



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN
NICOLÁS DE HIDALGO

INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE LATTICE
BOLTZMANN EN PROBLEMAS DE
MAGNETOHIDRODINÁMICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS EN EL ÁREA DE FÍSICA

P R E S E N T A :

SANTIAGO MEDRANO VILLA

TUTOR

DR. JOSÉ ANTONIO GONZÁLEZ CERVERA

MORELIA, MICHOACÁN, AGOSTO DE 2019



Resumen

En este trabajo se presenta una forma de extender método de Lattice Boltzmann a problemas en magnetohidrodinámica. Introduciendo una función de distribución vectorial para recuperar la ecuación de la inducción magnética. Se resuelven de manera numérica problemas de magnetohidrodinámica en dos y tres dimensiones incluyendo diferencias altas entre el número de Reynolds y el número de Reynolds magnético.

Palabras clave: Magnetohidrodinámica, Método de Lattice Boltzmann, Dinámica de Fluidos, Métodos Numéricos.

Abstract

In this work a way to extend the Lattice Boltzmann method to magnetohydrodynamics problems is presented. Introducing a vectorial distribution function to reproduce the magnetic induction equation. Some problems in magnetohydrodynamics are solved numerically in two and three dimensions also used the high differences between the Reynolds and magnetic Reynolds numbers.

Keywords: Magnetohydrodynamics, Lattice Boltzmann Method, Fluid Dynamics, Numerical Methods.

Índice general

Resumen	III
Abstract	v
1. Introducción	1
2. Hidrodinámica y Teoría Cinética	3
2.1. Navier-Stokes y teoría de continuidad	3
2.1.1. Ecuación de continuidad	3
2.1.2. Ecuaciones de Navier-Stokes	4
2.1.3. Ecuación de estado	6
2.2. Escalas	7
2.3. Teoría cinética	9
2.3.1. Función de distribución y sus momentos	9
2.3.2. Función de distribución en equilibrio	10
2.3.3. Ecuación de Boltzmann y el operador de colisión	10
2.3.4. Ecuaciones de conservación macroscópicas	11
2.3.5. Teorema \mathcal{H} de Boltzmann	13
3. Magnetohidrodinámica	15
3.1. Electrodinámica	15
3.1.1. El campo eléctrico y la fuerza de Lorentz	15
3.1.2. Ley de Ohm y fuerza volumétrica de Lorentz	16
3.1.3. Leyes de Ampère y Biot-Savart	17
3.1.4. Ley de Faraday	18
3.1.5. Ecuaciones de Maxwell	18
3.1.6. Forma reducida de las ecuaciones de Maxwell para magnetohidrodinámica	18
3.1.7. Ecuación de transporte del campo magnético	19
3.2. Ecuaciones de la Magnetohidrodinámica	19
3.2.1. Ecuaciones de MHD y su forma adimensional	20
4. Método de Lattice Boltzmann para Hidrodinámica y MHD	23
4.1. Lattice Boltzmann en hidrodinámica	23
4.1.1. Discretización de la ecuación de Boltzmann	23

4.1.2. Implementación	32
4.2. Extensión del método de Lattice Boltzmann a Magnetohidrodinámica	36
4.2.1. Fuerza de Lorentz y Tensor de Maxwell	37
4.2.2. Modelo de la Ecuación de Inducción Magnética	38
4.2.3. Implementación	40
5. Simulaciones Numéricas	43
5.1. Hidrodinámica	43
5.1.1. Flujos de Couette	43
5.1.2. Vórtices de Green-Taylor 2D y 3D	46
5.1.3. Flujo de Couette en Caja Cuadrada	47
5.1.4. Flujo de Poiseuille	50
5.2. Magnetohidrodinámica	51
5.2.1. Flujo de Hartmann en dos dimensiones	52
5.2.2. Vórtices de Orszag-Tang en dos dimensiones	53
5.2.3. Flujo de Hartmann en tres dimensiones	55
5.2.4. Flujo de Hartmann en tres dimensiones con número de Prandtl magnético bajo	57
6. Conclusiones	61
A. Polinomios de Hermite	63
A.1. Ortogonalidad y expansión en serie	63
B. Cuadratura de Gauss-Hermite	65
C. Condiciones de Frontera	67
D. Análisis de Chapman-Enskog	71
D.1. Análisis para la función de distribución f	71
D.2. Análisis para la función de distribución \mathbf{g}	73
Bibliografía	75

Capítulo 1

Introducción

El método de Lattice Boltzmann, surge como un método computacional para resolver problemas de la mecánica de fluidos, una manera de resolver numéricamente la ecuación de Boltzmann alternativa a las ecuaciones de Navier-Stokes. Donde ahora las variables hidrodinámicas se calculan a través de los momentos de la función de distribución [1]. Con este método se hacen estudios de diferentes tipos de problemas.

Sin embargo, existen una variedad de fluidos que al estar en presencia de campos magnéticos, su dinámica se ve afectada, dichos cambios en su comportamiento por los campos magnéticos son descritos por las ecuaciones de la magnetohidrodinámica. Trabajos previos implementan el método de Lattice Boltzmann, donde se recuperen todas las variables macroscópicas por los momentos de una función de distribución [2], [3]. Pero una forma más simple, la cuál se usa para este trabajo, es a través de una función de distribución vectorial propuesta por Dellar [4], tal que al calcular sus momentos se recuperen el campo magnético y las ecuaciones de Navier-Stokes. Algunos ejemplos de estos fluidos son el núcleo terrestre, el agua de mar o los metales líquidos, con múltiples aplicaciones.

El contenido del trabajo esta distribuido como sigue: en el capítulo 2 se presentan los conceptos fundamentales de la mecánica de fluidos y de la teoría cinética, necesarios para llegar a la ecuación de Lattice Boltzmann. En el capítulo 3 los conceptos fundamentales de la magnetohidrodinámica. En el capítulo 4 se presenta la teoría del método de Lattice Boltzmann, algunos modelos en dos y tres dimensiones, así como la extensión a magnetohidrodinámica y como implementarse. En el capítulo 5 se presentan los resultados de las pruebas numéricas que se elaboraron, tanto en problemas de hidrodinámica como de magnetohidrodinámica en dos y tres dimensiones, además la forma de incluir números de Prandtl bajos. Por último se presentan las conclusiones donde se describen las posibles aplicaciones y trabajo a futuro.

Capítulo 2

Hidrodinámica y Teoría Cinética

Uno de los elementos naturales más observado e importante para el desarrollo humano ha sido el agua, y este fluido en particular ha llevado a muchos filósofos y científicos a querer caracterizar su comportamiento, de manera que pudiera ser explotado para el desarrollo humano. Como primer contribución a la dinámica de fluidos aparece Bernoulli, quien publicó una ecuación de conservación de energía para fluidos ideales. Posteriormente aparecieron Leonhard Euler, Claude-Louis Navier y George Gabriel Stokes con sus ecuaciones de continuidad y de momento más realistas en la dinámica de fluidos.

En este capítulo se describen las ecuaciones que dictan la dinámica de un fluido, a través de la conservación de masa y momento. Se describe la teoría cinética, que es la base del método de Lattice Boltzmann y adicionalmente diferentes descripciones de las escalas de un fluido, como la descripción macroscópica, la mesoscópica y como están relacionadas [5].

2.1. Navier-Stokes y teoría de continuidad

Dando un pequeño repaso a la dinámica de fluidos aparecen la ecuación de continuidad, las ecuaciones de Navier-Stokes y la ecuación de estado, las cuales se detallan brevemente en las siguientes secciones [6].

2.1.1. Ecuación de continuidad

El campo de la dinámica de fluidos estudia los fenómenos de los fluidos a escalas macroscópicas, esto implica que se le considera como un continuo. Cuando se habla de un elemento de fluido, se toma un elemento de volumen lo suficientemente pequeño en comparación con el tamaño del sistema pero lo suficientemente grande en comparación con el tamaño de las moléculas individuales.

Considérese un elemento de volumen V_0 con densidad ρ , la masa de dicho elemento es simplemente $\int_{V_0} \rho dV$. Si se considera el cambio de la masa en el tiempo,

matemáticamente se escribe

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_0} \rho dV = - \oint_{\partial V_0} \rho \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} \quad (2.1)$$

donde la integral cerrada representa la superficie del elemento de volumen V_0 , \mathbf{u} la velocidad del fluido y $d\mathbf{A}$ el diferencial de área con vector normal a la superficie saliendo del elemento de volumen. Usando el teorema de la divergencia

$$\int_{V_0} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) dV \quad (2.2)$$

. de esto se deduce que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.3)$$

con V_0 estacionario y arbitrario. La ecuación (2.3) es la ecuación de continuidad en la dinámica de fluidos y es una ecuación diferencial parcial que denota la conservación de masa. El vector

$$\rho \mathbf{u} = \mathbf{j} \quad (2.4)$$

es llamado densidad de momento o flujo de densidad de masa.

Introduciendo la derivada material

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla, \quad (2.5)$$

la ecuación de continuidad (2.3) se escribe finalmente como

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.6)$$

2.1.2. Ecuaciones de Navier-Stokes

Siguiendo el análisis anterior se puede considerar el cambio del momento de un elemento de fluido con densidad ρ y velocidad \mathbf{u} , ocupando un volumen pequeño V_0 . Para un fluido ideal, el cambio del momento se puede deber a, (i) el flujo de momento que entra o sale del elemento del fluido, (ii) a las diferencias de presión p y (iii) a fuerzas externas \mathbf{F} . De manera que se escribe la siguiente ecuación de balance de momento

$$\frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho \mathbf{u} dV = - \oint_{\partial V_0} \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} - \oint_{\partial V_0} p d\mathbf{A} + \int_{V_0} \mathbf{F} dV \quad (2.7)$$

donde $\mathbf{u} \mathbf{u}$ denota el producto externo con componentes $u_i u_j$, con los índices latinos (i, j, k) serán para denotar las componentes vectoriales o tensoriales dado el caso. Aplicando el teorema de la divergencia, la ecuación queda escrita como

$$\int_{V_0} \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} dV = - \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) dV - \int_{V_0} \nabla p dV + \int_{V_0} \mathbf{F} dV. \quad (2.8)$$

De la ecuación (2.8) se obtiene la ecuación de Euler:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \mathbf{F}, \quad (2.9)$$

una ecuación diferencial parcial que describe la conservación de momento en un fluido ideal.

Escrito en una forma más general, llamada también la ecuación de momento de Cauchy

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \Pi = \mathbf{F} \quad (2.10)$$

con Π el tensor de flujo de densidad de momento

$$\Pi_{ij} = \rho u_i u_j - \sigma_{ij}. \quad (2.11)$$

El término σ_{ij} es llamado el tensor de esfuerzos y representa la transferencia de momento del fluido tal que no necesariamente contiene valores en la diagonal.

La transferencia del flujo de momento en la ecuación de Euler solo incluye la transferencia que es reversible, donde el flujo de masas o las diferencias de presión son cantidades conservadas. Para fluidos reales, es necesario incluir términos de viscosidad o fricción interna que cause disipación y transferencia irreversible de momento de un elemento de fluido a otro.

Para establecer la forma del este tensor de esfuerzos de viscosidad σ' , su contribución debe ser cero si el flujo es uniforme. Si el gradiente de velocidad es pequeño, la transferencia de momento debido a la viscosidad es puede representarse con términos proporcionales a las primeras derivadas de la velocidad. Un tensor que satisface esto es

$$\sigma'_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \zeta \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (2.12)$$

donde η y ζ son coeficientes de viscosidad, δ_{ij} una delta de Kronecker. Usualmente isotrópicos y uniformes. Usualmente este tensor se descompone en dos partes

$$\sigma'_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + \eta_B \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (2.13)$$

con η la viscosidad de corte y la combinación $\eta_B = 2\eta/3 + \zeta$ la viscosidad de bulo.

Con lo anterior el tensor de esfuerzos se escribe como $\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} - p\delta_{ij}$. Sustituyendo en la ecuación de momento se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\eta_B - \frac{2\eta}{3} \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + F_i. \quad (2.14)$$

Asumiendo que las viscosidades son constantes y considerando un fluido incompresible, ρ constante, la ecuación (2.3) se reduce a $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Y la ecuación (2.14) pasa a la ecuación de Navier-Stokes en su forma más común, la ecuación de Navier-Stokes incompresible

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (2.15)$$

donde, $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \partial^2 / \partial x_j \partial x_j$ es el operador de Laplace.

2.1.3. Ecuación de estado

Se tienen ya cuatro ecuaciones, la ecuación de continuidad que describe la conservación de la masa y la ecuación vectorial de la conservación de momento que describe la ecuación de Euler o Navier-Stokes.

Sin embargo, el sistema de ecuaciones aún no es cerrado ya que las incógnitas son la densidad, la presión y las tres componentes de la velocidad. Para ello se debe añadir una ecuación extra al sistema, por las propiedades termodinámicas pueden ser relacionadas las variables de estado del fluido, tales como la densidad, la presión, la temperatura, la energía interna y la entropía. Por las funciones de estado se puede relacionar cualquiera de una de las variables de estado con otras dos creando así una ecuación de estado.

Para un gas ideal una ecuación de estado muy conocida es

$$p = \rho RT \quad (2.16)$$

que relaciona la presión con la densidad y la temperatura T a través de la constante específica del gas R , con unidades $[R] = J/(kgK)^2$.

Otra ecuación de estado que describe a un gas ideal es aquella que relaciona presión, densidad y entropía

$$\frac{p}{p_0} = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma e^{(s-s_0)/c_v} \quad (2.17)$$

donde ya se hace uso de las capacidades caloríficas, a volumen y presión constantes, c_v y c_p respectivamente y γ el cociente de ellos y llamado índice adiabático $\gamma = c_p/c_v$. Con $c_v = (\partial e / \partial T)_V$ y $c_p = (\partial(e+p) / \rho \partial T)$.

Si se asume que la entropía es constante $s = s_0$, la ecuación de estado es

$$p = p_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma \quad (2.18)$$

y se obtiene un sistema de ecuaciones cerrado. Otra forma es tomar la ecuación de gas ideal (2.16) y mantener la temperatura constante $T \approx T_0$, así se obtiene la ecuación de estado isotérmica

$$p = \rho RT_0, \quad (2.19)$$

para relacionar linealmente la presión y la densidad. Para perturbaciones pequeñas de un estado de referencia, se pueden aproximar haciendo uso de la derivada total de forma que dichas desviaciones son respecto a p_0 , ρ_0 y s_0 . Así la ecuación (2.18) se simplifica a

$$p \approx p_0 + c_s^2 \delta \rho \quad (2.20)$$

con c_s la velocidad del sonido y descrito por $c_s^2 = (\partial p / \partial \rho)_s$.

Para la ecuación (2.18), $c_s = \sqrt{\gamma RT_0}$, y para la ecuación isotérmica (2.19), la velocidad del sonido es $c_s = \sqrt{RT_0}$

2.2. Escalas

Para analizar los problemas en la escala macroscópica, es necesario hacer un análisis de las escalas de longitud y de tiempo en los que se esté trabajando. Dado esto, comenzando de lo más pequeño a lo más grande se tiene (1) el tamaño de una molécula o partícula dado por l_a , (2) luego la distancia promedio entre colisiones de estas, descrito por la distancia de camino libre medio l_{mfp} , (3) la longitud típica de los gradientes en los sistemas, l y por último, (4) el tamaño del sistema l_s . El orden de tamaños se considera, $l_a \ll l_{mfp} \ll l \leq l_s$ como se muestra en la figura 2.1.

Por otro lado la escala temporal. A tiempos muy cortos se tiene el tiempo de colisión $t_c \sim l_a / v_T$, es decir, que la duración en un evento en una colisión entre partículas es el promedio de la velocidad térmica de las mismas, $v_T = (k_B T / m)^{1/2}$, k_B la constante de Boltzmann. Usualmente se asume que $t_c \rightarrow 0$, es decir, sucede instantáneamente. El tiempo de vuelo libre medio se define como $t_{mfp} = l_{mfp} / v_T$, que es la escala en la que opera la teoría cinética y donde el sistema se relaja a su equilibrio a través de las colisiones.

A escalas un poco más grandes, donde ya existe flujo hidrodinámico de un elemento de fluido a otro. Están las escalas de la dinámica advectiva y la difusiva, la escala de tiempo más corta es la advectiva $t_{conv} \sim l / u$ y posterior la difusiva $t_{diff} \sim l^2 / \nu$ con ν la viscosidad cinemática. El radio entre estas dos escalas es de relevancia ya que está relacionado con el número de Reynolds:

$$\text{Re} = \frac{t_{diff}}{t_{conv}} = \frac{ul}{\nu}. \quad (2.21)$$

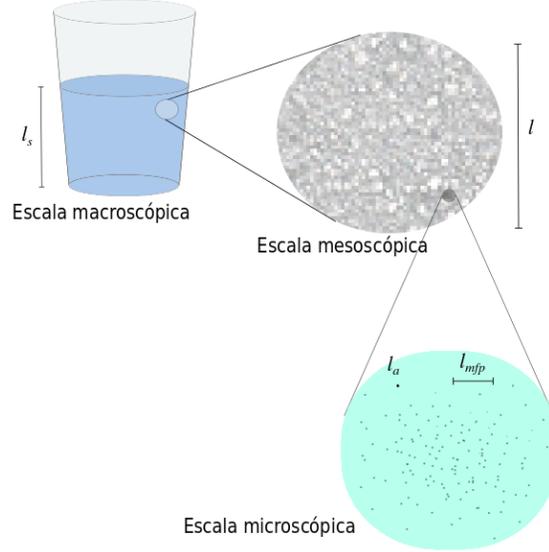


Figura 2.1: Representación de las diferentes escalas de longitud en un problema de dinámica de fluidos

Una escala macroscópica también importante es la escala de tiempo acústica, $t_{sound} \sim c_s$, donde c_s es la velocidad del sonido en el fluido. Y donde el número Mach se define como

$$\text{Ma} = \frac{t_{sound}}{t_{conv}} = \frac{u}{c_s}, \quad (2.22)$$

el ratio entre las escalas de tiempo advectiva y de sonido. Es importante porque para que un fluido pueda asumirse incompresible es necesario que el número de Mach sea del orden de $\text{Ma} \leq 0.1$.

El número de Knudsen se define el ratio entre el camino libre medio y la escala de longitud representativa

$$\text{Kn} = \frac{l_{mfp}}{l}. \quad (2.23)$$

Estos números son adimensionales y son de suma importancia, ya que de las ecuaciones adimensionales, si el número de Reynolds es el mismo, la física de ambos problemas es la misma y simplemente están escalados a diferentes escalas de longitud y velocidades. A esto se le conoce como ley de similitud.

Si se renormalizan las ecuaciones de Navier-Stokes con la escala de longitud l y la velocidad característica del fluido V , se tiene

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{V}, \quad p^* = \frac{p}{\rho V^2}, \quad \mathbf{F}^* = \frac{\mathbf{F}l}{\rho V^2}, \quad \frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{l}{V} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \nabla^* = l \nabla \quad (2.24)$$

y quedan en su forma adimensional

$$\rho \frac{d\mathbf{u}^*}{dt} = -\nabla^* p^* + \frac{1}{\text{Re}} \Delta^* \mathbf{u}^* + \mathbf{F}^* \quad (2.25)$$

donde puede apreciarse el número de Reynolds.

2.3. Teoría cinética

La teoría cinética estudia el comportamiento de sistemas que yacen entre la escala macroscópica y la microscópica, es decir, en una escala mesoscópica. Esto a través de una distribución de partículas, que se desenvuelve en escalas de tiempo alrededor del tiempo libre medio de colisión t_{mfp} .

Los problemas más simples son casos de gases muy diluidos, donde las partículas invierten muy poco de su tiempo colisionando, equivalente a asumir que las colisiones se dan una a una. Como cada átomo colisiona elásticamente se conserva su energía traslacional y todo lleva a realizar un estudio estadístico completamente clásico [7].

