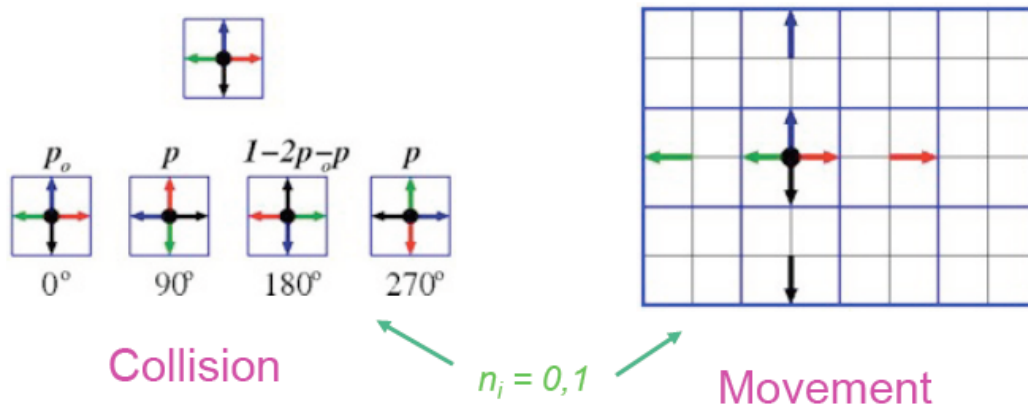


## MÉTODOS DE SIMULACIÓN – FÍSICA Taller 2, Ejercicio 3

### AUTÓMATA CELULAR DE DIFUSIÓN 2D

Considere un gas de red bidimensional de retícula cuadrada, donde cada celda tiene cuatro vectores velocidad que transportan a las primeras celdas vecinas, como se muestra en la figura.



En cada celda, cada vector velocidad puede tener o no una partícula. La regla de evolución consiste en que, con cada paso de tiempo, cada celda genera un número aleatorio entre 0 y 1, y de manera independiente decide si quedarse quieta con probabilidad  $p_0$ , girar a la derecha  $90^\circ$  con probabilidad  $p$ , girar a la izquierda  $90^\circ$  con probabilidad  $p$  o girar  $180^\circ$  con probabilidad  $1 - 2p - p_0$ . Luego, cada celda transporta sus contenidos a las celdas vecinas. En el límite continuo de celdas infinitamente pequeñas y pasos de tiempo infinitamente seguidos, este autómata cumple la ecuación de difusión

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho, \quad \text{con constante de difusión } D = \frac{p + p_0}{2[1 - (p + p_0)]} \frac{\text{celdas}^2}{\text{click}}.$$

- a) Construya un programa que implemente este autómata sobre un espacio de simulación de  $256 \times 256$  celdas con condiciones de frontera periódicas. Escoja  $p = p_0 = 0.25$ . Como condición inicial, coloque en el centro una distribución bigaussiana de 2400 partículas y ancho  $\sigma_0 = 16$  y deje evolucionar a lo largo de 350 pasos de tiempo. Grafique la varianza  $\sigma^2$  vs  $t$  para  $0 < t < 350$  y compruebe que la varianza crece linealmente con el tiempo con pendiente  $2D$ , con  $D$  la constante de difusión. Explore para otros valores de  $p$  y  $p_0$  si la pendiente medida coincide con el valor predicho por la expresión para  $D$  dada arriba.

