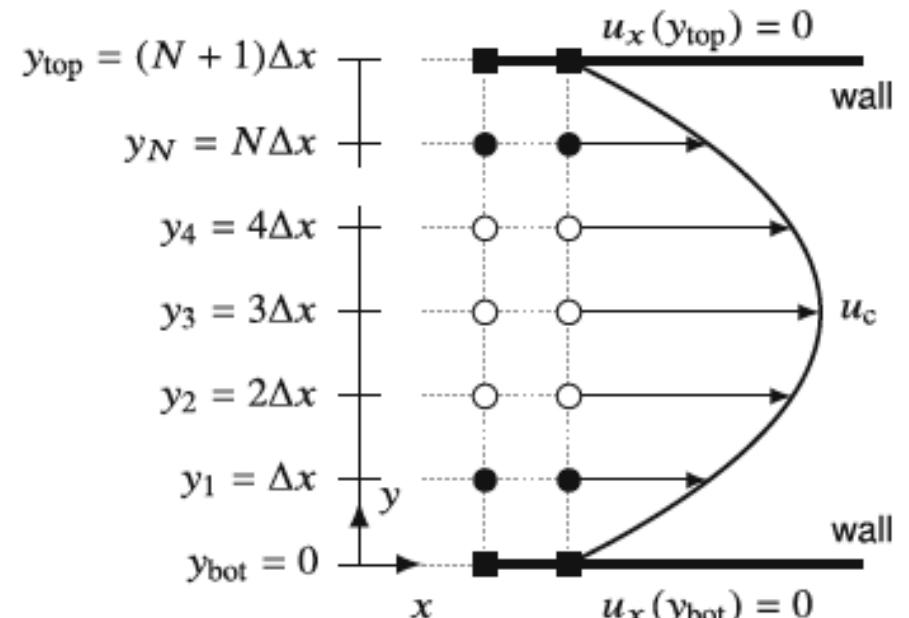
$$p_1 = p_2 + \Delta p$$

$$\Delta p = \frac{x_{out} - x_{in}}{(y_{top} - y_{bot})^2} 8\eta u_c$$

Solo la presión puede cambiar la dirección del flujo
 $p = p(x) \neq p(y, z)$