La longitud de onda de una molécula debe ser mucho más pequeña que el promedio en la separación entre moléculas

$$\lambda_D := \frac{\hbar}{\sqrt{2mKT}} \ll l_{mfp} \approx \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.26)$$

con λ_D la longitud de Debye, \hbar la constante de planck, m la masa de la molécula, V el volumen y N el número de moléculas. Bajo esta condición, cada molécula se representa como una partícula con posición y momento bien definidos y se consideran ahora indistinguibles, y una forma de simplificar el problema es ignorando la estructura atómica de las paredes en las que el gas este encerrado. No es de interés el estudio individual de cada una de las partículas sino de un conjunto de ellas a través de una función de distribución.

2.3.1. Función de distribución y sus momentos

La variable fundamental de la teoría cinética es la función de distribución de partículas $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, que representa simultáneamente la densidad de masa en el espacio físico tridimensional y el espacio de velocidades tridimensional, es decir, la densidad de partículas con velocidad $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ con posición \mathbf{x} al tiempo t .

La función de distribución está conectada con las variables macroscópicas a través de sus momentos. La densidad de masa es la integral en el espacio de velocidades de la función

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi, \quad (2.27)$$

la densidad de momento se calcula tomando en cuenta la contribución $\boldsymbol{\xi}f$

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3 \xi, \quad (2.28)$$

y similarmente la densidad de energía total, dada por

$$\rho(\mathbf{x}, t)E(\mathbf{x}, t) = \int |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3 \xi. \quad (2.29)$$

2.3.2. Función de distribución en equilibrio

A un tiempo suficientemente largo, se asume que su función de distribución de un gas, $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, alcanzará una distribución en equilibrio $f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ isotrópica en el espacio de velocidades alrededor de $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{u}$, que en un sistema de referencia moviéndose con velocidad \mathbf{u} , la función de distribución de equilibrio se escribe como $f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t)$:

$$f^{eq}(|\mathbf{v}|^2) = f^{eq}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = f_{1D}^{eq}(v_x^2) f_{1D}^{eq}(v_y^2) f_{1D}^{eq}(v_z^2). \quad (2.30)$$

La función de distribución en equilibrio en tres dimensiones es el producto de tres funciones de distribución en el equilibrio en una dimensión. Manteniendo la velocidad constante $|v|^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = cte$ implica $f^{eq}(|v|^2) = cte$. Tomando el logaritmo natural $\ln f^{eq}(v_x^2) + \ln f^{eq}(v_y^2) + \ln f^{eq}(v_z^2) = cte$. Esto se completa si en una dimensión el equilibrio tiene la forma $\ln f_{1D}^{eq}(v_x^2) = a + bv_x^2$, a y b constantes. Así

$$\ln f_{1D}^{eq}(v_x^2) + \ln f_{1D}^{eq}(v_y^2) + \ln f_{1D}^{eq}(v_z^2) = 3a + b(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = cte. \quad (2.31)$$

La forma final de la función de distribución en equilibrio en tres dimensiones es

$$f^{eq}(|v|) = e^{3a} e^{b|v|^2} \quad (2.32)$$

donde a y b se calculan de manera explícita, tal que los momento de la función de distribución en el equilibrio sean los mismos que para f . De esta manera se obtiene que

$$f^{eq}(\mathbf{x}, |v|, t) = \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-|v|^2/(2RT)} \quad (2.33)$$

llamada también la distribución de Maxwell-Boltzmann.

2.3.3. Ecuación de Boltzmann y el operador de colisión

Como f depende de \mathbf{x} , $\boldsymbol{\xi}$ y de t , al escribir su derivada total resulta

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) \frac{dt}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \frac{dx_j}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_j} \right) \frac{d\xi_j}{dt}, \quad (2.34)$$

analizando cada uno de los términos del lado derecho se tiene que, $dt/dt = 1$, $dx_j/dt = \xi_j$ la velocidad de la partícula y de la segunda ley de Newton $d\xi_j/dt = F_j/\rho$.

Reescribiendo con estos términos y con la notación $\Omega(f) = df/dt$, se obtiene la ecuación de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_j \frac{\partial f}{\partial x_j} + \frac{F_j}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_j} = \Omega(f). \quad (2.35)$$

El término $\Omega(f)$ es llamado el operador de colisión. Se sabe que las colisiones conservan masa, momento y energía traslacional. Esto implica que los momentos del operador de colisión son cero

$$\int \Omega(f) d^3 \xi = 0, \quad (2.36)$$

$$\int \Omega(f) d^3 \xi = \mathbf{0}, \quad (2.37)$$

$$\int |\xi|^2 \Omega(f) d^3 \xi = 0, \quad (2.38)$$

$$\int |v|^2 \Omega(f) d^3 \xi = 0 \quad (2.39)$$

que representan conservación de masa, momento, energía total e interna respectivamente.

El operador de colisión de la ecuación de Boltzmann tiene una forma complicada donde se consideran todas las posibles formas de colisión entre dos partículas, para alguna elección de fuerzas intermoleculares. Para Lattice Boltzmann este operador se basa generalmente en una forma simple, el operador de colisión BGK

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}). \quad (2.40)$$

Llamado así por sus inventores Bhatnagar, Gross y Krook. Donde la constante τ es conocida como el tiempo de relajación, que determina la velocidad con la que la función de distribución tiende al equilibrio.

2.3.4. Ecuaciones de conservación macroscópicas

Las ecuaciones macroscópicas de la mecánica de fluidos se obtienen directamente de los momentos de la ecuación de Boltzmann, introduciendo así una notación general de dichos momentos

$$\Pi_0 = \int f d^3 \xi = \rho, \quad (2.41)$$

$$\Pi_i = \int \xi_i f d^3 \xi = \rho u_i, \quad (2.42)$$

$$\Pi_{ij} = \int \xi_i \xi_j f d^3 \xi, \quad (2.43)$$

$$\Pi_{ijk} = \int \xi_i \xi_j \xi_k f d^3 \xi. \quad (2.44)$$

Los dos primeros representan los momentos para la masa y la densidad de momento. Otras cantidades que se obtienen al tratar los términos de fuerza, que se obtienen a través de integración por partes son

$$\int \frac{\partial f}{\partial \xi_j} d^3 \xi = 0, \quad (2.45)$$

$$\int \xi_i \frac{\partial f}{\partial \xi_j} d^3 \xi = -\rho \delta_{ij}, \quad (2.46)$$

$$\int \xi_i \xi_i \frac{\partial f}{\partial \xi_j} d^3 \xi = -2\rho u_j. \quad (2.47)$$

2.3.4.1. Ecuación de conservación de masa

La ecuación de continuidad describe la conservación de masa y se obtiene directamente al integrar la ecuación de boltzmann en el espacio de velocidades

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f d^3 \xi + \frac{\partial}{\partial x_j} \int \xi_j f d^3 \xi + \frac{F_j}{\rho} \int \frac{\partial f}{\partial \xi_j} d^3 \xi = \int \Omega(f) d^3 \xi. \quad (2.48)$$

Lo que se obtiene es, como se mencionó, la ecuación de continuidad que no depende de la forma particular de f

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0. \quad (2.49)$$

2.3.4.2. Ecuaciones de conservación de momento

De manera similar, multiplicando por ξ_i e integrando nuevamente en el espacio de velocidades, se obtienen las ecuaciones

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial x_j} = F_i \quad (2.50)$$

donde Π_{ij} se define como en tensor de flujo de momento,

$$\Pi_{ij} = \rho u_i u_j + \int v_i v_j f d^3 \xi. \quad (2.51)$$

Lo que se obtiene finalmente es la ecuación de momento de Cauchy

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} F_i, \quad (2.52)$$

que no estará cerrada hasta conocer el tensor de esfuerzos

$$\sigma_{ij} = - \int v_i v_j f d^3 \xi. \quad (2.53)$$

2.3.4.3. Ecuación de conservación de energía

Finalmente, se obtiene la ecuación para la energía a través de la traza de el segundo momento, es decir, multiplicando por $\xi_i \xi_i$ e integrando en el espacio de velocidades

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial x_j} = F_j u_j. \quad (2.54)$$

Simplificando como se hizo para la ecuación de momento se obtiene la ecuación de la energía total

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j E)}{\partial x_j} = \frac{\partial(u_i \sigma_{ij})}{\partial x_j} + F_j u_j - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (2.55)$$

con \mathbf{q} el flujo de calor dado por $q_j = (1/2) \int v_i v_i v_j f d^3 \xi$.

Se obtiene de aquí también la ecuación de la energía interna

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j e)}{\partial x_j} = \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}. \quad (2.56)$$

2.3.5. Teorema \mathcal{H} de Boltzmann

Existe una relación entre la entropía y la función de distribución f . Boltzmann mostró que la cantidad

$$\mathcal{H} = \int f \ln f d^3 \xi \quad (2.57)$$

solo puede decrecer y que alcanza el valor mínimo cuando la función de distribución f , alcanza el equilibrio.

Esto se puede mostrar de la ecuación de Boltzmann, multiplicandola por $(1 + \ln f)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f \ln f d^3 \xi + \frac{\partial}{\partial x_i} \int \xi_i f \ln f d^3 \xi = \int \ln f \Omega(f) d^3 \xi. \quad (2.58)$$

Donde ésta es una ecuación de balance para una cantidad a la que se le llamará \mathcal{H} y tiene la forma de una ecuación de momento, similar a las de masa, momento y energía. Así $\int \xi_i f \ln f d^3 \xi = \mathcal{H}$ es el flujo de la cantidad \mathcal{H} , separable en su forma advectiva y difusiva.

Sustituyendo el operador de colisión por el operador BGK se obtiene

$$\int \ln f \Omega(f) d^3 \xi = \frac{1}{\tau} \int f^{eq} \ln \left(\frac{f}{f^{eq}} \right) \left(1 - \frac{f}{f^{eq}} \right) d^3 \xi \leq 0, \quad (2.59)$$

para $f = f^{eq}$ la integral es idénticamente cero. Como consecuencia de la ecuación anterior

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} \leq 0. \quad (2.60)$$

Se observa que \mathcal{H} solo decrece hasta que la función de distribución alcanza el equilibrio. A simple vista es un análogo a la entropía en termodinámica hasta que alcanza el equilibrio y llega a su entropía máxima. Y de hecho, para gases ideales \mathcal{H} es proporcional a la densidad de entropía

$$\rho s = -R\mathcal{H}. \quad (2.61)$$

Capítulo 3

Magnetohidrodinámica

Cuando un material conductor transporta una corriente en el interior de una región con campo magnético, aparecen ciertas fuerzas magnéticas sobre las partículas que componen al conductor. Si ahora se considera a dicho conductor como un fluido, la dinámica se verá afectada por la existencia de campos magnéticos y corrientes inducidos. Dichos fenómenos se pueden estudiar a través de la magnetohidrodinámica, donde se combinan las disciplinas de la hidrodinámica y el electromagnetismo.

3.1. Electrodinámica

Bajo el interés de entender las propiedades eléctricas y magnéticas de un material, se escribe un breve repaso de electrodinámica [8]. Posteriormente su conexión con las ecuaciones de la hidrodinámica, para dar lugar a las ecuaciones de la magnetohidrodinámica [9]. Por simplicidad se asume que de las propiedades de los materiales, la conductividad eléctrica (σ) es espacialmente uniforme y que el medio es incompresible.

3.1.1. El campo eléctrico y la fuerza de Lorentz

La dinámica de una partícula con carga q y velocidad \mathbf{u} estará definida por la ecuación

$$\mathbf{f} = q\mathbf{E}_s + q\mathbf{E}_i + q\mathbf{u} \times \mathbf{B}, \quad (3.1)$$

donde el primer término de la ecuación es el de la fuerza electrostática o de Coulomb, el segundo término es el campo eléctrico inducido por las variaciones del campo magnético y el tercer término es el de la fuerza magnética, que surge por el movimiento de la carga a través del campo magnético presente.

De acuerdo con la ley de Coulomb, el campo electrostático (\mathbf{E}_s) es irrotacional y la ley de Gauss fija la divergencia de \mathbf{E}_s , tal que

$$\nabla \times \mathbf{E}_s = \mathbf{0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_s = \rho_e/\epsilon_0 \quad (3.2)$$

donde, ρ_e es la densidad total de carga y ϵ_0 la permitividad en el vacío.

El campo eléctrico inducido, por otro lado, tiene divergencia cero, mientras que su rotacional es finito y gobernado por la ley de Faraday

$$\nabla \times \mathbf{E}_i = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_i = 0. \quad (3.3)$$

Combinando ambos campos eléctricos $\mathbf{E} = \mathbf{E}_s + \mathbf{E}_i$, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho_e / \epsilon_0 \quad (\text{Ley de Gauss}), \quad (3.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{Ley de Faraday}), \quad (3.5)$$

$$\mathbf{f} = q(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) \quad (\text{Fuerza de Lorentz}). \quad (3.6)$$

3.1.2. Ley de Ohm y fuerza volumétrica de Lorentz

Para un conductor estacionario se tiene que la densidad de corriente, \mathbf{J} , es proporcional a la fuerza experimentada por las cargas libres. Se escribe de forma convencional como la ley de Ohm, $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$. Sin embargo, si el medio se mueve a cierta velocidad \mathbf{u} , la densidad de corriente \mathbf{J} se relaciona adicionalmente con el campo magnético \mathbf{B} , así la ecuación queda finalmente como

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}). \quad (3.7)$$

Sumando las ecuaciones de la fuerza de Lorentz (3.6) sobre una unidad de volumen del conductor, $\sum q$ es ahora la densidad de carga ρ_e y $\sum q\mathbf{u}$ la densidad de corriente, \mathbf{J} . De esta manera la versión volumétrica es

$$\mathbf{F} = \rho_e \mathbf{E} + \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (3.8)$$

donde \mathbf{F} es ahora la fuerza por unidad de volumen actuando sobre el conductor.

Tomado la divergencia de (3.7), usando la ley de Gauss y con (??) se obtiene

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \frac{\rho_e}{\tau_e} + \sigma \nabla \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = 0, \quad (3.9)$$

donde $\tau_e = \epsilon_0 / \sigma$ es el tiempo de relajación de la carga, para un metal conductor típico toma valores alrededor de 10^{-18} segundos. Considerando $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ se obtiene $\partial \rho_e / \partial t + \rho_e / \tau_e = 0$, y las soluciones están dadas por

$$\rho_e = \rho_e(0) e^{-t/\tau_e}. \quad (3.10)$$

Para problemas más adelante se consideran escalas de tiempo más largas, por lo que este término se desprecia y la ley de la fuerza queda simplificada a

$$\mathbf{F} = \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (3.11)$$

equivalente a decir que existe una conservación de carga, que la variación en densidad de carga es tan pequeña que

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (3.12)$$

3.1.3. Leyes de Ampère y Biot-Savart

La ley de Ampère-Maxwell describe como se generan campos magnéticos a partir de corrientes eléctricas de la siguiente manera

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu \left[\mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right], \quad (3.13)$$

el segundo término del lado derecho fue introducido por Maxwell como una corrección a la ley de Ampère y llamado desplazamiento de corriente. Tomando la divergencia de esta ecuación y usando ley de Gauss

$$0 = \nabla \cdot \nabla \times \mathbf{B} = \mu \left[\nabla \cdot \mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \nabla \cdot \mathbf{E}}{\partial t} \right] \quad (3.14)$$

así

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{\partial \rho_e}{\partial t}. \quad (3.15)$$

Esto es sólo la ecuación de la conservación de carga, la cuál, sin el término de desplazamiento de corriente, sería violada. Por otro lado, combinando ley de Gauss y conservación de carga se obtiene

$$\nabla \cdot \left[\mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right] = 0, \quad (3.16)$$

sin embargo, la corrección de Maxwell no es necesaria al momento de describir las ecuaciones de la magnetohidrodinámica. A partir de que el término $\partial \rho_e / \partial t$ es despreciable, por lo que se llega a que $\epsilon_0 \partial \mathbf{E} / \partial t$ será pequeño cuando se describa la magnetohidrodinámica. Esto es

$$\epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \ll \mathbf{J}. \quad (3.17)$$

Dadas las condiciones anteriores basta con la forma pre-Maxwell tomando únicamente la forma diferencial de la ley de Ampère

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu \mathbf{J}. \quad (3.18)$$

Esto es consistente con (3.13) donde la divergencia demanda $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$.

En general \mathbf{J} no es solenoidal, dado que la conservación requiere $\nabla \cdot \mathbf{J} = \partial \rho_e / \partial t$, pero la ley de Amperè no aplica a menos que $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$

3.1.4. Ley de Faraday

La ley de Faraday dice que

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (3.19)$$

el efecto de un campo magnético que varia en el tiempo induce un campo eléctrico. Como $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) = 0$, implica que $\partial \mathbf{B} / \partial t$ es solenoidal, de hecho indica que \mathbf{B} es solenoidal por si.

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (3.20)$$

Calculando el rotacional del campo magnético y tomando en cuenta que es solenoidal $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, y de que $\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B}$, tiene como consecuencia

$$\nabla^2 \mathbf{B} = -\mu \nabla \times \mathbf{J}. \quad (3.21)$$

3.1.5. Ecuaciones de Maxwell

Cuando se combinan la ley de la fuerza y la ley de la conservación de la carga, y todo lo que se sabe de electrodinámica clásica, discutiendo su significado daorigen a las ecuaciones de Maxwell en su forma reducida

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_e}{\epsilon_0}, \quad (\text{Ley de Gauss}) \quad (3.22)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (\text{Naturaleza de } \mathbf{B}) \quad (3.23)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (\text{Ley de Faraday}) \quad (3.24)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu \left(\mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right), \quad (\text{Ecuación de Ampere-Maxwell}) \quad (3.25)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial \rho_e}{\partial t}, \quad (\text{Conservación de Carga}) \quad (3.26)$$

$$\mathbf{f} = q(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}). \quad (\text{Fuerza de Lorentz}) \quad (3.27)$$

3.1.6. Forma reducida de las ecuaciones de Maxwell para magnetohidrodinámica

Se dedujo que la fuerza eléctrica, $q\mathbf{E}$, es muy pequeña comparada con la fuerza de Lorentz, por lo que $\mathbf{F} = \mathbf{J} \times \mathbf{B}$. Similarmente la contribución del cambio en la densidad de la carga eléctrica $\partial \rho_e / \partial t$, por ende $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$.

Entonces, para llegar a las ecuaciones de la magnetohidrodinámica ya se hab obtenido ya las ecuaciones:

- Ley de Ampère y la conservación de la carga

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu \mathbf{J}, \quad \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (3.28)$$

- Ley de Faraday y la contricción sobre la divergencia del campo magnético (La no existencia de los monopolos magnéticos)

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (3.29)$$

- Ley de Ohm y la fuerza de Lorentz por unidad de volumen

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad \mathbf{F} = \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (3.30)$$

Estas son las ecuaciones constituyen una base fundamental de las leyes de la electrodinámica y que darán forma a las ecuaciones de la MHD.

3.1.7. Ecuación de transporte del campo magnético

Combinando las leyes de Ohm y Ampère con la ecuación de Faraday se obtiene una expresión que relaciona \mathbf{u} con \mathbf{B}

$$-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} = -\nabla \times [(\mathbf{J}/\sigma) - \mathbf{u} \times \mathbf{B}] = \nabla \times [\mathbf{u} \times \mathbf{B} - \nabla \times \mathbf{B}/\mu\sigma] \quad (3.31)$$

Por la restricción de la divergencia del campo magnético, se tiene que $\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B}$, y de esta manera se obtiene la llamada ecuación de inducción magnética

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) + \eta_m \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (3.32)$$

con $\eta_m = (\mu\sigma)^{-1}$, llamada difusividad o resistividad magnética. En el caso de un conductor perfecto se tiene que $\eta_m = 0$ y por lo que la ecuación de inducción magnética queda reducida a

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}). \quad (3.33)$$

3.2. Ecuaciones de la Magnetohidrodinámica

A partir de las ecuaciones reducidas de Maxwell

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu \mathbf{J}, \quad \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (3.34)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3.35)$$

complementadas con la ley de Ohm y la fuerza de Lorentz

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad \mathbf{F} = \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (3.36)$$

y complementando con las ecuaciones de la hidrodinámica, se dará forma a las ecuaciones de magnetohidrodinámica.