Si uno no está interesado en simular el movimiento de partículas individuales, sino solamente calcular la densidad, se puede construir un modelo alternativo en el que, en vez de mover partículas individuales, se mueven las *probabilidades* de tener partículas en cada dirección. Sean  $f_n, f_s, f_e$  y  $f_w$  las probabilidades de tener partículas moviéndose en dirección norte, sur, este y oeste, respectivamente, asociadas con los mismos vectores velocidad del autómata discreto anterior. Si siguiéramos las mismas reglas de rotación aleatoria de dicho autómata, las probabilidades nuevas de tener partículas moviéndose en cada dirección luego de la colisión serían:

$$f_{n \text{ new}} = p_0 f_n + p f_e + p f_w + (1 - 2p - p_0) f_s$$

$$f_{s \text{ new}} = p_0 f_s + p f_e + p f_w + (1 - 2p - p_0) f_n$$

$$f_{e \text{ new}} = p_0 f_e + p f_n + p f_s + (1 - 2p - p_0) f_w$$

$$f_{w \text{ new}} = p_0 f_w + p f_n + p f_s + (1 - 2p - p_0) f_e$$

Este autómata no requiere generar números aleatorios.

- b) Construya un programa que implemente este autómata sobre un espacio de simulación de  $256 \times 256$  celdas con condiciones de frontera periódicas. Escoja  $p = p_0 = 0.25$ . Como condición inicial, coloque en el centro una distribución bigaussiana de ancho  $\sigma_0 = 16$  y deje evolucionar a lo largo de 350 pasos de tiempo. Grafique tanto la distribución inicial como la distribución final. Grafique la varianza  $\sigma^2$  vs  $t$  para  $0 < t < 350$  y compruebe que la varianza crece linealmente con el tiempo con pendiente  $2D$ , con  $D$  la constante de difusión.

### Para la entrega

El envío (.pdf de la presentación y programas .cpp) debe contener:

- El programa .cpp que implementa la simulación del punto a).
- Las gráficas de  $\sigma^2$  vs  $t$  para diferentes valores de  $p$  y  $p_0$ .
- Una tabla que compare los valores teóricos y medidos de la constante de difusión.
- El programa .cpp que implementa la simulación del punto b).
- Las gráficas inicial y final del punto b)
- La gráfica de  $\sigma^2$  vs  $t$  del punto b).

## MÉTODOS DE SIMULACIÓN – FÍSICA Taller 2, Ejercicio 2

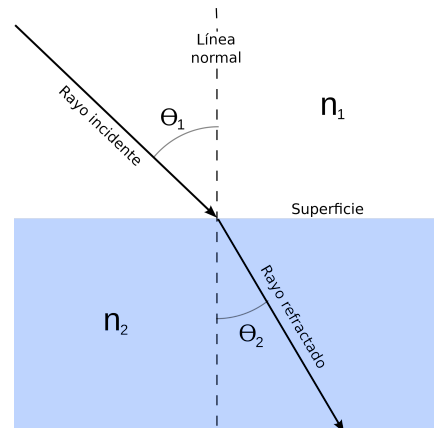
### LATTICE BOLZMANN 2D PARA ONDAS

#### Parte 1: Ley de Snell

Cuando una onda plana pasa de un medio a otro, las inclinaciones de las líneas perpendiculares a los frentes de onda (es decir, los rayos) cumplen la ley de Snell<sup>1</sup>,

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 ,$$

donde el índice de refracción  $n_i = \frac{c}{c_i}$  es la razón entre la velocidad de propagación  $c$  en el vacío y  $c_i$  en el medio. El objetivo del problema es constatar la ley de Snell con simulaciones de lattice-Boltzmann. Para ello, realice los siguientes pasos:



1. Tome como base el programa Ondas.cpp realizado en clase que implementa las oscilaciones de una fuente puntual en el centro utilizando D2Q5 (Si no lo tiene disponible, use D2Q9) con velocidad de propagación  $C=0.5$  celdas/click y longitud de onda  $\lambda=10$  celdas, e imprima los resultados en un archivo "Ondas.dat". Abra gnuplot e ingrese las siguientes instrucciones para generar una gráfica de líneas de contorno:

```
set pm3d map
set size ratio 1
splot "Ondas.dat"
```

y se puede imprimir con los comandos

```
set terminal jpeg enhanced
set output "Ondas.jpg"
splot "Ondas.dat"
```