$$u = \frac{p}{\rho\nu} (h^2 - y^2)$$

h es el ancho del canal



Discretización del problema

Flujo de Poisseuille

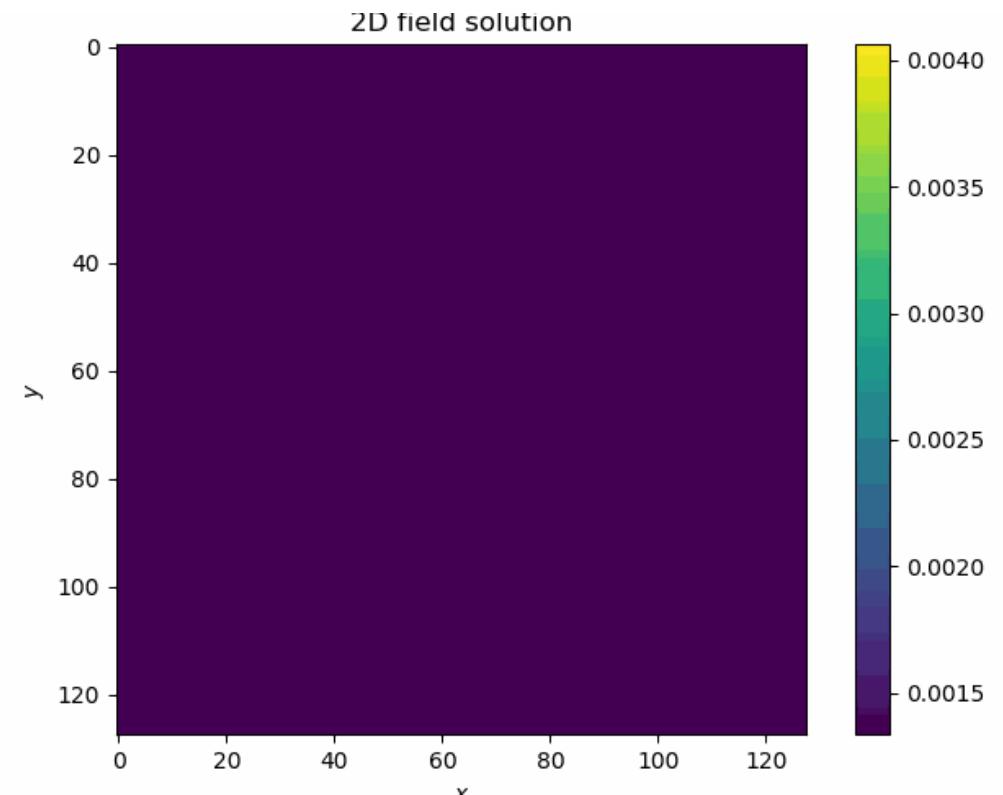
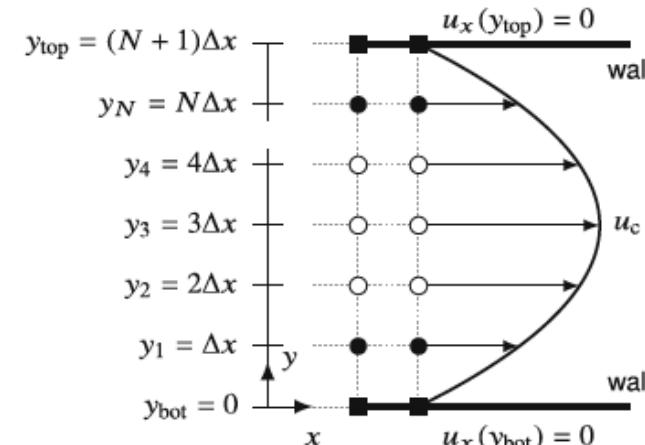
Flujo laminar unidireccional