3.2.1. Ecuaciones de MHD y su forma adimensional

Se obtuvo la ecuación de inducción magnética

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) + \eta_m \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (3.37)$$

o tomando en cuenta que \mathbf{u} y \mathbf{B} son solenoidales

$$\frac{D\mathbf{B}}{Dt} = (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \eta_m \nabla^2 \mathbf{B} \quad (3.38)$$

Por otro lado se tiene la ecuación de Navier-Stokes, que incorporándole como fuerza externa esté la fuerza de Lorentz en forma volumétrica, queda de la forma

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \rho \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (3.39)$$

de esta ecuación se puede calcular la vorticidad de \mathbf{u} , $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u}$

$$\frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt} = (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nu \nabla^2 \boldsymbol{\omega} + \rho^{-1} \nabla \times (\mathbf{J} \times \mathbf{B}). \quad (3.40)$$

Reorganizando las ecuaciones se obtiene finalmente el siguiente sistema de ecuaciones, escrito únicamente en términos de \mathbf{u} , \mathbf{B} y p :

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \rho \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) + \eta_m \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (3.42)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.43)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (3.44)$$

Con una la velocidad característica U , una longitud característica L y una magnitud del campo magnético característica B , además de el tiempo y la presión característicos con L/U y $\rho_0 U^2$ respectivamente. Haciendo uno de los siguientes números

$$Re = \frac{UL}{\nu}, \quad \text{Número de Reynolds} \quad (3.45)$$

$$Re_m = \frac{LU}{\eta_m}, \quad \text{Número de Reynolds magnético} \quad (3.46)$$

$$H = BL \left(\frac{\sigma}{\eta} \right), \quad \text{Número de Hartmann} \quad (3.47)$$

las ecuaciones de la magnetohidrodinámica escritas de forma adimensional son

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{\rho}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + N \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) + \frac{1}{Re_m} \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (3.49)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.50)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (3.51)$$

donde N es llamado el parámetro de interacción, $N = H^2/Re$.

Capítulo 4

Método de Lattice Boltzmann para Hidrodinámica y MHD

Existen una gran variedad de técnicas numéricas para resolver problemas de dinámica de fluidos, la mayoría basados en métodos de diferencias finitas y volúmenes finitos, donde las ecuaciones de conservación en el continuo son discretizadas y se resuelven computacionalmente. Estos métodos se pueden extender a flujos en MHD introduciendo algún procedimiento para resolver la ecuación de inducción e incluyendo el término de la fuerza de Lorentz. Este trabajo consiste en realizar esa extensión con el método de Lattice Boltzmann.

4.1. Lattice Boltzmann en hidrodinámica

En este capítulo se discretiza la ecuación de Boltzmann en dos pasos. Primero discretizando el espacio-tiempo por el método de características y posteriormente la discretización el espacio de velocidades limitandose a un conjunto finito de velocidades. El resultado de estos pasos es la ecuación de Lattice Boltzmann [5].

4.1.1. Discretización de la ecuación de Boltzmann

Tomando la ecuación de Boltzmann en el espacio de velocidades continuo

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{F_i}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = \Omega(f) = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \quad (4.1)$$

y la función de distribución en equilibrio

$$f^{eq}(\rho, \mathbf{x}, T, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{d/2}} e^{-(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 / (2RT)} \quad (4.2)$$

se escribirán de forma que sea más fácil manejarlas de forma numérica.

4.1.1.1. Adimensionalización

Los fenómenos físicos ocurren en diferentes escalas de tiempo y espacio, una forma de clasificar todos estos fenómenos es a través de sus escalas características. Se analizan las propiedades de algún fluido a través de su longitud característica l , velocidad V y densidad ρ_0 . El tiempo característico viene dado por $t_0 = l/V$.

Introduciendo las derivadas adimensionales

$$\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{l}{V} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \frac{\partial}{\partial x^*} = l \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial \xi^*} = V \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad (4.3)$$

se obtiene la ecuación de Boltzmann adimensional realizando las sustituciones apropiadas

$$\frac{\partial f^*}{\partial t^*} + \xi_i^* \frac{\partial f^*}{\partial x_i^*} + \frac{F_i^*}{\rho^*} \frac{\partial f^*}{\partial \xi_i^*} = \Omega^*(f^*) \quad (4.4)$$

donde $f^* = fV^d/\rho_0$, $\mathbf{F}^* = \mathbf{F}l/(\rho_0V^2)$, $\rho^* = \rho/\rho_0$ y $\Omega^* = \Omega lV^2/\rho_0$, mientras que la función de distribución en el equilibrio queda de la forma

$$f^{eq*} = \frac{\rho^*}{(2\pi\theta^*)^{d/2}} e^{-(\boldsymbol{\xi}^* - \mathbf{u}^*)^2/(2\theta^*)} \quad (4.5)$$

donde la temperatura en forma adimensional se escribe como $\theta^* = RT/V^2$.

Finalmente usando el caso libre de fuerzas, se reescribe la ecuación de Boltzmann y la función de distribución en equilibrio como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = \Omega(f), \quad (4.6)$$

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{d/2}} e^{-(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2/(2\theta)}. \quad (4.7)$$

4.1.1.2. Leyes de Conservación

Tomando la ecuación de Boltzmann en el espacio de velocidades continuo, se deben satisfacer las leyes de conservación tal que

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \boldsymbol{\xi}, \mathbf{u}, \theta) d^3\xi, \quad (4.8)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi = \int f^{eq}(\rho, \boldsymbol{\xi}, \mathbf{u}, \theta) \boldsymbol{\xi} d^3\xi, \quad (4.9)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)E(\mathbf{x}, t) = \int |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi. \quad (4.10)$$

De las ecuaciones de continuidad, se ha asumido que se ha aplicado Chapman-Enskog, es decir, que

$$\int h(\boldsymbol{\xi}) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \int h(\boldsymbol{\xi}) f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} \quad (4.11)$$

donde $h(\boldsymbol{\xi})$ es una combinación lineal de cantidades conservadas

$$h(\boldsymbol{\xi}) = A + \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\xi} + C\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}. \quad (4.12)$$

4.1.1.3. Discretización en el tiempo

La discretización del tiempo se hace a través del método de características, el cuál explota la existencia de trayectorias en el espacio de variables independientes de las ecuaciones diferenciales parciales que permitan simplificarlas a ecuaciones diferenciales ordinarias. Se puede reescribir la ecuación de Boltzmann como

$$\frac{df}{dt} + \frac{1}{\tau}f = \frac{1}{\tau}f^{eq} \quad (4.13)$$

donde

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla, \quad (4.14)$$

se ha asumido nuevamente que la función de distribución f es continua, sin embargo, se puede realizar con las funciones ya discretizadas en el espacio de velocidades.

Multiplicando por $e^{t/\tau}$ en ambos lados

$$e^{t/\tau} \frac{df}{dt} + \frac{1}{\tau} f e^{t/\tau} = \frac{1}{\tau} f^{eq} e^{t/\tau}, \quad (4.15)$$

reescribiendo todo el lado izquierdo de la ecuación como

$$\frac{d(f e^{t/\tau})}{dt} = e^{t/\tau} \frac{df}{dt} + \frac{1}{\tau} f e^{t/\tau}, \quad (4.16)$$

a se obtiene que

$$\frac{d(f e^{t/\tau})}{dt} = \frac{1}{\tau} f^{eq} e^{t/\tau}. \quad (4.17)$$

Integrando sobre un intervalo temporal Δt , se obtiene por un lado

$$\int_0^{\Delta t} d(f e^{t'/\tau}) = f e^{t'/\tau} \Big|_0^{\Delta t} = f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) e^{\Delta t/\tau} - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \quad (4.18)$$

y por otro lado se tiene

$$\int_0^{\Delta t} \frac{1}{\tau} f^{eq} e^{t'/\tau} dt' = \frac{1}{\tau} \int_0^{\Delta t} f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} t', \boldsymbol{\xi}, t + t') e^{t'/\tau} dt' \quad (4.19)$$

se escribe finalmente, combinando las ecuaciones (4.18), (4.19) y despejando $f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t)$:

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) = \frac{1}{\tau} e^{-\Delta t/\tau} \int_0^{\Delta t} f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}t', \boldsymbol{\xi}, t + t') e^{t'/\tau} dt' + e^{-\Delta t/\tau} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t). \quad (4.20)$$

Si se asume Δt muy pequeño y f^{eq} suave, se puede expandir a f^{eq} como

$$f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}t', \boldsymbol{\xi}, t + t') = \left(1 - \frac{t'}{\Delta t}\right) f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{t'}{\Delta t} f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (4.21)$$

Sustituyendo la ecuación (4.21) en la integral (4.20), y expandiendo en serie de Taylor $e^{-\Delta t/\tau} = 1 - (\Delta t/\tau) + \mathcal{O}(\Delta t^2)$ se obtiene finalmente que

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\frac{1}{\tau} (f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)). \quad (4.22)$$

4.1.1.4. Discretización en el espacio de velocidades

La discretización en el espacio de velocidades se puede derivar a partir de una expansión en el número de Mach o a partir de la expansión en serie de Hermite, ambas aproximaciones dan la misma forma del equilibrio para las ecuaciones de Navier-Stokes, a cierto orden.

La expansión sobre el número de Mach a la función de distribución en el equilibrio,

$$\begin{aligned} f^{eq}(\rho, \mathbf{x}, \theta, \boldsymbol{\xi}) &= \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{d/2}} e^{-(\boldsymbol{\xi}-\mathbf{u})^2/(2\theta)} \\ &= \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{d/2}} e^{-\xi^2/(2\theta)} e^{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u}/\theta) - u^2/2\theta} \\ &= \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{d/2}} e^{-\xi^2/(2\theta)} \left[1 + \frac{\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{u^2}{2\theta} \right] + \mathcal{O}(u^3) \end{aligned} \quad (4.23)$$

sin embargo, al tratar de obtener mejores resultados a órdenes mayores ya no es factible.

Por otro lado, si se parte de la expansión de los polinomios de Hermite, que se describen un poco más a detalle en el Apéndice A, la función de distribución en el equilibrio toma la forma

$$f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) = \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n),eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta) \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}), \quad (4.24)$$

$$\mathbf{a}^{(n),eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta) = \int f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d^d \boldsymbol{\xi} \quad (4.25)$$

donde $\omega(\boldsymbol{\xi})$ es de la forma

$$\omega(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{-\boldsymbol{\xi}^2/2} \quad (4.26)$$

y reescribiendo la función de distribución en equilibrio como

$$f^{eq} = \frac{\rho}{\theta^{d/2}} \omega\left(\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})}{\sqrt{\theta}}\right), \quad (4.27)$$

$$\mathbf{a}^{(n),eq} = \frac{\rho}{\theta^{d/2}} \int \omega\left(\frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}}{\sqrt{\theta}}\right) \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d^d \boldsymbol{\xi} \quad (4.28)$$

con un cambio de variable $\boldsymbol{\eta} = (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})/\sqrt{\theta}$, se obtiene

$$\mathbf{a}^{(n),eq} = \rho \int \omega(\boldsymbol{\eta}) \mathbf{H}^{(n)}(\sqrt{\theta}\boldsymbol{\eta} + \mathbf{u}) d^d \boldsymbol{\eta}. \quad (4.29)$$

Los primeros cuatro polinomios de Hermite son

$$H^{(0)} = 1, \quad (4.30)$$

$$H_i^{(1)} = \xi_i, \quad (4.31)$$

$$H_{ij}^{(2)} = \xi_i \xi_j - \delta_{ij}, \quad (4.32)$$

$$H_{ijk}^{(3)} = \xi_i \xi_j \xi_k - (\delta_{ij} \xi_k + \delta_{ik} \xi_j + \delta_{jk} \xi_i) \quad (4.33)$$

y dadas estas ecuaciones se calculan los coeficientes $a^{(n),eq}$ y se obtiene que

$$a^{(0),eq} = \rho, \quad (4.34)$$

$$a_i^{(1),eq} = \rho u_i, \quad (4.35)$$

$$a_{ij}^{(2),eq} = \rho(u_i u_j + (\theta - 1)\delta_{ij}), \quad (4.36)$$

$$a_{ijk}^{(3),eq} = \rho[u_i u_j u_k + (\theta - 1)(\delta_{ij} u_k + \delta_{jk} u_i + \delta_{ki} u_j)]. \quad (4.37)$$

Expandiendo la serie únicamente hasta orden dos, se obtiene

$$f^{eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta, \boldsymbol{\xi}) \approx \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^2 \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n),eq}(\rho, \mathbf{u}, \theta) \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \quad (4.38)$$

$$= \omega(\boldsymbol{\xi}) \rho \left[1 + \xi_i u_i + \frac{1}{2}(u_i u_j + (\theta - 1)\delta_{ij})(\xi_i \xi_j - \delta_{ij}) \right]. \quad (4.39)$$

Para finalmente discretizar el espacio de velocidades, se emplea la cuadratura de Gauss-Hermite, que permite aproximar integrales de la forma $\int \omega(\boldsymbol{\xi}) \Psi(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}$ a una sumatoria finita considerando las raíces de los polinomios de Hermite, ver Apéndice B,

$$\int \omega(\boldsymbol{\xi}) \Phi(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \approx \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha} \Phi(\boldsymbol{\xi}_{\alpha}). \quad (4.40)$$

La cuadratura de Gauss-Hermite garantiza que si $\Phi(\boldsymbol{\xi})$ es un polinomio de orden Q , la integral se puede calcular de forma exacta

$$\int \omega(\boldsymbol{\xi}) \Phi^{(Q)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha} \Phi^{(Q)}(\boldsymbol{\xi}_{\alpha}), \quad (4.41)$$

con número de absisas al menos de $N = (Q + 1)/2$ y $\omega_{\alpha} = n!/(nH^{(n-1)}(\xi_{\alpha}))^2$. Así se obtiene un set finito discreto en el espacio de velocidades y la función de distribución en el equilibrio es

$$f_{\alpha}^{eq} := f^{eq}(\xi_{\alpha}) = \omega_{\alpha} \rho \left[1 + \xi_{\alpha i} u_i + \frac{1}{2} (u_i u_j + (\theta - 1) \delta_{ij}) (\xi_{\alpha i} \xi_{\alpha j} - \delta_{ij}) \right]. \quad (4.42)$$

Si se asume que se está en el caso isotérmico, se considera que $\theta = 1$, por lo que se tendrá que la ecuación toma la forma

$$f_{\alpha}^{eq} = \omega_{\alpha} \rho \left[1 + \xi_{\alpha i} u_i + \frac{1}{2} (u_i u_j) (\xi_{\alpha i} \xi_{\alpha j} - \delta_{ij}) \right]. \quad (4.43)$$

Se puede escribir además que $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_{\alpha}, t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}, t)$.

Usando la discretización espacial y temporal con la el espacio de velocidades se obtiene la llamada ecuación de Boltzmann discretizada o ecuación de Lattice Boltzmann:

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} + \xi_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t) - f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} (f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\mathbf{x}, t)). \quad (4.44)$$

Donde se tomarán los pasos al resolver numéricamente como:

- Colisión:

$$\bar{f}_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - f_{\alpha}^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (4.45)$$

- Propagación

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} + \xi_{\alpha} \Delta t, t + \Delta t) = \bar{f}_{\alpha}(\mathbf{x}, t). \quad (4.46)$$

Los momentos macroscópicos se calculan ahora como

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha} = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{eq}, \quad (4.47)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} f_{\alpha} = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} f_{\alpha}^{eq}. \quad (4.48)$$

Dependiendo de las dimensiones y de las velocidades descritas se escriben los modelos DdQq, donde d significará la dimensión y q el número de velocidades en que se discretiza.

Modelo D2Q9

Se describe a continuación el proceso para calcular los pesos y valores de las diferentes velocidades discretizadas [1].

Calcular los momentos hidrodinámicos es equivalente a evaluar la siguiente integral

$$I = \int \psi(\boldsymbol{\xi}) f^{eq} d\boldsymbol{\xi} \quad (4.49)$$

donde $\psi(\boldsymbol{\xi})$ corresponde a un polinomio de $\boldsymbol{\xi}$ y si se escribe como $\psi_{m,n}(\boldsymbol{\xi}) = \xi_x^m \xi_y^n$

$$I = \int \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{d/2}} e^{-\xi^2/(2\theta)} \xi_x^m \xi_y^n \left[1 + \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{u^2}{2\theta} \right] d\xi_x d\xi_y, \quad (4.50)$$

asumiendo además que se está en el caso isotérmico ($\theta = 1$) se obtiene que

$$I = \int \frac{\rho}{(2\pi)^{d/2}} e^{-\xi^2/2} \xi_x^m \xi_y^n \left[1 + \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u} + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})^2}{2} - \frac{u^2}{2} \right] d\xi_x d\xi_y, \quad (4.51)$$

escribiendo

$$I_m = \int \xi^m e^{-\xi^2} d\xi, \quad (4.52)$$

se tiene que

$$I = \frac{\rho}{2\pi} \left[I_m I_n \left(1 + \frac{u^2}{2} \right) + (u_x I_{m+1} I_n + u_y I_m I_{n+1}) \right] \quad (4.53)$$

$$+ \frac{\rho}{2\pi} \left[\frac{1}{2} (u_x^2 I_{m+2} I_n + u_y^2 I_m I_{n+2} + u_x u_y I_m I_n) \right]. \quad (4.54)$$

Solo basta con calcular las integrales para valores de $m \leq 5$, por los momentos que son necesarios y así resolviendo las integrales se llega a que $I_1 = I_3 = I_5 = 0$, mientras que

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} d\xi = \sqrt{2\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2/2} d\xi = \sqrt{2\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 e^{-\xi^2/2} d\xi = 3\sqrt{2\pi}. \quad (4.55)$$

Tomando las tres velocidades diferentes con $\xi_0 = 0$, y resolviendo para ξ_1 y ξ_2 se obtiene el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \omega_0 + \omega_1 + \omega_2 &= \sqrt{2\pi}, \\ \omega_1 \xi_1 + \omega_2 \xi_2 &= 0, \\ \omega_1 \xi_1^2 + \omega_2 \xi_2^2 &= \sqrt{2\pi}, \\ \omega_1 \xi_1^3 + \omega_2 \xi_2^3 &= 0, \\ \omega_1 \xi_1^4 + \omega_2 \xi_2^4 &= 3\sqrt{2\pi}. \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones $\omega_0 = 2\sqrt{2\pi}/3$ y $\omega_1 = \omega_2 = \sqrt{2\pi}/6$, reemplazando en la integral como sumatoria por Gauss-Hermite de estos valores se obtiene que

$$I_m = \sum_{i=0}^2 \omega_i \xi_i^m = \frac{\sqrt{2\pi}}{3} \left(2\xi_0^m + \frac{1}{2}\xi_1^m + \frac{1}{2}\xi_2^m \right), \quad (4.56)$$

sustituyendo en la ecuación (4.54)

$$I = \frac{\rho}{2\pi} \sum_{i,j=0}^2 \omega_i \omega_j \xi_{ix}^m \xi_{jy}^n \left((1 - u^2) + \xi_{ix} u_x + \xi_{jy} u_y + \xi_{ix}^2 u_x^2 + 2u_x u_y \xi_{ix} \xi_{jy} + \xi_{jy}^2 u_y^2 \right). \quad (4.57)$$

Se reescribe $\xi_{i,j} = (\xi_{ix}, \xi_{jy})$ y por otro lado el momento que se está calculando $\psi_{m,n}(\xi_{i,j}) = \xi_{ix}^m \xi_{jy}^n$, así

$$I = \frac{\rho}{2\pi} \sum_{i,j=0}^2 \omega_i \omega_j \psi_{m,n}(\xi_{i,j}) \left((1 - u^2) + \xi_{i,j} \cdot \mathbf{u} + (\xi_{i,j} \cdot \mathbf{u})^2 \right) \quad (4.58)$$

reemplazando las combinaciones de los omega se obtiene que

$$\omega_\alpha = \frac{\omega_i \omega_j}{\pi} = \begin{cases} 4/9 & i = j = 2, & \alpha = 0. \\ 1/9 & i = 1, j = 2, \dots, & \alpha = 1, 2, 3, 4. \\ 1/36 & i = j = 1, \dots, & \alpha = 5, 6, 7, 8. \end{cases} \quad (4.59)$$

Así finalmente se obtiene la función de distribución en equilibrio para el modelo D2Q9 es

$$f_\alpha^{eq} = \omega_\alpha \rho \left[1 + (\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{u}) + \frac{(\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right] \quad (4.60)$$

De las ecuaciones se obtiene $\boldsymbol{\xi}_i$ tiene factores de $\sqrt{3}$. Y como simplificación se asume $\mathbf{c}_i = \boldsymbol{\xi}_i/\sqrt{3}$ y para los modelos que se describirán a continuación, el valor de la velocidad del sonido toma el valor de $c_s = \sqrt{1/3}$, por propiedades de la malla y de ser el caso isotérmico. Por lo que se ha reescrito la ecuación de la forma:

$$f_\alpha^{eq} = \omega_\alpha \rho \left[1 + \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right]. \quad (4.61)$$

Lo que une a las ecuaciones de Lattice Boltzmann con las ecuaciones de Navier-Stockes es el análisis de Chapman-Enskog. Por medio de dicho análisis se puede mostrar que el comportamiento de las ecuaciones de Lattice resultan en el comportamiento de las ecuaciones de Navier-Stockes relacionando la viscosidad con el tiempo de relajación como

$$\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right), \quad (4.62)$$

Notación	Velocidades \mathbf{c}_i	Número	Longitud $ c_i $	Pesos ω_i
D2Q9	(0, 0)	1	0	4/9
	($\pm 1, 0$), ($0, \pm 1$)	4	1	1/9
	($\pm 1, \pm 1$)	4	$\sqrt{2}$	1/36
D3Q19	(0, 0, 0)	1	0	1/3
	($\pm 1, 0, 0$), ($0, \pm 1, 0$), ($0, 0, \pm 1$)	6	1	1/18
	($\pm 1, \pm 1, 0$), ($\pm 1, 0, \pm 1$), ($0, \pm 1, \pm 1$)	12	$\sqrt{2}$	1/36
D3Q27	(0, 0, 0)	1	0	8/27
	($\pm 1, 0, 0$), ($0, \pm 1, 0$), ($0, 0, \pm 1$)	6	1	2/27
	($\pm 1, \pm 1, 0$), ($\pm 1, 0, \pm 1$), ($0, \pm 1, \pm 1$)	12	$\sqrt{2}$	1/54
	($\pm 1, \pm 1, \pm 1$)	8	$\sqrt{3}$	1/216

Tabla 4.1: Tabla de los velocidades y sus pesos de acuerdo al modelo

dicho análisis se puede encontrar en el Apéndice D.1.