2. Modifique el programa para reemplazar la fuente puntual en el centro por una fuente plana a lo largo de todos los puntos con  $i_x=0$ , coloque  $L_x=400$ ,  $L_y=200$ , imprima sólo los rangos  $i_x \in [0,200]$  e  $i_y \in [0,200]$  y grafique las ondas resultantes luego de 400 pasos de tiempo.
3. Modifique su programa para que la velocidad de las ondas en cada celda no se calcule como la constante global  $C$  sino como una función de  $i_x$  e  $i_y$ ,  $C_{\text{celda}}(i_x, i_y)$ , que pertenezca a la clase LatticeBoltzmann y que, por ahora, devuelva el valor  $C=0.5$ .
4. Modifique la función del punto anterior para que el índice de refracción sea  $n_1 = 1$  para  $i_x < 100$  y sea  $n_2 = 2$  para  $i_x \geq 100$ , pero suavizado con una

---

<sup>1</sup> La ley fue establecida anteriormente por Ibn Sahl (940-1000) en Bagdad.

función  $\text{Tanh}(ix-ix_0)$  entre estos dos valores. Corra la simulación y grafique los frentes de onda luego de 400 pasos, y compruebe que efectivamente la longitud de onda en el material de la derecha es la mitad que en el material de la izquierda.

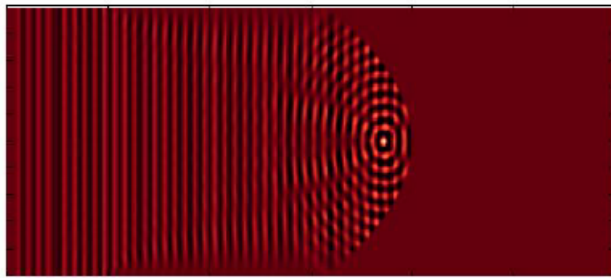
5. Modifique la función anterior corriendo el punto  $ix_0$  para que la frontera entre los dos medios sea una línea recta que forme un ángulo incidente  $\theta_i = 20^\circ$  con la vertical, grafique los frentes de onda luego de 400 pasos, mida la pendiente de los frentes de onda refractados y compruebe si se cumple efectivamente la ley de Snell para este caso.
6. Repita el punto anterior para ángulos incidentes  $\theta_i = 30^\circ, 45^\circ$  y  $60^\circ$ .

*De esta primera parte, incluya:*

- El programa .cpp más avanzado que llegue a construir.
- La gráfica .jpg de los puntos 2,4,5 y 6.
- Una tabla de tres columnas en que indique: el ángulo incidente  $\theta_i$ , el ángulo refractado medido y el ángulo refractado que se esperaba teóricamente de la Ley de Snell.

## Parte 2: Espejo Esférico (2.0/5.0)

Con lattice-Boltzmann también se pueden hacer espejos. Para ello, la regla de colisión en las celdas que pertenecen al espejo consiste simplemente en hacer que se intercambien los contenidos entre vectores velocidad



opuestos (en vez de seguir la regla de transporte de Boltzmann en la aproximación BGK). El objetivo del problema es implementar la reflexión de las ondas por un espejo esférico. Para ello:

1. Construya una geometría con  $L_x=600$ ,  $L_y=200$ , de tal manera que sean espejos todos los puntos entre  $ix=100$  e  $ix=200$  que estén a la derecha de un círculo centrado en  $ix=50$ ,  $iy=100$  y radio  $R=100$ .
2. Implemente la regla de colisión para espejos en para aquellas celdas que sean espejo.
3. Grafique los frentes de onda luego de  $t_{\max}=500$  pasos de tiempo e identifique el punto focal de las ondas reflejadas por el espejo. Compruebe si la distancia focal entre este punto y el vértice del espejo es igual a la mitad del radio.

*De esta segunda parte, incluya en su presentación:*

- El programa .cpp.
- La gráfica del punto 3.
- La distancia focal que mide y la que espera teóricamente.