$$u = -\frac{1}{2\eta}(y - y_{bot})(y - y_{top})$$

- Fluido incompresible
- Gas isotermo
- Regimen estacionario

Discretización del problema



Flujo de Poisseuille

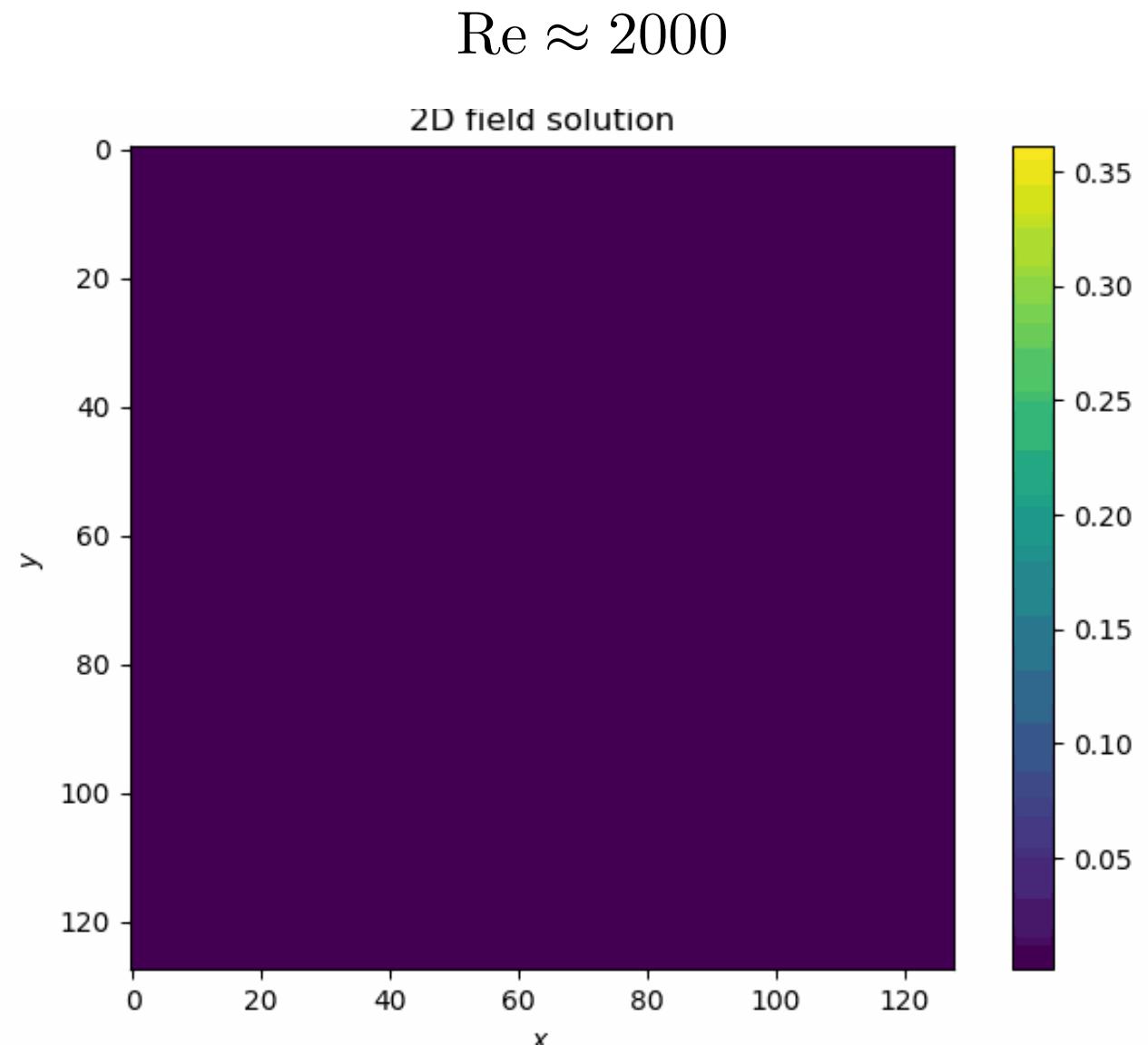
Flujo laminar unidireccional

Discretización del problema



Problemas

- Revisar condiciones de frontera
- Adimensionalización de las variables
- Optimización, este código tarda $t \sim 1\text{h}$