En la Tabla 4.1.1.4 se muestran las velocidades y los pesos de cada una de ellas, para los diferentes modelos usados en este trabajo para la parte hidrodinámica. Y en la Figura 4.1 se puede observar una representación gráfica de las velocidades discretizadas de los modelos descritos en la tabla.

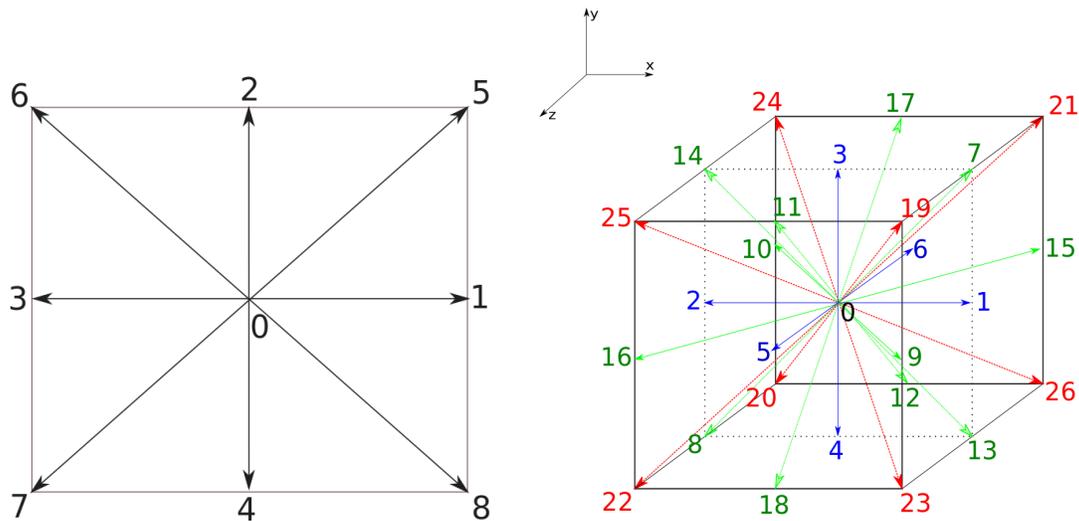


Figura 4.1: Representación gráfica de las velocidades en los modelos D2Q9 y D3Q27 respectivamente. El modelo D3Q19 corresponde a las mismas velocidades que el modelo D3Q27 sin tomar en cuenta las últimas ocho, correspondientes a las rojas.

4.1.2. Implementación

Para implementar un código numérico en Lattice Boltzmann se deben de seguir los pasos que se muestran a continuación:

- Se establecen condiciones iniciales tanto para la densidad ρ , como para la velocidad \mathbf{u} .
- Se calcula la función de distribución en el equilibrio f_{α}^{eq} , de la ecuación (4.61).
- Se realiza el paso de colisión, ecuación (4.45).
- Se realiza el paso de propagación, ecuación (4.46).
- Se establecen las condiciones de frontera adecuadas al problema.
- Se calculan los momentos macroscópicos, $\rho = \sum f_{\alpha}$, $\rho\mathbf{u} = \sum \xi_{\alpha} f_{\alpha}$.
- Se repite desde el cálculo de la función de distribución en el equilibrio, al siguiente paso de tiempo $t + \Delta t$.

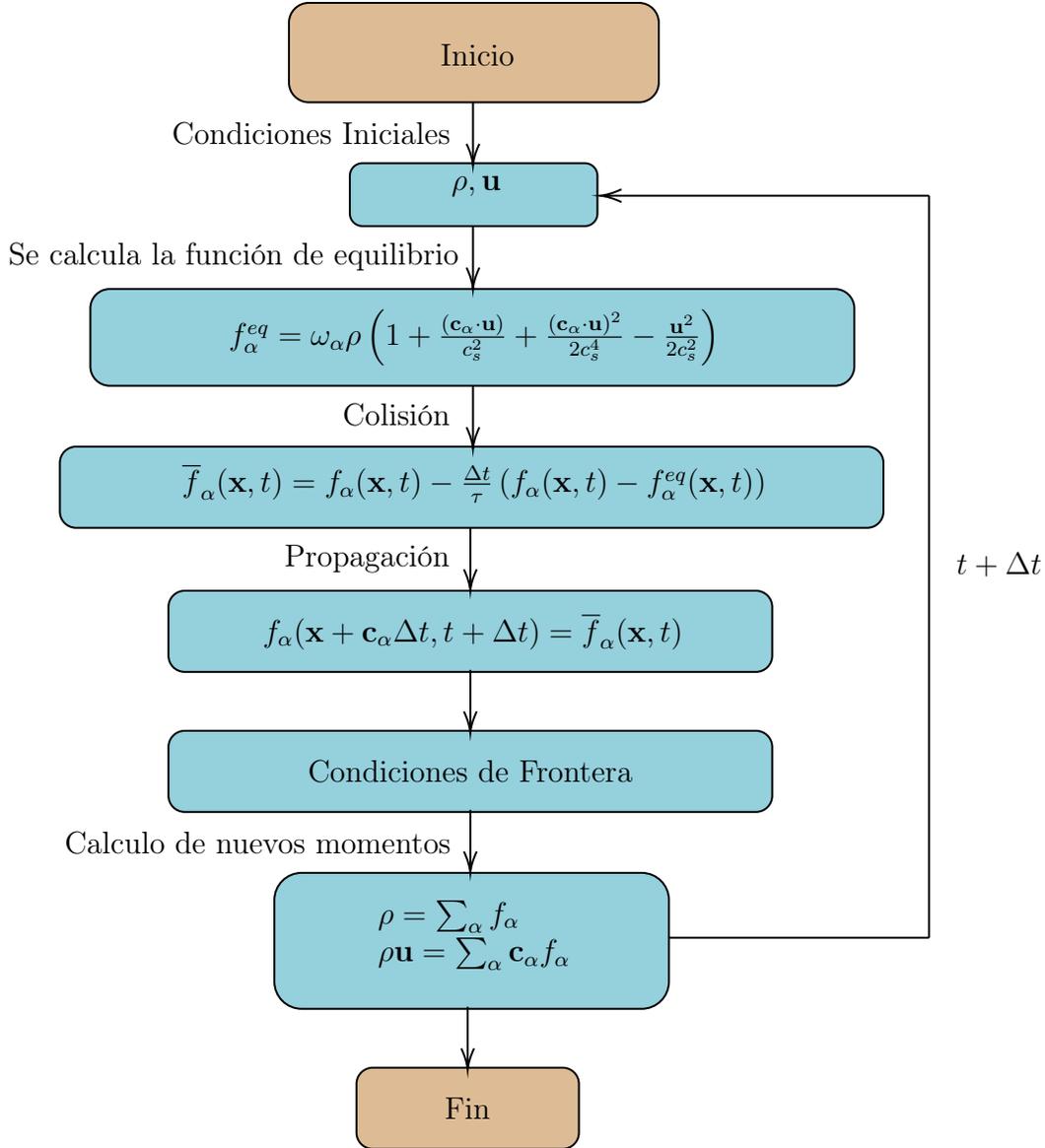
Más adelante se muestra un diagrama que corresponde al orden de la implementación del método en problemas de hidrodinámica.

4.1.2.1. Condiciones de Frontera

Para problemas de hidrodinámica se considerarán tres tipos de condiciones de frontera:

- Condiciones de frontera periódicas: que corresponde a pensar que el sistema descrito en la malla usada se repite de manera infinita en el espacio y el mismo fenómenos en ese espacio se repite infinitamente en todo el espacio.
- Condiciones de frontera de rebote, que corresponde a pensar que el fluido rebota en las paredes, esto se hará sin realizar ningún tipo de interacción con las paredes, es decir, que el material de las paredes no interacciona con el fluido. Estas paredes se pueden mover.
- Condiciones de frontera tipo Zou-He para simular gradientes de presión entre dos de las fronteras del sistema.

Se describen las formas de implementar las condiciones de frontera para el modelo D2Q9 a manera de ejemplo. Las de los otros modelos se podrán encontrar en el Apéndice C.



Condiciones de Frontera Periódicas en el modelo D2Q9

Se les mencionará a las fronteras por el nombre de: tapa izquierda a la que corresponde a $x = x_{min}$ con f_{α}^{izq} , tapa derecha a la que corresponde a $x = x_{max}$ con f_{α}^{der} , tapa norte a la que corresponde con $y = y_{max}$ con f_{α}^{nor} y tapa sur a la que corresponde con $y = y_{min}$ con f_{α}^{sur} . De la figura (4.2) se observa que para las funciones de distribución en la tapa izquierda f_1^{izq} , f_5^{izq} y f_8^{izq} , no tienen información en el paso de propagación por lo que se debe considerar que clase de paredes se están tomando en cuenta.

Para las condiciones de frontera periódicas, se considera que el sistema es infinito pero la dinámica es igual a la de la malla usada, por lo que se considera que para las diferentes fronteras serán:

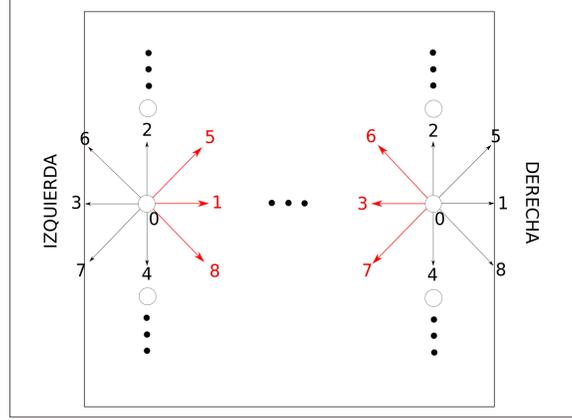


Figura 4.2: Fronteras correspondientes a las tapas izquierda y derecha. En rojo las funciones de distribución desconocidas en el paso de propagación.

Tapa Izquierda

$$\begin{aligned} f_1^{izq} &= f_1^{der} \\ f_5^{izq} &= f_5^{der} \\ f_8^{izq} &= f_8^{der} \end{aligned}$$

Tapa Derecha

$$\begin{aligned} f_3^{der} &= f_3^{izq} \\ f_6^{der} &= f_6^{izq} \\ f_7^{der} &= f_7^{izq} \end{aligned}$$

Tapa Norte

$$\begin{aligned} f_4^{nor} &= f_4^{sur} \\ f_7^{nor} &= f_7^{sur} \\ f_8^{nor} &= f_8^{sur} \end{aligned}$$

Tapa Sur

$$\begin{aligned} f_2^{sur} &= f_2^{nor} \\ f_5^{sur} &= f_5^{nor} \\ f_6^{sur} &= f_6^{nor} \end{aligned}$$

Condiciones de Frontera de Rebote en el modelo D2Q9

Se usan para casos de fronteras sólidas estáticas o en movimiento. Se considera que para este caso las partículas que llegan a las paredes en el paso de propagación, rebotan. Existen dos formas de considerar la discretización espacial, en las que los puntos son el centro de una celda o en que conforman parte de las paredes del sistema. En este trabajo se hace uso de que son el centro de la celda, de esta manera al rebotar las partículas deberían regresar a la misma sección de celdas.

Definiendo en el paso de colisión y en alguna frontera particular

$$\bar{f}_\alpha(\mathbf{x}_F, t) = f_\alpha(\mathbf{x}_F, t) - \frac{1}{\tau}(f_\alpha(\mathbf{x}_F, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}_F, t)), \quad (4.63)$$

con \mathbf{x}_F correspondiendo a los nodos de la frontera, como por ejemplo en la frontera izquierda $\mathbf{x}_F = (x_{min}, y)$. En el paso de propagación se definen como condiciones de frontera que:

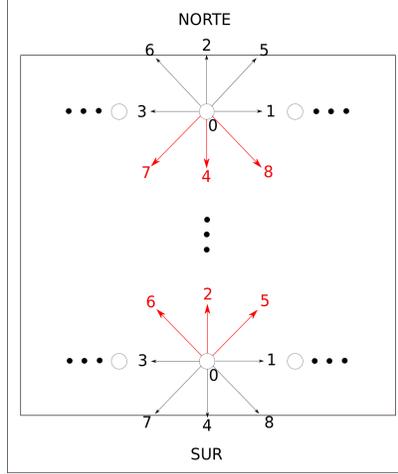


Figura 4.3: Fronteras correspondientes a las tapas norte y sur. En rojo las funciones de distribución desconocidas en el paso de propagación.

Tapa Izquierda

$$\begin{aligned} f_1^{izq}(t + \Delta t) &= \bar{f}_3^{der}(t) \\ f_5^{izq}(t + \Delta t) &= \bar{f}_7^{der}(t) \\ f_8^{izq}(t + \Delta t) &= \bar{f}_6^{der}(t) \end{aligned}$$

Tapa Derecha

$$\begin{aligned} f_3^{der}(t + \Delta t) &= \bar{f}_1^{izq}(t) \\ f_6^{der}(t + \Delta t) &= \bar{f}_8^{izq}(t) \\ f_7^{der}(t + \Delta t) &= \bar{f}_5^{izq}(t) \end{aligned}$$

Tapa Norte

$$\begin{aligned} f_4^{nor}(t + \Delta t) &= \bar{f}_2^{sur}(t) \\ f_7^{nor}(t + \Delta t) &= \bar{f}_5^{sur}(t) \\ f_8^{nor}(t + \Delta t) &= \bar{f}_6^{sur}(t) \end{aligned}$$

Tapa Sur

$$\begin{aligned} f_2^{sur}(t + \Delta t) &= \bar{f}_4^{nor}(t) \\ f_5^{sur}(t + \Delta t) &= \bar{f}_7^{nor}(t) \\ f_6^{sur}(t + \Delta t) &= \bar{f}_8^{nor}(t) \end{aligned}$$

Condiciones de Frontera tipo Zou-He en el modelo D2Q9

Estas condiciones se basan la idea de condiciones de rebote por Zou y He [10]. Con estas condiciones se puede simular un gradiente de presión, en esta sección se realiza para las tapas izquierda y derecha, para hacerlo en as tapas norte y sur se sigue el mismo procedimiento. Para este tipo de condiciones se hará uso del hecho que $\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}$ y de $\mathbf{u} = (1/\rho) \sum_{\alpha} \mathbf{c}_{\alpha} f_{\alpha}$.

Como se mencionó existe una relación de la presión y la densidad tomando en cuenta la ecuación de estado isotérmica, como $p = c_s^2 \rho$, así se puede establecer una diferencia de presión como una diferencia de densidad.

Cosiderando la tapa izquierda con una presión mayor $p_{in} = c_s^2 \rho_{in}$, las funciones de distribución desconocidas son f_1 , f_5 y f_8 , y usando el hecho de que $u_x = (1/\rho) \sum_{\alpha} c_{x\alpha} f_{\alpha}$ se tiene que, despejando estas

$$f_1 + f_5 + f_8 = f_3 + f_6 + f_7 + \rho u_{xin},$$

y de la densidad

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho_{in} - (f_0 + f_2 + f_3 + f_4 + f_6 + f_7),$$

así se puede construir una forma de calcular la densidad en la frontera con variables conocidas

$$u_{xin} = -(f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7))/\rho_{in} + 1. \quad (4.64)$$

Por otro lado, para cerrar el sistema, se asume lo sugerido por Zou y He, de considerar que en el rebote, las funciones de distribución en el no equilibrio normales a la superficie se sigue satisfaciendo, es decir, que se cumple que para $f_1^{neq} = f_1 - f_1^{eq}$. En el caso de la tapa izquierda

$$f_1^{neq} = f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq} = f_3^{neq},$$

así

$$f_1 = f_3 - f_3^{eq} + f_1^{eq}.$$

Se conocen f_3^{eq} y f_1^{eq} , sustituyendolas se obtiene que

$$f_1 = f_3 + 2\rho_{in}u_{xin}/3. \quad (4.65)$$

Así finalmente se obtienen las relaciones

$$f_5 = f_7 - (f_2 - f_4)/2 + \rho_{in}u_{xin}/6 + \rho_{in}u_{yin}/2, \quad (4.66)$$

$$f_8 = f_6 + (f_2 - f_4)/2 + \rho_{in}u_{xin}/6 - \rho_{in}u_{yin}/2. \quad (4.67)$$

Para la tapa derecha y siguiendo los mismos pasos y se obtiene que:

$$u_{xout} = (f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_1 + f_5 + f_8))/\rho_{out} - 1, \quad (4.68)$$

$$f_3 = f_1 - 2\rho_{out}u_{xout}/3, \quad (4.69)$$

$$f_7 = f_5 + (f_2 - f_4)/2 - \rho_{out}u_{xout}/6 - \rho_{out}u_{yout}/2, \quad (4.70)$$

$$f_6 = f_8 - (f_2 - f_4)/2 - \rho_{out}u_{xout}/6 + \rho_{out}u_{yout}/2. \quad (4.71)$$

4.2. Extensión del método de Lattice Boltzmann a Magnetohidrodinámica

El método de Lattice Boltzmann se puede extender a MHD, resolviendo la ecuación de inducción magnética de una manera similar a la ecuación de continuidad que se usa en hidrodinámica, debido a la forma de esta. Introduciendo una función de distribución vectorial para recuperar el campo magnético, y se contruye una ecuación del tipo Boltzmann tal que se recupere la ecuación de inducción magnética.