## MÉTODOS DE SIMULACIÓN – FÍSICA Taller 2, Ejercicio 3

### FUERZA DE ARRASTRE

La fuerza de contacto por unidad de longitud ejercida por un medio sobre un elemento de superficie  $d\vec{A}$  en el punto  $P$  viene dado por

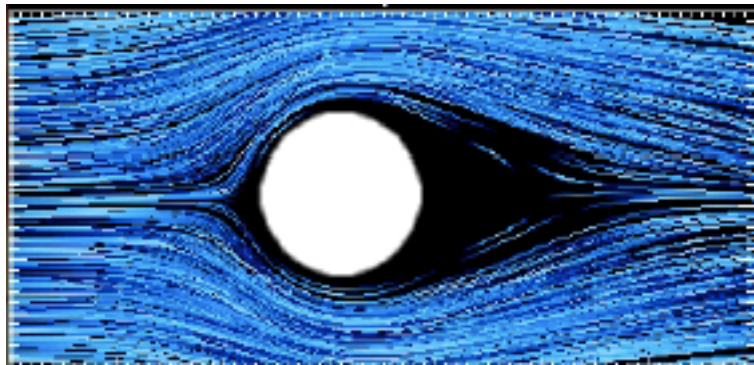
$$d\vec{F} = \sigma(P) \cdot d\vec{A} ,$$

donde  $\sigma(P)$  es el tensor de esfuerzos en el punto (P). Para el caso de un fluido newtoniano y aproximadamente incompresible, este tensor de esfuerzos tiene dos componentes: una parte hidrostática  $\sigma_{\alpha\beta}^{(h)} = -p\delta_{\alpha\beta}$  y una parte viscosa  $\sigma_{\alpha\beta}^{(v)} = \eta \left( \frac{\partial U_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial U_\beta}{\partial x_\alpha} \right)$ , con  $p$  la presión,  $U_\alpha$  la componente  $\alpha$ -ésima de la velocidad y  $\eta$  la viscosidad. Resumiendo, en dos dimensiones,

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = -p \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \eta \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial U_x}{\partial x} & \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \\ \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} & 2 \frac{\partial U_y}{\partial y} \end{pmatrix} .$$

Por lo tanto, para calcular la fuerza ejercida sobre un objeto inmerso en el fluido se requiere calcular derivadas parciales espaciales de la velocidad. De acuerdo con [1], estas derivadas espaciales se pueden calcular a segundo orden como

$$\frac{\partial U_\alpha}{\partial x_\beta} = \frac{3}{\Delta t} \sum_i w_i v_{i\beta} U_\alpha(\vec{x} + \vec{v}_i \Delta t) . \quad (1)$$



- Usando el programa para un túnel de viento bidimensional desarrollado en clase y construya la simulación del campo de velocidades de un fluido alrededor de un cilindro. Utilice  $Lx = 512$ ,  $Ly = 64$ ,  $ixc = 128$ ,  $icy = 32$ ,  $R = 8$ ,  $\tau = 1.5$ ,  $V_{\text{ventilador}} = 0.1$  y  $\rho_{\text{inicial}} = 1.0$ .
- Implemente funciones `sigmaxx`, `sigmayy` y `sigmaxy` en la clase `LatticeBoltzmann` que calculen las componentes del tensor de esfuerzos para cada celda (es decir, para el punto central de cada celda). Use  $p = \rho/3$ .

- c) Construya en la clase LatticeBoltzmann una función tal que, dado un punto  $P$  en el dominio de simulación y un vector de área  $d\vec{A}$  en ese punto, interpole las componentes del tensor de esfuerzos de las cuatro celdas aledañas al punto  $P$  de interés y calcule con los valores interpolados la fuerza por unidad de longitud  $d\vec{F}$  ejercida sobre el elemento representado por el vector de área  $d\vec{A}$ . Para la interpolación use la expresión bilineal [2]