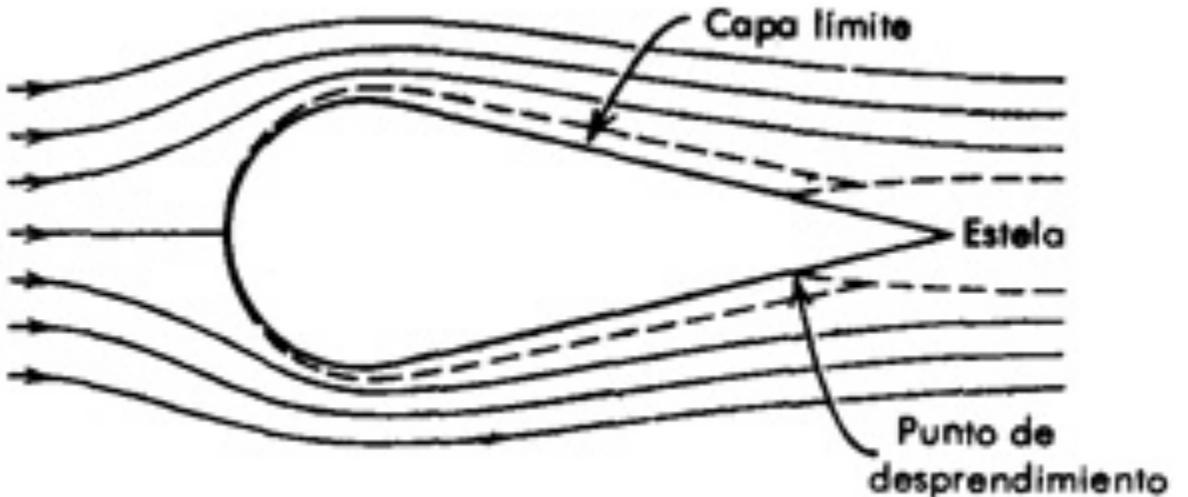
Vórtices de Von Kármán

$$Re = \frac{vL}{\nu}$$

Numero de Reynolds grande
Viscocidad pequeña

Problema de la capa límite

La disminución de la velocidad en la frontera del obstáculo crea inestabilidad en el fluido haciendo que se creen vórtices en proporción al número de Reynolds

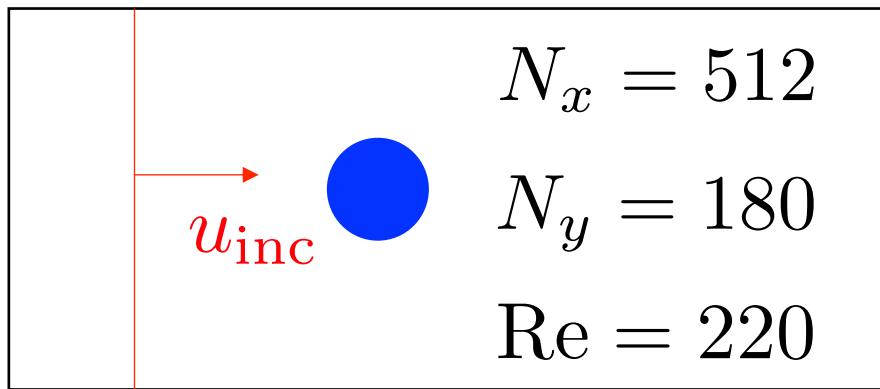


Vórtices de Von Kármán

$$\text{Re} = \frac{vL}{\nu}$$

Sistema

Condiciones de rebote (Bounce Back)



Entrada de velocidad



Condicion de frontera
libre

Condiciones de rebote (Bounce Back)