4.2.1. Fuerza de Lorentz y Tensor de Maxwell

Usando la ecuación de Boltzmann con el término correspondiente a la fuerza de Lorentz, se obtiene que

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \xi_\alpha} = \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{coll}. \quad (4.72)$$

Modelar las ecuaciones de la magnetohidrodinámica no solo requiere de las ecuaciones de continuidad y Navier-Stokes como ha sido hasta entonces, ahora también se requiere de recuperar la evolución del campo magnético dada por la ecuación de inducción.

En el método de Lattice Boltzmann existe no solo una forma de recuperar las ecuaciones que dictan la dinámica del fluido [11]. Una forma es, al calcular la ecuación de momento, hacer uso de una formulación de la ecuación de Boltzmann con fuerzas externas, así la ecuación ya discretizada sería de la forma que la función de distribución en equilibrio se mantenga como hasta ahora se ha manejado. En cambio se modifica la ecuación del operador de colisión, y debido a la fuerza de Lorentz es modificado también el cálculo de los momentos, de tal manera que:

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{\alpha=1}^N e_\alpha f_\alpha + (\mathbf{J} \times \mathbf{B}) \frac{\Delta t}{2}. \quad (4.73)$$

Sin embargo, otra forma de recuperar las ecuaciones de la dinámica del fluido y a la que se recurrirá en este trabajo es el de recuperar las ecuaciones del momento manteniendo la forma del operador de colisión y modificando las funciones de distribución en el equilibrio tal que al calcular los momentos se recuperé la fuerza de Lorentz [11],[12].

Se tiene que la ecuación de momento es de la forma

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (p \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \mathbf{J} \times \mathbf{B} + \nabla \cdot (\mu S) \quad (4.74)$$

donde se puede remplazar el término $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$ con

$$\mathbf{J} \times \mathbf{B} = (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} = \nabla \cdot \left[\frac{1}{2} \delta_{ij} |\mathbf{B}|^2 - B_i B_j \right], \quad (4.75)$$

esto implica que la ecuación de momento tome la forma, para una viscosidad tendiendo a cero ($\nu = 0$), de

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(p \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \frac{1}{2} \delta_{ij} |\mathbf{B}|^2 - B_i B_j \right) = 0. \quad (4.76)$$

Para lo que se mencionó anteriormente en la ecuación (4.73) es necesario agregar términos de la fuerza al calcular los momentos microscópicos. Pero si se observa bien la forma de la ecuación de momento (4.76), tiene las mismas características que la ecuación de Navier-Stokes salvo los últimos dos términos. Existe una forma de agregar

estos dos términos a la función de distribución en el equilibrio tal que al calcular los momentos macroscópicos se recupere la ecuación de continuidad y la de Navier-Stokes con el término de la fuerza. Y esto se puede añadiendo los siguientes términos a la función de distribución en el equilibrio tanto en dos como en tres dimensiones:

$$\frac{\omega_\alpha}{2} \left[\frac{1}{2} |\mathbf{B}_\alpha|^2 |\boldsymbol{\xi}_\alpha|^2 - (\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{B}_\alpha)^2 \right], \quad (4.77)$$

$$\frac{\omega_\alpha}{2} \left[\frac{1}{3} |\mathbf{B}_\alpha|^2 |\boldsymbol{\xi}_\alpha|^2 - (\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{B}_\alpha)^2 \right]. \quad (4.78)$$

Se recurre a esta forma ya que es más simple de implementar numéricamente, de manera que las funciones de distribución en equilibrio quedan de la siguiente forma:

$$f_\alpha^{eq} = \omega_\alpha \rho \left[1 + \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] + \frac{\omega_\alpha}{2c_s^4} \left[\frac{1}{2} |\mathbf{B}_\alpha|^2 |\mathbf{c}_\alpha|^2 - (\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{B}_\alpha)^2 \right], \quad (4.79)$$

$$f_\alpha^{eq} = \omega_\alpha \rho \left[1 + \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] + \frac{\omega_\alpha}{2c_s^4} \left[\frac{1}{3} |\mathbf{B}_\alpha|^2 |\mathbf{c}_\alpha|^2 - (\mathbf{c}_\alpha \cdot \mathbf{B}_\alpha)^2 \right]. \quad (4.80)$$

4.2.2. Modelo de la Ecuación de Inducción Magnética

Una forma de resolver la ecuación de inducción magnética es usando un análogo a la formulación de Lattice Boltzmann. No es posible contruir una formulación cinética para la ecuación de inducción de forma que se use una función de distribución escalar tipo BGK. Entonces se propone una función de distribución vectorial nos permita recuperar la ecuación de inducción al integrarla [4]. Físicamente no es posible describir la evolución del campo magnético con una teoría cinética, sin embargo, numéricamente se probará con la función de distribución antes mencionada, tal que

$$\mathbf{B} = \sum_{\beta} \mathbf{g}_{\beta}. \quad (4.81)$$

Esta función de distribución debe satisfacer la forma del operador BGK, entonces

$$\frac{\partial \mathbf{g}_{\beta}}{\partial t} + \Xi_{\beta} \cdot \nabla \mathbf{g}_{\beta} = -\frac{\Delta t}{\tau_m} (\mathbf{g}_{\beta} - \mathbf{g}_{\beta}^{eq}), \quad (4.82)$$

donde Ξ_{β} corresponde al valor de las velocidades ya discretizadas en la nueva malla para el campo magnético.

La forma mas simple de escribir la función de distribución del campo magnético, tal que al calcular los momentos macroscópicos se recuperen, tanto el campo magnético como las propiedades de este [13], como que $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ es la siguiente

$$g_{\beta j}^{eq} = \bar{\omega}_{\beta} \left[B_j + \frac{\Xi_{\beta j}}{c_{sm}^2} (u_i B_j - B_i u_j) \right], \quad (4.83)$$

donde nuevamente los pasos de colisión y propagación serán de la forma que se hace para problemas de hidrodinámica,

- Colisión:

$$\bar{\mathbf{g}}_\beta(\mathbf{x}, t) = \mathbf{g}_\beta(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_m}(\mathbf{g}_\beta(\mathbf{x}, t) - \mathbf{g}_\beta^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (4.84)$$

- Propagación

$$\mathbf{g}_\beta(\mathbf{x} + \Xi_\beta \Delta t, t + \Delta t) = \bar{\mathbf{g}}_\beta(\mathbf{x}, t). \quad (4.85)$$

Con los Ξ nuevos, y τ_m el tiempo de relajación relacionado con la resistividad magnética η_m como $\eta_m = c_{sm}^2 (\tau_m - \Delta t/2)$. Pero a diferencia de la parte hidrodinámica, en el análisis de Chapman-Enskog descrito en el Apéndice D.2, ahora el correspondiente a la velocidad del sonido que está relacionado ahora con la resistividad magnética y la malla, varía en su valor como $c_{sm} = \sqrt{1/3}$ en dos dimensiones y como $c_{sm} = \sqrt{1/4}$ en tres dimensiones, para las discretizaciones en la tabla [14].

Notación	Velocidad Ξ_β	Número	Longitud $ \Xi_\beta $	Pesos $\bar{\omega}_\beta$
D2Q5	(0,0)	1	0	1/3
	($\pm 1,0$), (0, ± 1)	4	1	1/6
D3Q7	(0,0,0)	1	0	1/4
	($\pm 1,0,0$), (0, $\pm 1,0$), (0,0, ± 1)	6	1	1/8

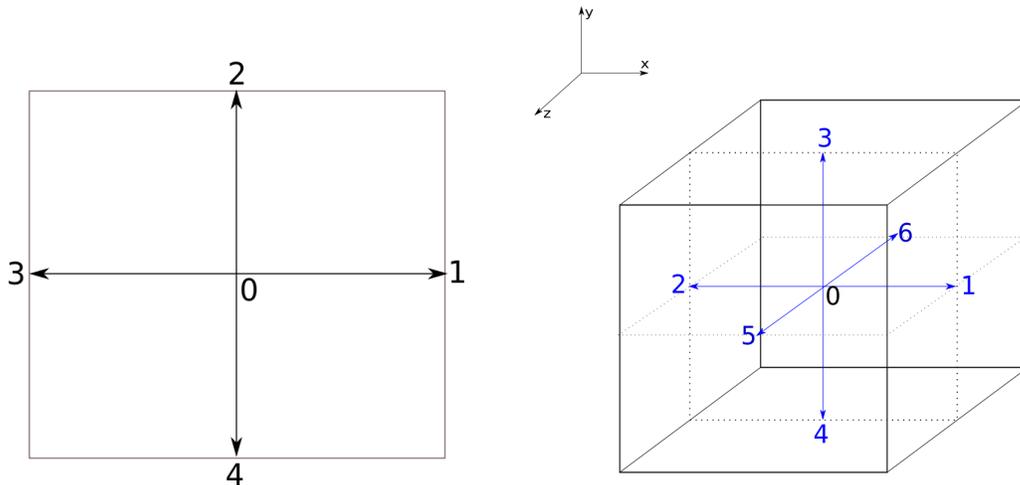


Figura 4.4: Representación gráfica de las velocidades discretas para los modelos D2Q5 y D3Q7 respectivamente, empleados para las mallas del campo magnético.

4.2.3. Implementación

Para implementar el código numérico en Lattice Boltzmann se deben de seguir a continuación los siguientes pasos.

- Se establecen condiciones iniciales tanto para la densidad ρ , como para la velocidad \mathbf{u} y el campo magnético \mathbf{B} .
- Se calcula la función de distribución en el equilibrio f_α^{eq} , de la ecuación (4.61) y $g_{\beta j}^{eq}$, de las ecuaciones (4.79) o (4.80).
- Se realizan los pasos de colisión, ecuaciones (4.45) y (4.84).
- Se realizan los pasos de propagación, ecuaciones (4.46) y (4.84).
- Se establecen las condiciones de frontera adecuadas del problema, tanto para el fluido como para el campo magnético.
- Se calculan los momentos macroscópicos, $\rho = \sum f_\alpha$, $\rho\mathbf{u} = \sum \xi_\alpha f_\alpha$ y $\mathbf{B} = \sum_\beta \mathbf{g}_\beta$.
- Se repite el cálculo desde las funciones de distribución en el equilibrio, para el siguiente paso de tiempo $t + \Delta t$.

Condiciones de Frontera A diferencia del caso únicamente hidrodinámico, deben considerarse ahora también las condiciones de frontera para el campo magnético. Para el caso de condiciones periódicas es simple debido a las pocas direcciones de la función de distribución vectorial \mathbf{g} tanto en dos como en tres dimensiones:

Tapa Izquierda 2D

$$\mathbf{g}_1^{izq} = \mathbf{g}_1^{der}$$

Tapa Derecha 2D

$$\mathbf{g}_2^{der} = \mathbf{g}_2^{izq}$$

Tapa Norte 2D

$$\mathbf{g}_4^{nor} = \mathbf{g}_4^{sur}$$

Tapa Sur 2D

$$\mathbf{g}_3^{sur} = \mathbf{g}_3^{nor}$$

y

Tapa Izquierda 3D

$$\mathbf{g}_1^{izq} = \mathbf{g}_1^{der}$$

Tapa Derecha 3D

$$\mathbf{g}_2^{der} = \mathbf{g}_2^{izq}$$

Tapa Norte 3D

$$\mathbf{g}_4^{nor} = \mathbf{g}_4^{sur}$$

Tapa Sur 3D

$$\mathbf{g}_3^{sur} = \mathbf{g}_3^{nor}$$

Tapa Enfrente 3D

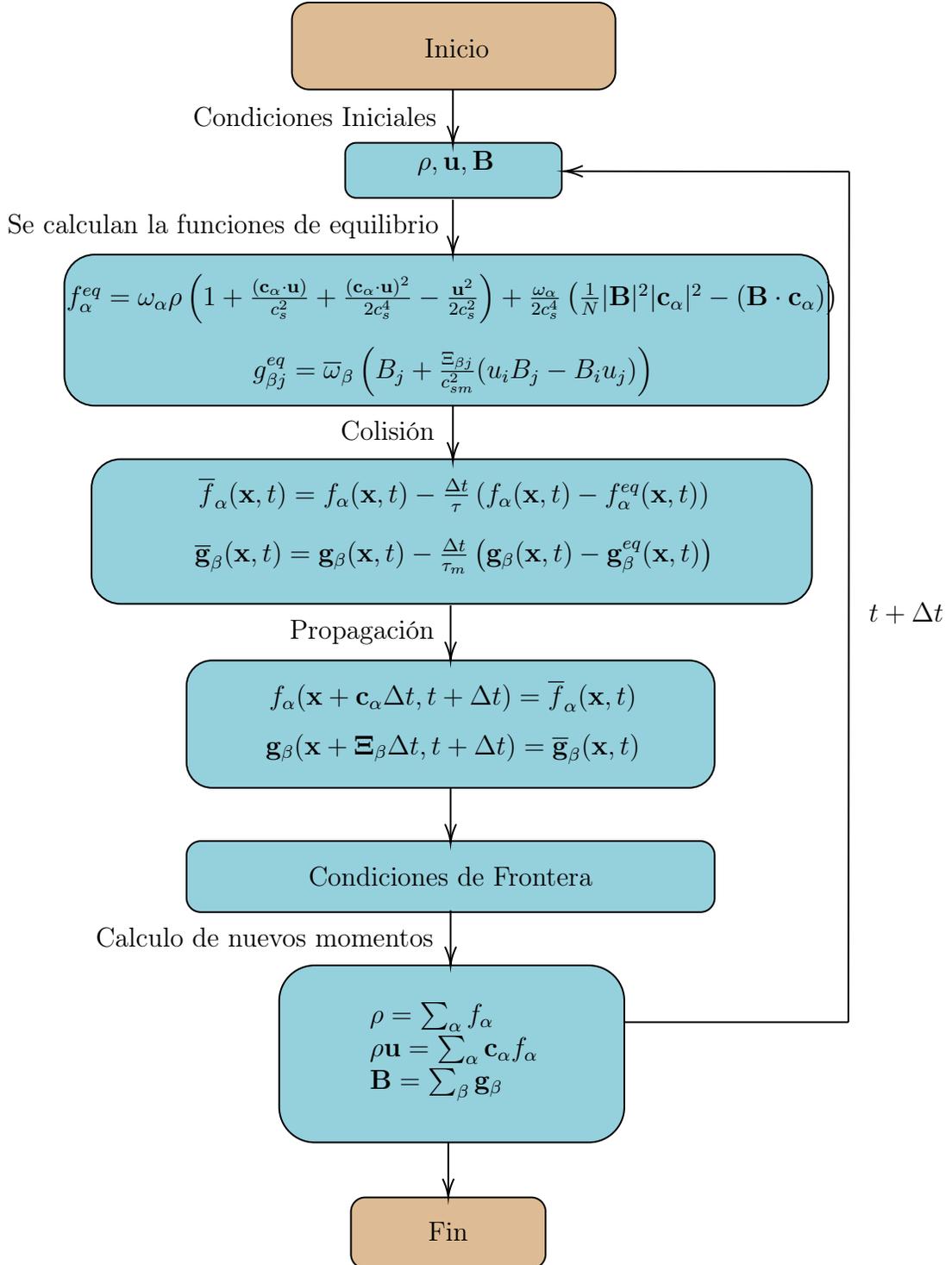
$$\mathbf{g}_6^{nor} = \mathbf{g}_6^{sur}$$

Tapa Atrás 3D

$$\mathbf{g}_5^{sur} = \mathbf{g}_5^{nor}$$

Sin embargo, al existir algún tipo de pared en las fronteras para el fluido, este no puede ser considerado como un tipo de rebote para el campo magnético. El tratamiento del campo magnético en las fronteras debe tomarse con más cuidado por las propiedades de este. Dependiendo del tipo del problema que se esté describiendo más adelante se detallará que condiciones de frontera serán las adecuadas para el campo magnético.

A continuación se presenta un diagrama general para implementar el método ya extendido a magnetohidrodinámica.



donde, el valor de N corresponde a 2 o 3 en dos y tres dimensiones respectivamente.

Capítulo 5

Simulaciones Numéricas

Ya se tiene la teoría para resolver problemas hidrodinámicos y magnetohidrodinámicos, se procede ahora a implementar el método en algunos códigos numéricos para resolver algunos problemas, con el fin de probar bajo que condiciones funciona el método.

5.1. Hidrodinámica

Se desarrollaron códigos numéricos para resolver diferentes problemas en hidrodinámica, tanto en dos como en tres dimensiones. En dos dimensiones se resuelven los flujos de Couette, flujo de Poiseuille, el flujo de Couette en una caja cuadrada y los vórtices de Green-Taylor. En tres dimensiones los anteriores salvo el flujo de Poiseuille.

5.1.1. Flujos de Couette

Considérese un fluido incompresible libre de fuerzas y sin gradiente de presión, entre dos placas paralelas separadas a una distancia d , en el cuál una de las tapas se fija a velocidad constante $\mathbf{u} = (u_0, 0, 0)$ mientras que la otra se mantiene fija, $\mathbf{u} = (0, 0, 0)$. Bajo estas condiciones la solución a la ecuación de Navier-Stokes (2.14) es

$$u_x(y) = \frac{u_0}{d}y \quad (5.1)$$

donde el perfil de velocidades se muestra la figura (5.1) y se le conoce como flujo de Couette.

Para resolver numéricamente el caso del flujo de Couette, la placa inferior se mantiene estática, mientras que la placa superior se mantiene a una velocidad constante u_0 . Las mallas tienen dimensiones $N_x \times N_y$ en dos dimensiones y $N_x \times N_y \times N_z$ en tres dimensiones. La distancia d está definida por $d = N_y \Delta y$. Se resuelve para los modelos diferentes D2Q9 y D3Q27, tanto en dos como en tres dimensiones respectivamente.

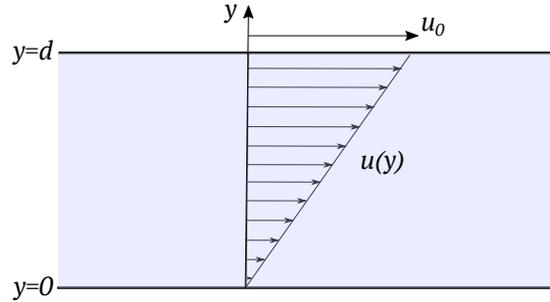


Figura 5.1: Perfil de velocidades para el flujo de Couette.

Recordando que se está trabajando en unidades de malla, por lo que $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1$ al igual que $\Delta t = 1$.

El código se resuelve para los siguientes casos:

- En dos dimensiones, las condiciones de frontera para la tapa inferior son condiciones de rebote, mientras que para la superior son condiciones de rebote considerando que la tapa se está moviendo a una velocidad constante $\mathbf{u} = u_0$ en la dirección x . Para las tapas izquierda y derecha se usan condiciones de frontera periódicas.

Como primer dato, se usó una malla de $N_x = N_y = 29$ puntos, y un valor de $u_0 = 0.1$. Para la cuál se usaron diferentes valores para el tiempo de relajación de $\tau = 0.57$, $\tau = 0.7$, $\tau = 0.83$ y $\tau = 0.96$ como se observa en la Figura 5.2. La solución analítica no depende de la viscosidad por lo que todos los perfiles tienden a la solución.

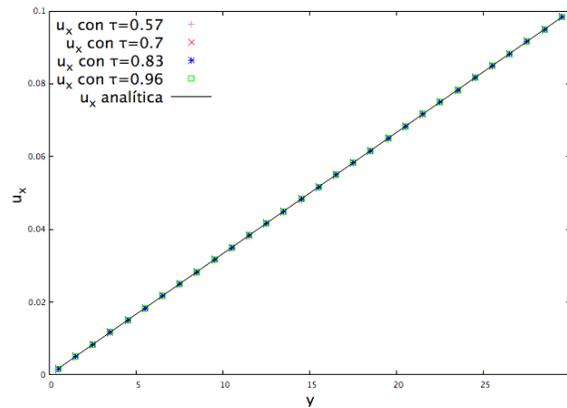


Figura 5.2: Perfil de velocidades para el flujo de Couette con diferentes valores para el tiempo de relajación τ . A un tiempo $N_t = 10000$ en todos los casos.