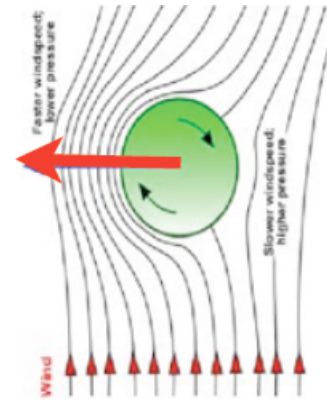
$$\begin{aligned}\phi(x, y) = & \phi_{ix, iy}(1-u)(1-v) + \phi_{ix+1, iy}u(1-v) \\ & + \phi_{ix, iy+1}(1-u)v + \phi_{ix+1, iy+1}uv \quad ,\end{aligned}$$

donde  $(x, y)$  son las coordenadas del punto  $P$ ,  $\phi_{a,b}$  es el valor del campo  $\phi$  (que puede ser  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  ó  $\sigma_{xy}$ ) en el centro de la celda de coordenadas  $(a, b)$ ,  $u = (x - ix)/\Delta x$  y  $v = (y - iy)/\Delta x$ , y  $\Delta x$  es el tamaño de la celda.

- d) Divida la circunferencia del cilindro en  $N=24$  ó más elementos planos, y para cada uno de ellos calcule el vector de área  $d\vec{A}$  que representa al elemento y su punto central. Utilizando la función del punto c) y sumando las fuerzas ejercidas sobre todos los elementos, construya una subrutina que calcule las componentes  $F_x, F_y$  de la fuerza total ejercida sobre el cilindro. Compruebe que  $F_y \approx 0$  (algo que se puede deducir por simetría). Por su parte,  $F_x = \frac{1}{2} C_A \rho A V_{\text{ventilador}}^2$  es la fuerza de arrastre, donde  $\rho$  es la densidad del fluido,  $A = 2R$  es la sección transversal del cilindro y  $C_A$  se conoce como el coeficiente de arrastre. Con la expresión anterior, calcule el coeficiente de arrastre para diferentes números de Reynolds.

### FUERZA DE MAGNUS

Cuando un cuerpo gira y se desplaza en medio de un fluido, la rotación del cuerpo arrastra consigo al fluido, ocasionando que la velocidad relativa del fluido respecto al cuerpo sea mayor a un lado que al otro. En consecuencia, y debido al principio de Bernoulli, la presión resulta ser más alta a un lado que al otro, lo que causa una fuerza lateral que desvía al objeto, y que se conoce como fuerza de Magnus.



- e) Ponga a rotar el cilindro del caso punto anterior a una velocidad angular de  $\omega = 2\pi/1000$  rad/click. Esto se logra simplemente modificando para imponer en cada celda del cilindro las velocidades  $U_{x0} = -\omega(iy - iyc)$  y  $U_{y0} = \omega(ix - ixc)$  correspondientes a esta velocidad de giro.
- f) Utilice la rutina del punto d) para comprobar que a diferentes velocidades de giro se cumple que la fuerza de Magnus viene dada por

$$F_M = \frac{1}{2} C_M \rho A R \vec{\omega} \times \vec{V}_{\text{ventilador}}$$

donde el Coeficiente de Magnus  $C_M \approx 1$ .

### Para la entrega

El envío (.pdf de la presentación y programas .cpp) debe contener:

- El programa .cpp que implementa los puntos a)-d).
- La gráfica del coeficiente de arrastre para diferentes números de Reynolds (punto d)).
- El programa .cpp que implementa los puntos e)-f).
- La gráfica del coeficiente de arrastre para diferentes números de Reynolds (punto f)).

## Bibliografía

- [1] Thampi, S. P., Ansumali, S., Adhikari, R., and Succi, S. “Isotropic discrete laplacian operators from lattice hydrodynamics”. *Journal of Computational Physics*, **234(1)**:1-7 (2013).
- [2] [https://es.wikipedia.org/wiki/Interpolaci%C3%B3n\\_bilineal](https://es.wikipedia.org/wiki/Interpolaci%C3%B3n_bilineal) .