$$u_{\text{inc}} = u_o \left(1 + \sin \left(\frac{2\pi y}{L_y} \right) \right)$$

$$\text{Objeto} : \left(\frac{N_x}{4}, \frac{N_y}{2} \right)$$

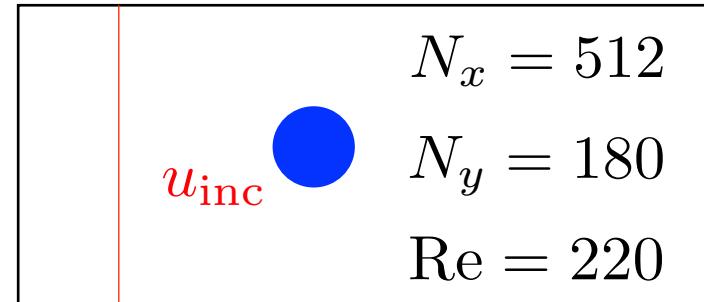
Vórtices de Von Kármán Sistema

Entrada de velocidad

$$u_{\text{inc}} = u_o \left(1 + \sin \left(\frac{2\pi y}{L_y} \right) \right)$$

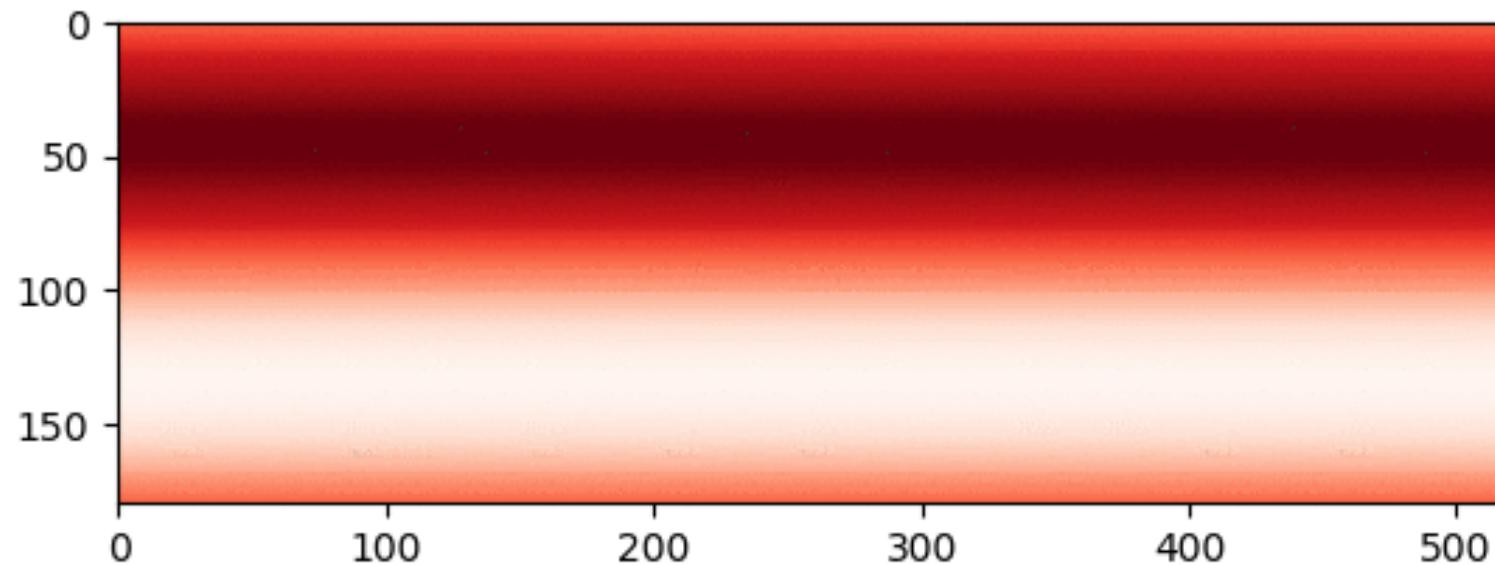
Objeto : $(\frac{N_x}{4}, \frac{N_y}{2})$

Condiciones de rebote (Bounce Back)



$t \sim 1.5$ horas

Alta inestabilidad
en las condiciones iniciales



Calle de Vórtices de Von Karman

Conclusiones

- Es un método mesoscópico, no resuelve todas las ecuaciones diferenciales de la física del sistema en cada nodo, solamente resuelve una única ecuación diferencial de la función de distribución de equilibrio
- Solamente cambiando los forzamientos, fuentes y la función de distribución en el equilibrio se cambia la física de la simulación, no es necesario reformular completamente la simulación
- Altamente paralelizable, dado que se resuelve la ecuación de Boltzmann en cada nodo y se comunica la información a sus vecinos
- Las condiciones de frontera es el problema con este método, dado que no son tan fácil implementación y aún es un tema de investigación
- Como futuras aplicaciones se encuentra la mecánica cuántica, la relatividad general y la electrodinámica siempre y cuando las teorías se puedan escribir en forma de ecuación de conservación

References

- [1] E. M. Viggen (auth.). The lattice Boltzmann method: Fundamentals and acoustics . Doctoral theses at NTNU. Norwegian University od Science and Technology, 1 edition, 2014
- [2] Gilberto Medeiros Kremer (auth.). An Introduction to the Boltzmann Equation and Transport Processes in Gases . Interaction of Mechanics and Mathematics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2010
- [3] L. Lifshitz, E.M; Landau. Curso de física teórica. Vol. 6, Mecánica de fluidos , volume 6. Reverté, 1991
- [4] Alexandre Kuzmin Orest Shardt Goncalo Silva Erlend Magnus Viggen (auth.) Timm Krüger, Halim Kusumaatmaja. The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice . Graduate Texts in Physics. Springer International Publishing, 1 edi- tion, 2017