Posteriormente se seleccionó el valor de $\tau = 0.7$ para aumentar la resolución de la malla y analizar la convergencia del problema. Por la construcción del método se espera un orden de convergencia a segundo orden en las ecuaciones de Navier-Stockes.

Una forma de medir es fijando en número de Reynolds para un problema y cambiando la escala de la longitud como $d = aN_y$, el tiempo al ser reescalado queda como ta^2 y para mantener el Reynolds la velocidad se reescala como u_0/a .

Se aumentaron los valores de la malla a $N_x = N_y = 59$ y $N_x = N_y = 119$ puntos. Donde se obtiene que al ajustar la escala de los resultados se mantiene el mismo perfil, y no solo eso, si no que el error para cada caso disminuye a segundo orden, tal como era esperado, esto se observa en la Figura 5.1.1.

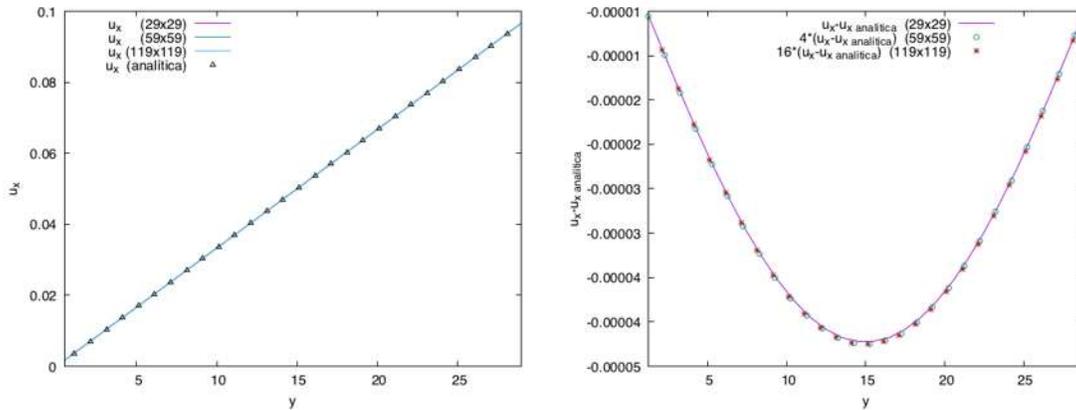


Figura 5.3: Flujo de Couette en dos dimensiones para diferentes mallas. Del lado izquierdo la gráfica del perfil de velocidades para un tiempo de relajación de $\tau = 0.7$ y a un tiempo $t = N_t$ con $N_t = 10000$, $N_t = 40000$ y $N_t = 16000$ para las mallas $[29 \times 29]$, $[59 \times 59]$ y $[119 \times 119]$ respectivamente. Del lado derecho la diferencia entre el valor numérico y el analítico multiplicado por un factor de 2^a con a la resolución de la malla.

- En tres dimensiones, las condiciones de frontera para la placa superior se consideran de rebote con la propiedad de que se mueve en el eje x a una velocidad constante $\mathbf{u} = (u_0, 0, 0)$, la placa inferior se mantiene fija y se consideran condiciones de frontera de rebote. Las placas izquierda y derecha se mantienen con condiciones de frontera periódicas, al igual que las placas de enfrente y la trasera.

Al igual que el caso de dos dimensiones, el perfil de velocidades es independiente al valor de τ que se tome. Se realiza el mismo análisis que se hace en dos dimensiones para el valor de $\tau = 0.7$. Ahora se consideran las mallas $N_x = N_y = N_z = 10$, $N_x = N_y = N_z = 20$ y $N_x = N_y = N_z = 40$ puntos, el valor de la velocidad de la placa superior es de $u_0 = 0.1$. En la Figura 5.4 se observa como se mantiene el perfil de velocidades y la convergencia de la solución.

Este caso se reproduce igual que en dos dimensiones por la simetría de el problema, como es de esperarse.

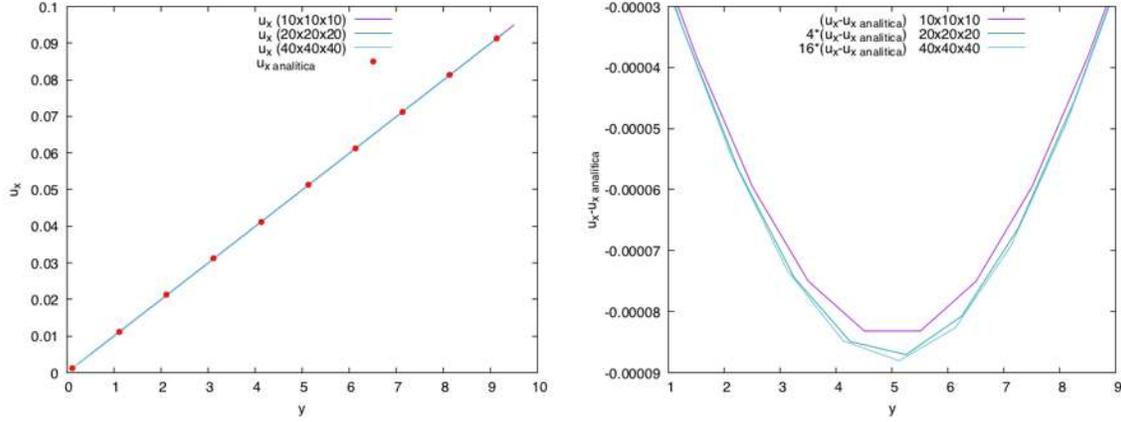


Figura 5.4: Flujo de Couette en tres dimensiones a diferentes mallas. Del lado izquierdo el perfil de velocidades para un tiempo de relajación es $\tau = 0.7$ y el tiempo al cuál se obtiene la gráfica es $t = N_t$ con $N_t = 1000$, $N_t = 4000$ y $N_t = 16000$ para las mallas $[10 \times 10]$, $[20 \times 20 \times 20]$ y $[40 \times 40 \times 40]$ respectivamente. Del lado derecho la diferencia entre el valor numérico y el analítico multiplicados por el valor 2^n con n la resolución de la malla.

5.1.2. Vórtices de Green-Taylor 2D y 3D

Otro problema que se resuelve con el método de Lattice Boltzmann es el de los vórtices de Green-Taylor, los cuales tienen una solución analítica:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \left(-\sqrt{\frac{k_y}{k_x}} \cos k_x x \sin k_y y, \sqrt{\frac{k_x}{k_y}} \sin k_x x \cos k_y y \right) e^{-t/t_d}, \quad (5.2)$$

y

$$p = p_0 - \rho_0 \frac{u_0^2}{4} \left(\frac{k_y}{k_x} \cos 2k_x x + \frac{k_x}{k_y} \cos 2k_y y \right) e^{-t/t_d}, \quad (5.3)$$

donde $k_x = 2\pi/x_{max}$, $k_y = 2\pi/y_{max}$ y el valor $t_d = 1/(\nu(k_x^2 + k_y^2))$.

Estos vórtices siempre mantienen su forma, pero van disminuyendo exponencialmente en su magnitud. Se obtienen los siguientes resultados para el problema a dos y tres dimensiones:

- En dos dimensiones se considera la malla de $N_x = N_y = 50$ puntos, las condiciones iniciales corresponden a las ecuaciones analíticas (5.2) y (5.3) a un tiempo $t = 0$, se usaron diferentes viscosidades para el análisis pero se toma el caso particular de la viscosidad $\nu = 0.063$, con $p_0 = 0$, $\rho_0 = 1$ y $u_0 = 0.1$. Para este problema las condiciones de frontera se consideran periódicas en todas las tapas.

En la Figura 5.5 se observa como efectivamente el orden de la velocidad disminuye en forma exponencial. Se muestra el perfil en las dos dimensiones con el objetivo de mostrar que no se pierde la forma inicial del sistema, únicamente la magnitud de las velocidades.

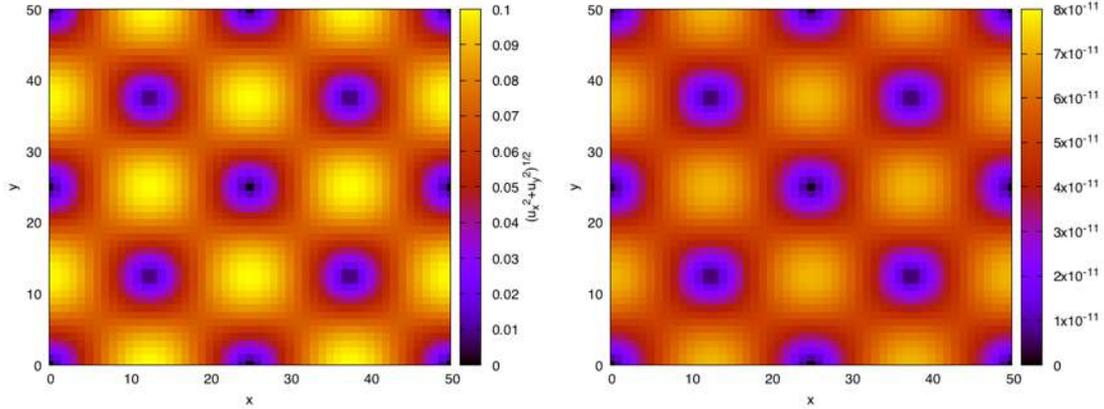


Figura 5.5: Vortices de Green-Taylor en dos dimensiones. Para una malla de $[50 \times 50]$ puntos, $\nu = 0.063$. Del lado izquierdo el perfil de velocidades a un tiempo $t = 0$, del lado derecho el perfil a un tiempo $t = N_t = 10000$.

- En tres dimensiones se consideró la malla $N_x = N_y = N_z = 25$ puntos, las condiciones iniciales corresponden a las siguientes ecuaciones:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = u_0 (\sin(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z), -\cos(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z), 0), \quad (5.4)$$

$$p = p_0 - \rho_0 \frac{u_0^2}{16} (\cos 2k_x x + \cos 2k_y y + \cos 2k_z z), \quad (5.5)$$

con $k_x = 2\pi/x_{max}$, $k_y = 2\pi/y_{max}$ y $k_z = 2\pi/z_{max}$. Los valores que se usaron fueron $u_0 = 0.1$, $\nu = 0.063$. De manera similar el resultado que se espera es similar al de dos dimensiones, salvo que ahora se tiene una velocidad en z , pero como se considero $v_z = 0$, se obtienen gráficas muy similares.

En la Figura 5.6, se observa un corte en el eje x , y podemos observar el mismo tipo de comportamiento con la velocidad decayendo exponencialmente. Por otro lado en la Figura 5.7 se observa el perfil inicial de la densidad, el perfil de la densidad al tiempo $t = N_t = 10000$ no se graficó, ya que los ordenes de diferencia en la magnitud variaban en un orden de $\sim 10^{-14}$.

5.1.3. Flujo de Couette en Caja Cuadrada

Considérese ahora el caso de el flujo de Couette, salvo que ahora las tapas izquierda y derecha en dos dimensiones, y añadiendo las de enfrente y la trasera en tres dimensiones tendrán condiciones de frontera de rebote y estáticas, tal como se hizo con la tapa inferior. La superior se mantiene con condiciones de rebote y moviéndose a una velocidad constante u_0 en la dirección x . Este problema en particular no tiene solución analítica, pero se conoce muy bien por su propiedad de originar vórtices en las esquinas de la caja al contener un fluido más viscoso.

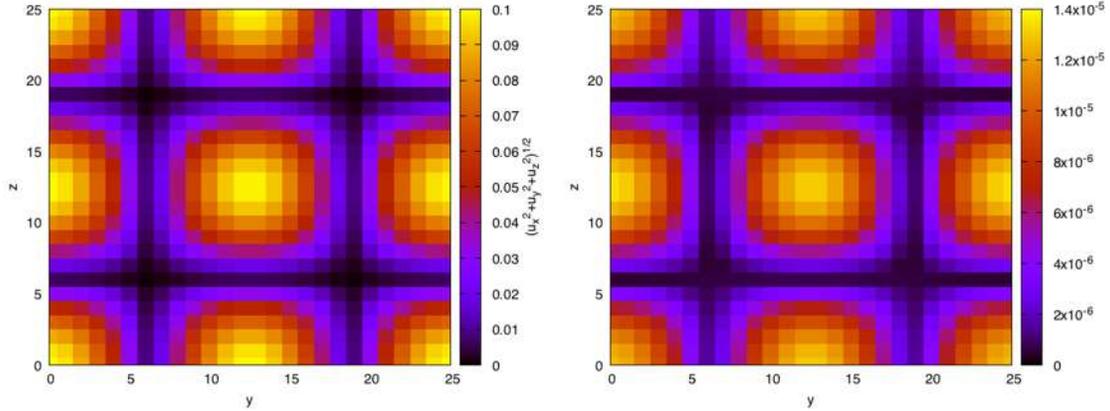


Figura 5.6: Vórtices de Green-Taylor en tres dimensiones. La malla que se usó fue de $[25 \times 25]$ puntos. A la izquierda el perfil inicial dado por las ecuaciones (5.2) y (5.5). A la derecha el perfil de velocidades a un tiempo $t=70$

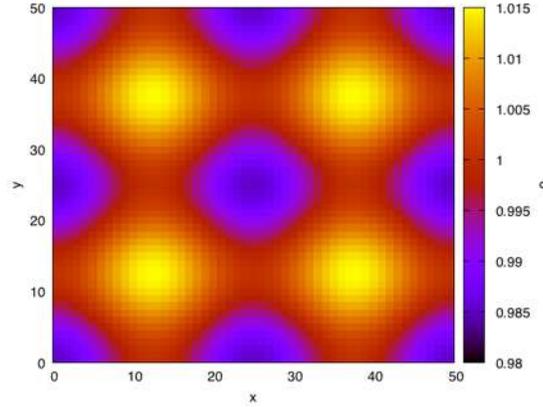


Figura 5.7: Perfil inicial de la densidad en los Vórtices de Green-Taylor.

Se desarrollaron diferentes pruebas a diferentes viscosidades, para comenzar a observar dichos vórtices en las esquinas tal como se muestra a continuación:

- Para el caso de dos dimensiones se tomaron tres casos diferentes, todos para mallas de $N_x = N_y = 100$ puntos, la tapa superior se consideró a una velocidad constante de $u_0 = 0.1$, con la diferencia de que se usaron las viscosidades de $\nu = 0.05$, $\nu = 0.083$ y $\nu = 0.15$.

En la Figura 5.8 se observa el comportamiento en la dinámica del fluido al variar las viscosidades, además de como se van generando pequeños vórtices al aumentar la viscosidad en las esquinas inferiores derechas, formándose también en la esquina inferior izquierda.

- Para el caso de tres dimensiones se tomó únicamente un caso, una malla de $N_x = N_y = 100$ puntos y $N_z = 10$ puntos, la placa superior se consideró a

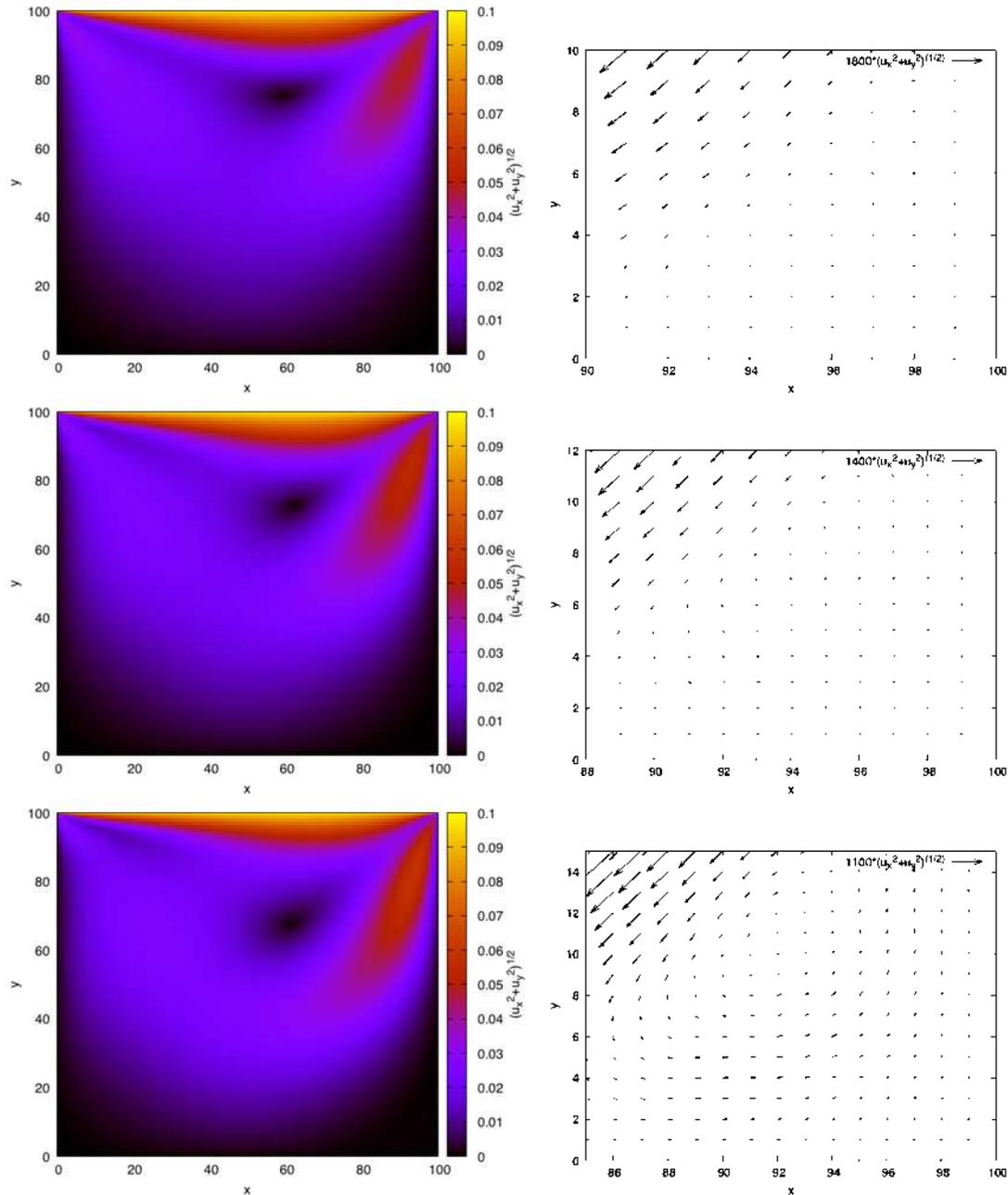


Figura 5.8: Flujo de Couette en una cavidad cuadrada. Las viscosidades que corresponden a cada gráfica corresponden a $\nu = 0.05$, $\nu = 0.083$ y $\nu = 0.15$ de arriba a abajo, del lado izquierdo el campo de velocidades en la esquina inferior derecha de cada una, multiplicadas por un valor de 1100, 1400 y 1800 respectivamente.

una velocidad constante de magnitud $u_0 = 0.1$ en la dirección x , y viscosidad de $\nu = 0.15$. Se realizaron dos cortes, unos en el eje z y otro en el eje x para observar bien el comportamiento. En la Figura 5.9 se observa el comportamiento similar al que es en dos dimensiones, pero no es necesario para formar más vórtices que

el principal.

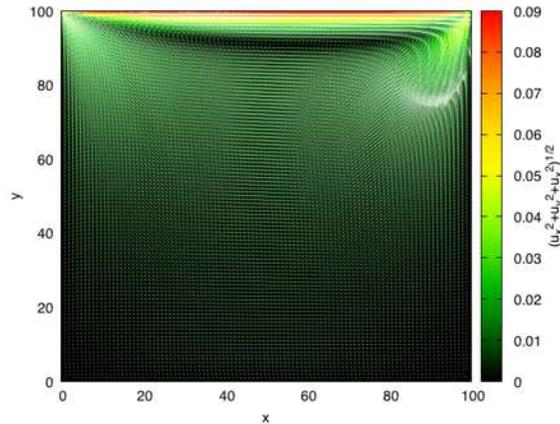


Figura 5.9: Corte en el plano $z = (z_{max} + z_{min})/2$ para el flujo de Couette en una cavidad en tres dimensiones. La viscosidad es del valor de $\nu = 0.15$ y a un tiempo $t = 4000$

5.1.4. Flujo de Poiseuille

Considérese ahora un fluido entre dos placas paralelas separadas a una distancia d , con las placas fijas sin movimiento, libre de fuerzas, pero con un gradiente de presión constante. La solución a la ecuación de Navier-Stokes (2.14) es tal que el perfil de velocidades está dado por la ecuación:

$$u_x(y) = -\frac{1}{2\eta} \frac{dp}{dx} y(y-d) \quad (5.6)$$

donde dp/dx corresponde al gradiente de presión constante, η es la viscosidad cinemática, relacionada con la viscosidad de bulto como $\eta = \rho\nu$, dicho perfil de velocidad se muestra en la Figura 5.10 y se le conoce como flujo de Poiseuille.

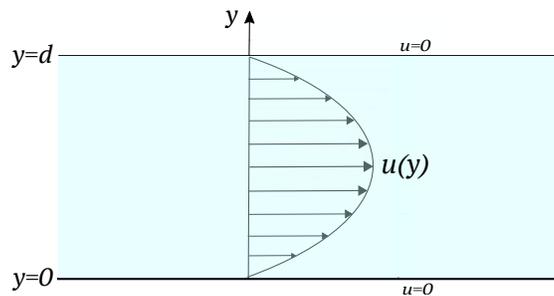


Figura 5.10: Flujo de Poiseuille

Para resolver numéricamente el flujo de Poiseuille se consideran dos tapas paralelas fijas, para este caso se toman las tapas inferior y superior. Para las tapas izquierda y derecha se consideran con entrada y salida de flujo dado un gradiente de presión constante, y para ello se emplean las condiciones de frontera de Zou-He.

Este problema se resolvió únicamente en dos dimensiones. Para realizarlo en tres dimensiones era necesario un análisis más exhaustivo en las fronteras en las cuáles era usado el gradiente de presión. A continuación los resultados numéricos y los parámetros usados:

- Se emplearon condiciones de frontera de rebote tanto para la tapa superior como para la inferior, donde ambas tapas se mantienen fijas. Para las tapas izquierda y derecha existe un gradiente de presión por lo que se usan condiciones tipo Zou-He, se usaron dos diferentes viscosidades $\nu = 0.143$ y $\nu = 0.1$ en una malla de $N_x = 50$ y $N_y = 30$ puntos.

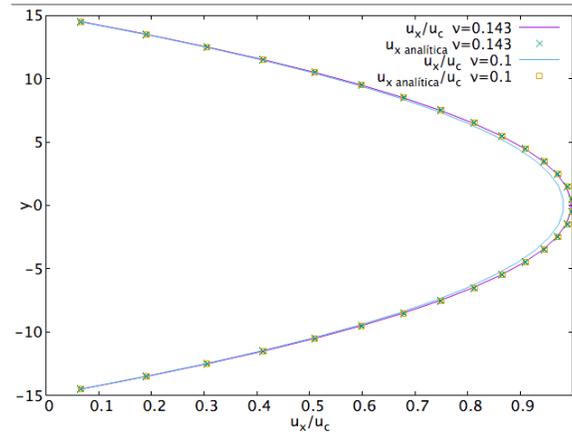


Figura 5.11: Perfil de velocidades del flujo de Poiseuille. Se obtuvo para una malla de 50×30 puntos. A viscosidades de $\nu = 0.143$ y $\nu = 0.1$.

En la Figura 5.11 se observa la gráfica obtenida por los dos diferentes datos obtenidos para dos diferentes tiempos de relajación. De acuerdo con la literatura el método no funciona perfectamente para diferentes tiempos de relajación o viscosidades, el que más empata es del valor $\tau = 0.143$, ya que tal como puede observarse la solución analítica depende de esta. Así cambiando el valor del tiempo de relajación, se observa un retraso en el perfil de velocidades al usar una viscosidad más pequeña. Esto como ya está documentado y se observa en los datos obtenidos, garantiza que el código numérico está trabajando como se esperaba.

5.2. Magnetohidrodinámica

Ahora que ya se obtuvieron resultados aceptables en la parte de hidrodinámica, es hora de llevar a cabo los ajustes necesarios para implementar el código de Lattice Boltzmann que permita resolver las ecuaciones de la magnetohidrodinámica.

5.2.1. Flujo de Hartmann en dos dimensiones

Existen algunas soluciones analíticas a las ecuaciones de la magnetohidrodinámica, una de ellas es suponer que se tienen dos tapas paralelas separadas a una distancia $2L$ sobre el eje x , entre ellas existe un flujo hidrodinámico en la dirección y debido a la existencia de una fuerza F constante en esa dirección (dirección y). Además se induce un campo magnético constante en la dirección x , $\mathbf{B} = (B_0, 0, 0)$. El resultado de resolver la ecuación de Navier-Stokes con la fuerza de Lorentz es:

$$\mathbf{u} = (0, u(x), 0) \quad \text{y} \quad \mathbf{B} = (B_0, B(x), 0) \quad (5.7)$$

con

$$u(x) = \frac{FL}{B_0 \tanh H} \sqrt{\frac{\eta}{\rho_0 \nu}} \left(1 - \frac{\cosh Hx/L}{\cosh H} \right), \quad (5.8)$$

$$B(x) = \frac{FL}{B_0} \left(\frac{\sinh Hx/L}{\sinh H} - \frac{x}{L} \right) \quad (5.9)$$

El perfil de velocidades y el de campo magnético es tal como se muestra en la Figura 5.12 y es conocido como flujo de Hartmann. De acuerdo con este problema, se espera que concuerden con las soluciones del método de Lattice Boltzmann dadas las mismas condiciones iniciales para obtener dicho flujo.

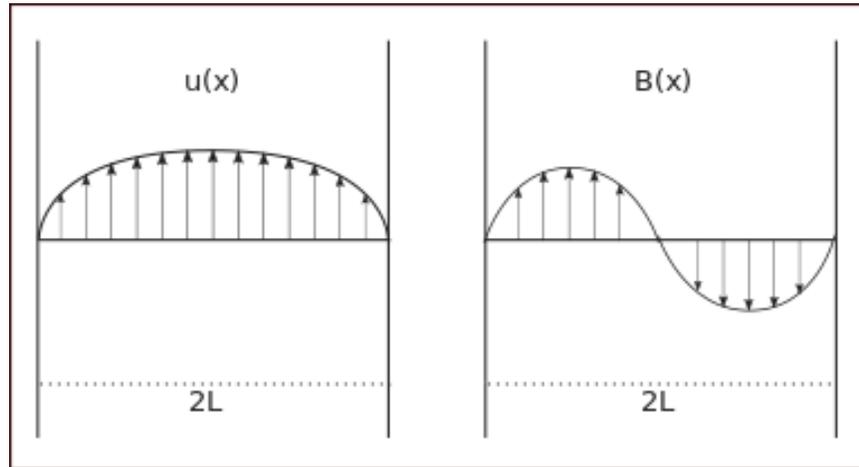


Figura 5.12: Perfil de velocidad y campo magnético en el flujo de Hartmann.

Se utilizan los siguientes parámetros:

- En dos dimensiones, para el caso del fluido se emplean para las tapas izquierda y derecha condiciones de frontera de rebote, con las tapas fijas en el fluido. Para las tapas superior e inferior se emplea condiciones de frontera periódicas tanto para el fluido como para el campo magnético. Para el campo magnético se mencionó en el capítulo de magnetohidrodinámica que no es nada simple debido a las propiedades del campo magnético. Para este problema y por como

se comporta la solución analítica, el campo en la dirección y es cero por lo que se fuerza a que sea así en las tapas izquierda y derecha, y que se mantenga como B_0 en la dirección x .

Una parte muy importante de este problema fue el hecho de que se empleó una fuerza en lugar de un gradiente de presión, lo que resultó en una modificación a la función de distribución en el equilibrio como

$$f_{\alpha}^{eq} = \omega_{\alpha} \rho \left[1 + \frac{(\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] + \frac{1}{2c_s^4} \omega_{\alpha} \left[\frac{1}{3} |B_{\alpha}|^2 |c_{\alpha}|^2 - (\mathbf{c}_{\alpha} \cdot \mathbf{B}_{\alpha})^2 \right] - \frac{\omega_{\alpha}}{c_s^4} F x c_{\alpha x} c_{\alpha y} \quad (5.10)$$

esto si se observa al realizar los cálculos de los momentos macroscópicos mantiene la densidad constante, sin embargo para el segundo momento si hay una variación en la velocidad debida a la variación de x .

Los resultados son los que se obtienen en las gráficas de la Figura (5.13). Para todas ellas se usaron mallas de $N_y = 50$ y $N_x = 60$ puntos, y se hicieron diferentes variaciones tanto en la intensidad del campo magnético B_0 , así como en las viscosidades y las resistividades para encontrar las variaciones en las cuáles el código funciona mejor.

Con respecto a lo anterior se consideran como condiciones iniciales para la velocidad $\mathbf{u} = (0, 0, 0)$ y para el campo magnético $\mathbf{B} = (B_0, 0, 0)$

En negro $B_0 = 0.01$, en rojo $B_0 = 0.05$ y en azul $B_0 = 0.1$. Posteriormente se varió el tiempo de relajación tanto el hidrodinámico como el magnético, se tomaron tres diferentes valores $\tau = \tau_m = 0.57$, $\tau = \tau_m = 0.7$ y $\tau = \tau_m = 0.83$, de arriba abajo respectivamente. Obsérvese que conforme el valor del B_0 aumenta, se obtienen perfiles más pequeños tanto en la velocidad como en el campo magnético.

El valor en el que se obtienen mejores resultados es en el de $B_0 = 0.1$ y para valores del número de Hartmann hasta de 130 con dicho valor.

El cálculo de la corriente y la vorticidad concuerda con los datos obtenidos para generar la dinámica mostrada. Por otro lado la divergencia del campo magnético, se mantiene cercana a cero $\nabla \cdot \mathbf{B} \sim 10^{-4}$.

5.2.2. Vórtices de Orszag-Tang en dos dimensiones

Para los vórtices de Orszag-Tang se consideran las siguientes condiciones iniciales para la velocidad y el campo magnético:

$$\mathbf{u} = u_0 (-\sin(k_y y), \sin(k_x x)), \quad (5.11)$$

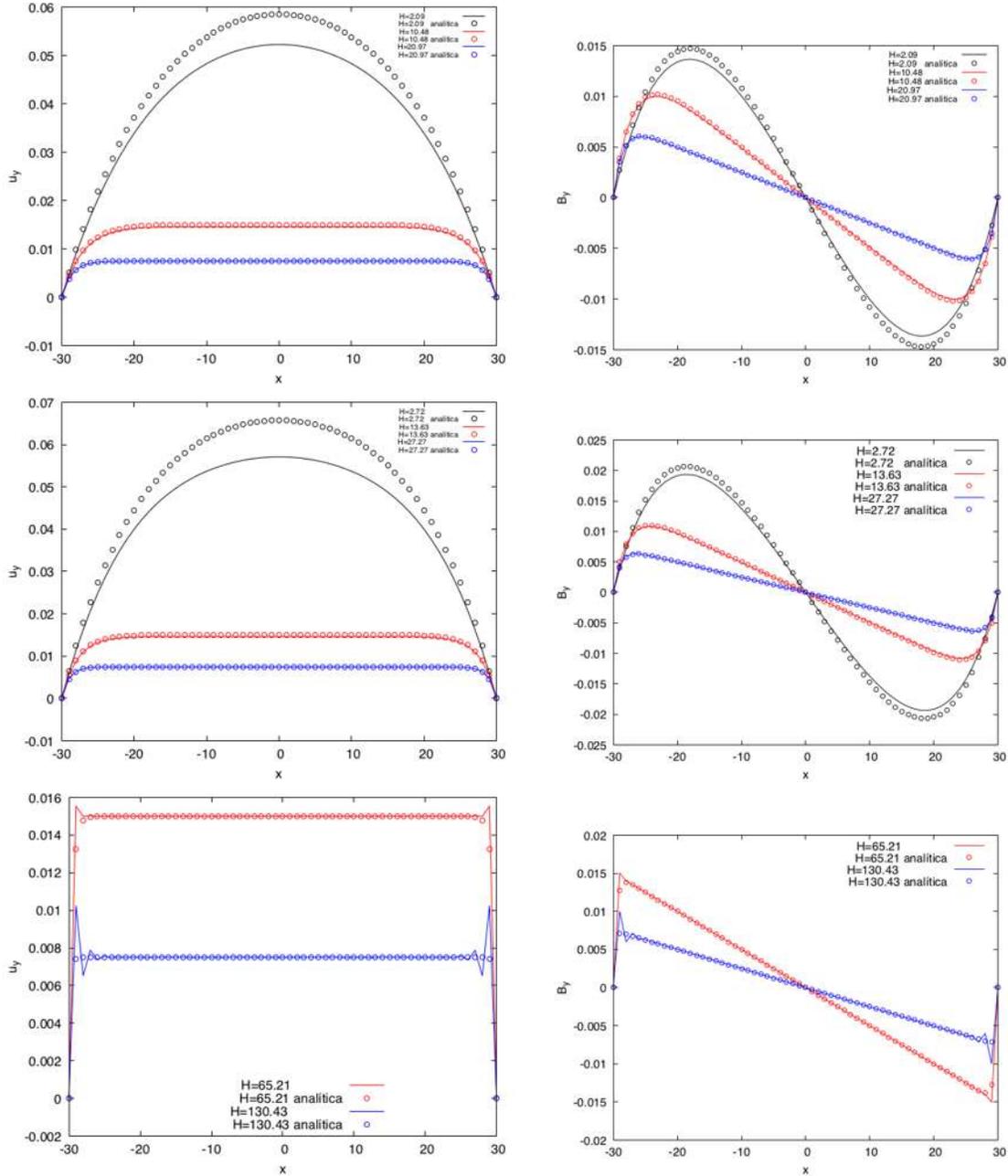


Figura 5.13: Flujo de Hartmann

$$\mathbf{B} = B_0(\sin(k_y y), -\sin(2k_x x)) \quad (5.12)$$

con $k_x = 2\pi/x_{max}$ y $k_y = 2\pi/y_{max}$. Dadas estas condiciones iniciales tomando nuevamente diferentes valores para los parámetros de τ y τ_m se observa un tipo de comportamiento muy similar pero a diferentes magnitudes y a tiempos desfazados.

- Se muestra en la Figura 5.14 los datos correspondientes para $\tau = \tau_m = 0.57$ y con $u_0 = B_0 = 0.1$, la malla es de $N_x = N_y = 160$ puntos.

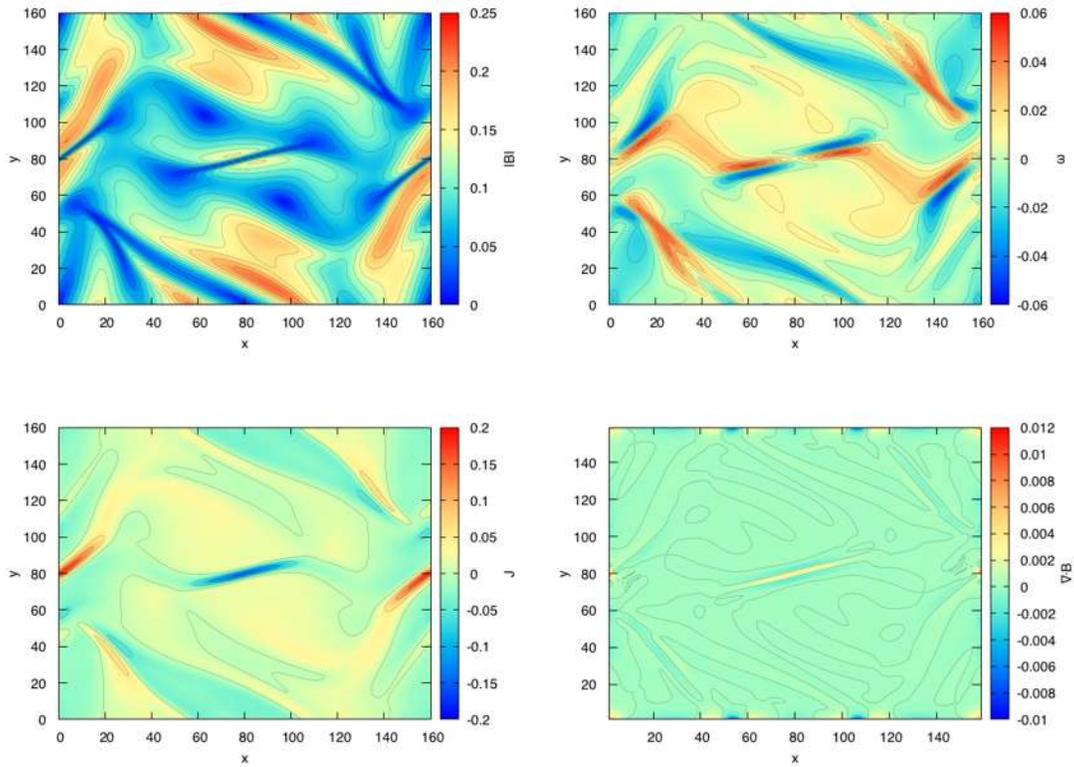


Figura 5.14: Magnitud del campo magnético, vorticidad ω , corriente \mathbf{J} y divergencia del campo magnético para el vórtice de Orzag Tang en $t=600$.

De las graficas en la Figura 5.14, se tiene arriba a la izquierda el perfil de la magnitud del campo magnético, arriba a la derecha la vorticidad $\omega = \nabla \times \mathbf{u}$, abajo a la izquierda la corriente $\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{B}$ y por último abajo a la derecha se tiene una presentación de la divergencia del campo magnético $\nabla \cdot \mathbf{B}$.

Que siendo comparado con el mismo problema en otros trabajos, se obtiene el perfil deseado del problema.

Algo importante a notar es que la divergencia del campo magnético no es completamente cero, esto debido a los errores numéricos que aparecen en la resolución del problema. Sin embargo, estos valores son pequeños y se pueden controlar a través de mejores resoluciones.

5.2.3. Flujo de Hartmann en tres dimensiones

Se hace ahora la extensión del problema a tres dimensiones, donde se considerará una tubería tal que las tapas superior ($y = y_{max}$) e inferior ($y = y_{min}$) serán por las

cuales el fluido tendrá su flujo. Las demás se considerarán como paredes completamente estáticas.

- Considerando la malla con $N_x = N_z = 40$ puntos y $N_y = 20$, Se induce un campo magnético constante B_0 en la dirección x , tal que las condiciones iniciales del sistema son $\mathbf{B} = (B_0, 0, 0)$ para el campo magnético, y no hay ningún tipo de velocidad inicialmente, $\mathbf{u} = (0, 0, 0)$.

El hecho de que exista un campo magnético y de considerar una fuerza que empuje al fluido en la dirección y , se tendrán finalmente los perfiles de la Figura 5.15, tanto para la componente B_y del campo magnético así mismo la componente de la velocidad V_y .

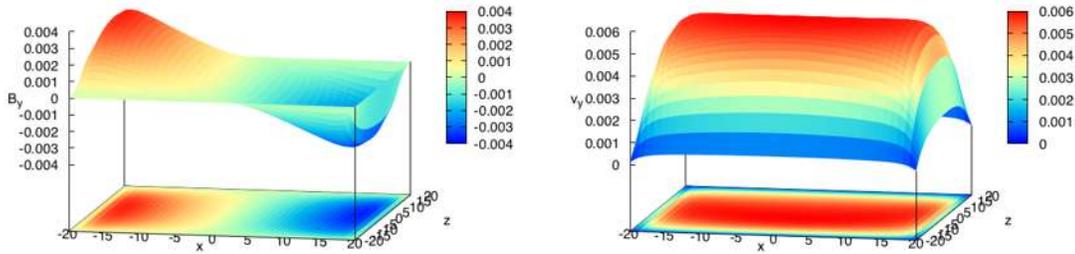


Figura 5.15: Corte del flujo de Hartmann en tres dimensiones sobre el plano $x - z$ a una altura $y = (y_{max} + y_{min})/2$.

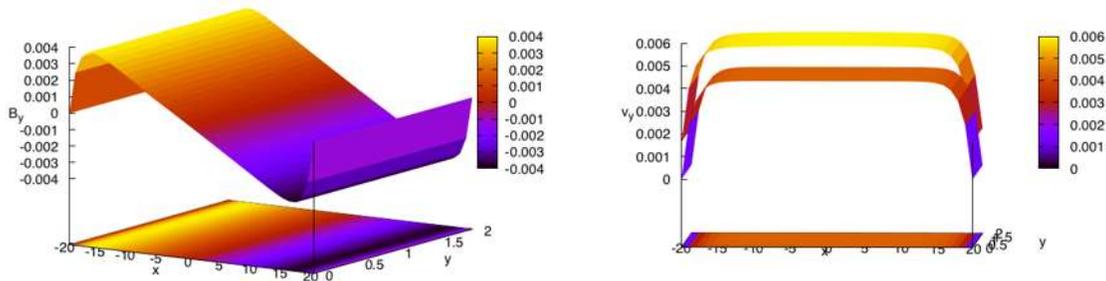


Figura 5.16: Corte del flujo de Hartmann en tres dimensiones sobre el plano $x - z$ a una altura $y = (y_{max} + y_{min})/2$.

Por otro lado si se realiza un corte sobre el plano $x - y$ se esperaría encontrar la magnitud de la componente de la velocidad v_y y del campo magnético B_y para compararse con los perfiles analíticos descritos en el problema en dos dimensiones y compararlos. En la Figura 5.16 se observa como el campo magnético empata de manera perfecta con el resultado esperado. Sin embargo, existe un desfase en la solución analítica de la velocidad.

5.2.4. Flujo de Hartmann en tres dimensiones con número de Prandtl magnético bajo

Todo lo anterior se ha resuelto para problemas donde los números de Reynolds, magnético e hidrodinámico son alrededor del mismo orden. Sin embargo, en la naturaleza no siempre es el caso. Hay fluidos en los cuales los números de Reynolds ya no son del mismo orden, si no que difieren por varios ordenes de magnitud, para ello se hará uso del número de Prandtl magnético:

$$Pr_m = \frac{Re_m}{Re} \quad (5.13)$$

donde el valor Re_m corresponde al número de Reynolds magnético y Re al número de Reynolds en el fluido, modelar el núcleo de la Tierra corresponde tomar como valores del número de Prandtl del orden de $\sim 10^{-6}$ o en problemas típicos de dinamos en laboratorios a valores del orden de $\sim 10^{-2}$ [15].

Para poder resolver dichos problemas no es suficiente con el código que se tiene, ya que ocurren problemas al tomar valores de τ y τ_m con una gran diferencia capaz de llegar a diferencias de un orden $\sim 10^{-7}$ entre los números de Reynolds, entonces de recurre a tomar un valor efectivo en el número de Prandtl magnético, es necesario modifica la forma en la que se han escrito las ecuaciones, comenzando con la ecuación de inducción magnética [16].

Se reescribe la ecuación (5.14) introduciendo un parámetro $0 < \gamma_m \leq 1$, que recibe el nombre de parámetro de preconditionamiento

$$g_{\beta j}^{eq} = \bar{\omega}_\beta \left[B_j + \frac{\Xi_{\beta j}}{c_{sm}^2} \left(\frac{u_i B_j - B_i u_j}{\gamma_m} \right) \right] \quad (5.14)$$

existe una variación además en el tiempo de relajación magnético, de manera que se tiene ahora un tiempo de relajación preconditionado

$$\eta_m = \gamma_m c_{sm}^2 \left(\tau_m - \frac{1}{2} \right) \quad (5.15)$$

realizando el análisis de Chapman-Enskog para estas nuevas ecuaciones reacondionadas se llega a una forma de la ecuación de inducción

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \frac{1}{\gamma_m} \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{\gamma_m} \eta \nabla^2 \mathbf{B} \quad (5.16)$$

Tomando en cuenta la adimensionalización de dicha ecuación se tiene que

$$\gamma_m \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{Re_m} \nabla^2 \mathbf{B} \quad (5.17)$$

sin embargo, como se mencionó anteriormente, particularmente en los metales líquidos el número de Prandtl tiende a ser muy pequeño. Es decir, que el número de Reynolds es mucho mayor que el número de Reynolds magnético y por ende $Pr_m = Re_m/Re = \nu/\eta_m \ll 1$, esto se reduce a tomar valores de η_m más pequeños aproximando τ_m a 0.5. Pero a valores muy cercanos a 0.5 existe inestabilidad numérica.

Dicha situación se puede controlar asumiendo que en el caso estático, se tiene la ecuación

$$\nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{Re_m} \nabla^2 \mathbf{B} \quad (5.18)$$

esta ecuación es escalada por un factor χ , para obtener un valor del número de Reynolds efectivo, $Re_m = \chi Re_m$, resultando en un número de Prandtl efectivo $Pr_{m,eff} = \chi Pr_m$

$$\chi \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{Re_m} \nabla^2 \mathbf{B} \quad (5.19)$$

así la ecuación preconditionada es tal que

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \frac{\chi}{\gamma_m} \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{\gamma_m} \eta_m \nabla^2 \mathbf{B}. \quad (5.20)$$

Para recuperar nuevamente las ecuaciones de forma discretizada es necesario cambiar la ecuación (5.14) por

$$g_{\beta j}^{eq} = \bar{\omega}_\beta \left[B_j + \frac{\Xi_{\beta j}}{c_{sm}^2} \frac{\chi}{\gamma_m} (u_i B_j - B_i u_j) \right] \quad (5.21)$$

- Se resuelve este problema, usando una malla de $N_x = N_z = 40$ y $N_y = 20$, se usan como condiciones iniciales $\mathbf{B} = (B_0, 0, 0)$ y $\mathbf{u} = (0, 0, 0)$. $\gamma_m = 1$ y los valores $\tau = \tau_m = 0.83$. El valor efectivo del número de Prandtl se toma usando $\chi = 10^{-7}$ y el valor de $\gamma_m = 1$. De esto se obtienen los siguientes resultados.

Se puede apreciar como el valor del campo magnético es del orden de $\sim 10^{-9}$, esto debido a que en la ecuación (5.20) el segundo término contribuye muy poco y no hay cambios grandes por la presencia de la velocidad. El Re_m efectivo es muy pequeño, lo que se puede traducir en una resistividad muy grande o conductividad pequeña.

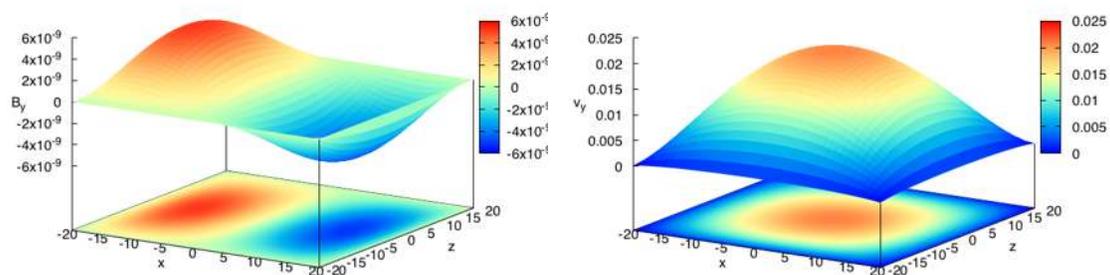


Figura 5.17: Flujo de Hartmann en tres dimensiones con un número de Prandtl del orden de $\sim 10^{-7}$.

Capítulo 6

Conclusiones

Se implementó en FORTRAN un código numérico para implementar el método de Lattice Boltzmann en problemas de hidrodinámica y de magnetohidrodinámica, en dos y tres dimensiones. De los problemas de hidrodinámica se resolvieron el flujo de Poiseuille en dos dimensiones y el flujo de Couette, los vórtices de Green-Taylor y el flujo de Couette en una caja cuadrada en dos y tres dimensiones. De acuerdo resultados obtenidos garantizó que el código funciona y el criterio de convergencia que se debe. Posteriormente se resuelven por medio del método extendido a magnetohidrodinámica el problema de los vórtices de Orszag-Tang en dos dimensiones y el flujo de Hartmann en dos y tres dimensiones.

Además se presentó una forma de modificar las ecuaciones de la inducción magnética con el propósito de usar diferencias grandes entre números de Reynolds y Reynolds magnético manteniendo la estabilidad del código, útiles para trabajar con problemas con números de Prandtl bajos.

Sin embargo, las condiciones del campo magnético se mantienen forzadas a ser el resultado que se espera, esto se puede arreglar modificando la geometría de la malla de manera que se pueda extender la malla para analizar el comportamiento del campo magnético en el exterior de las paredes. Otras modificaciones posibles para no solo usar un número de Prandtl efectivo son la implementación de múltiples tiempos de relajación, y así permitir el uso de números de Reynolds altos .

Muchos de los otros trabajos en Lattice Boltzmann para magnetohidrodinámica recurren a una forma distinta de calcular la propagación y la colisión .

Como posibles aplicaciones a problemas que ya incluyan sistemas mas complejos son las mantas térmicas que rodean los aceleradores de fusión y en las cuáles circula metal líquido, las cuáles presentan ya no solo un tipo de fluido si no que se presentan en capas. El transporte de medicamentos en la sangre y aumentar su eficiencia, etc.

Apéndice A

Polinomios de Hermite

Los polinomios de Hermite se pueden contruir a partir de una función de peso

$$\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \quad (\text{A.1})$$

así a n-orden, los polinomios de hermite se contruyen como

$$H^{(n)}(x) = (-1)^n \frac{1}{\omega(x)} \frac{d^n}{dx^n} \omega(x) \quad (\text{A.2})$$

donde n es entero. Por ejemplo los primeros seis polinomios en una dimensión serían

$$\begin{aligned} H^{(0)}(x) &= 1, & H^{(1)}(x) &= x \\ H^{(2)}(x) &= x^2 - 1, & H^{(3)}(x) &= x^3 - 3x \\ H^{(4)}(x) &= x^4 - 6x^2 + 3, & H^{(5)}(x) &= x^5 - 10x^3 + 15x. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Si uno se extiende a d dimensiones, se tiene que

$$\mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}) = (-1)^n \frac{1}{\omega(\mathbf{x})} \nabla^{(n)} \omega(\mathbf{x}), \quad \omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{-x^2/2} \quad (\text{A.4})$$

con $\mathbf{H}^{(n)}$ y $\nabla^{(n)}$ tensores de rango n. Sus componentes se pueden escribir como $H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}$ y $\nabla_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}$ donde se tiene n indices corriendo de 1 a d.

A.1. Ortogonalidad y expansión en serie

En una dimensión los polinomios son ortogonales con respecto a $\omega(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(x) H^{(n)}(x) H^{(m)}(x) dx = n! \delta_{nm}^{(2)} \quad (\text{A.5})$$

Llevandolo a d dimensiones se tiene que

$$\int \omega(\mathbf{x}) \mathbf{H}_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{x}) \mathbf{H}_{\beta}^{(m)}(\mathbf{x}) d^d x = \prod_{i=1}^d n_i! \delta_{nm}^{(2)} \delta_{\alpha\beta}^{(n+m)} \quad (\text{A.6})$$

En una dimensión los polinomios de hermite forman una base completa en los \mathbb{R} , de manera que una función continua bien comportada $f(x) \in \mathbb{R}$ se puede representar en series de polinomios de Hermite

$$f(x) = \omega(x) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^{(n)} H^{(n)}(x), \quad a^{(n)} = \int f(x) H^{(n)}(x) dx \quad (\text{A.7})$$

y en d dimensiones

$$f(\mathbf{x}) = \omega(\mathbf{x}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)} \cdot \mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{a}^{(n)} = \int f(\mathbf{x}) \mathbf{H}^{(n)}(\mathbf{x}) d^d x \quad (\text{A.8})$$

Apéndice B

Cuadratura de Gauss-Hermite

Una propiedad muy útil de los polinomios de Hermite para integraciones numéricas es la regla de la cuadratura de Gauss-Hermite. La integral de una función $f(x)$ multiplicada por la función de peso $\omega(x)$ se puede aproximar por una serie finita de funciones valuadas en puntos x_i , llamados absisas, es decir,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(x)f(x)dx \approx \sum_{i=1}^q w_i f(x_i). \quad (\text{B.1})$$

Eliendo x_i como las n raíces de los polinomios de Hermite a orden n , $H^{(n)}(x_i) = 0$, y $q = n$, se garantiza que cualquier polinomio $P^{(N)}(x)$ de orden $N = 2n - 1$ se puede integrar exactamente

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(x)P^{(N)}(x)dx \approx \sum_{i=1}^n w_i P^{(N)}(x_i) \quad (\text{B.2})$$

con los pesos determinados por

$$w_i = \frac{n!}{(nH^{(n-1)}(x_i))^2}. \quad (\text{B.3})$$

Apéndice C

Condiciones de Frontera

Condiciones de Frontera periódicas en el modelo D3Q27

Bajo el mismo procedimiento para D2Q9 se tiene que para las condiciones periódicas son, añadiendo las tapas de enfrente $z = z_{max}$ con f_{α}^{fren} y atrás $z = z_{min}$ con f_{α}^{atras} :

Tapa Izquierda

$$f_1^{izq} = f_1^{der}$$

$$f_7^{izq} = f_7^{der}$$

$$f_9^{izq} = f_9^{der}$$

$$f_{13}^{izq} = f_{13}^{der}$$

$$f_{15}^{izq} = f_{15}^{der}$$

$$f_{19}^{izq} = f_{19}^{der}$$

$$f_{21}^{izq} = f_{21}^{der}$$

$$f_{23}^{izq} = f_{23}^{der}$$

$$f_{26}^{izq} = f_{26}^{der}$$

Tapa Derecha

$$f_2^{der} = f_2^{izq}$$

$$f_8^{der} = f_8^{izq}$$

$$f_{10}^{der} = f_{10}^{izq}$$

$$f_{14}^{der} = f_{14}^{izq}$$

$$f_{16}^{der} = f_{16}^{izq}$$

$$f_{20}^{der} = f_{20}^{izq}$$

$$f_{22}^{der} = f_{22}^{izq}$$

$$f_{24}^{der} = f_{24}^{izq}$$

$$f_{25}^{der} = f_{25}^{izq}$$

se sigue la misma logica para las otras tapas, de tal manera que las funciones de distribución para cada una de ellas son

Tapa Norte : $f_4, f_8, f_{12}, f_{13}, f_{18}, f_{20}, f_{22}, f_{23}$ y f_{26}

Tapa Sur : $f_3, f_7, f_{11}, f_{14}, f_{17}, f_{19}, f_{21}, f_{24}$ y f_{25}

Tapa Enfrente : $f_6, f_{10}, f_{12}, f_{15}, f_{17}, f_{20}, f_{21}, f_{24}$ y f_{26}

Tapa Atrás : $f_5, f_9, f_{11}, f_{16}, f_{18}, f_{29}, f_{22}, f_{23}$ y f_{25}

Para el modelo D2Q19 se presentan las mismas condiciones por las propiedades de la malla desde f_0 hasta f_{18} , las demás simplemente no se toman en cuenta.

Condiciones de Frontera de Rebote en el modelos D3Q27 Considerando lo mismo que se realizó para D2Q9 se tiene que usando nuevamente que la colisión en las fronteras

$$\bar{f}_\alpha(\mathbf{x}_F, t) = f_\alpha(\mathbf{x}_F, t) - \frac{1}{7}(f_\alpha(\mathbf{x}_F, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}_F, t)) \quad (\text{C.1})$$

y para la propagación en las fronteras

Tapa Izquierda

$$\begin{aligned} f_1^{izq}(t + \Delta t) &= f_2^{der}(t) \\ f_7^{izq}(t + \Delta t) &= f_8^{der}(t) \\ f_9^{izq}(t + \Delta t) &= f_{10}^{der}(t) \\ f_{13}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{14}^{der}(t) \\ f_{15}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{16}^{der}(t) \\ f_{19}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{20}^{der}(t) \\ f_{21}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{22}^{der}(t) \\ f_{23}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{24}^{der}(t) \\ f_{26}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{25}^{der}(t) \end{aligned}$$

Tapa Derecha

$$\begin{aligned} f_2^{der}(t + \Delta t) &= f_1^{izq}(t) \\ f_8^{der}(t + \Delta t) &= f_7^{izq}(t) \\ f_{10}^{der}(t + \Delta t) &= f_9^{izq}(t) \\ f_{14}^{der}(t + \Delta t) &= f_{13}^{izq}(t) \\ f_{16}^{der}(t + \Delta t) &= f_{15}^{izq}(t) \\ f_{20}^{der}(t + \Delta t) &= f_{19}^{izq}(t) \\ f_{22}^{der}(t + \Delta t) &= f_{21}^{izq}(t) \\ f_{24}^{der}(t + \Delta t) &= f_{23}^{izq}(t) \\ f_{25}^{der}(t + \Delta t) &= f_{26}^{izq}(t) \end{aligned}$$

Tapa Norte

$$\begin{aligned} f_4^{izq}(t + \Delta t) &= f_3^{der}(t) \\ f_8^{izq}(t + \Delta t) &= f_7^{der}(t) \\ f_{12}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{11}^{der}(t) \\ f_{13}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{14}^{der}(t) \\ f_{18}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{17}^{der}(t) \\ f_{20}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{19}^{der}(t) \\ f_{22}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{21}^{der}(t) \\ f_{23}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{24}^{der}(t) \\ f_{26}^{izq}(t + \Delta t) &= f_{25}^{der}(t) \end{aligned}$$

Tapa Sur

$$\begin{aligned} f_3^{der}(t + \Delta t) &= f_4^{izq}(t) \\ f_7^{der}(t + \Delta t) &= f_8^{izq}(t) \\ f_{11}^{der}(t + \Delta t) &= f_{12}^{izq}(t) \\ f_{14}^{der}(t + \Delta t) &= f_{13}^{izq}(t) \\ f_{17}^{der}(t + \Delta t) &= f_{18}^{izq}(t) \\ f_{19}^{der}(t + \Delta t) &= f_{20}^{izq}(t) \\ f_{21}^{der}(t + \Delta t) &= f_{22}^{izq}(t) \\ f_{24}^{der}(t + \Delta t) &= f_{23}^{izq}(t) \\ f_{25}^{der}(t + \Delta t) &= f_{26}^{izq}(t) \end{aligned}$$

Tapa Enfrente

$$f_6^{izq}(t + \Delta t) = f_5^{der}(t)$$

$$f_{10}^{izq}(t + \Delta t) = f_9^{der}(t)$$

$$f_{12}^{izq}(t + \Delta t) = f_{11}^{der}(t)$$

$$f_{15}^{izq}(t + \Delta t) = f_{16}^{der}(t)$$

$$f_{17}^{izq}(t + \Delta t) = f_{18}^{der}(t)$$

$$f_{20}^{izq}(t + \Delta t) = f_{19}^{der}(t)$$

$$f_{21}^{izq}(t + \Delta t) = f_{22}^{der}(t)$$

$$f_{24}^{izq}(t + \Delta t) = f_{23}^{der}(t)$$

$$f_{26}^{izq}(t + \Delta t) = f_{25}^{der}(t)$$

Tapa Atrás

$$f_5^{der}(t + \Delta t) = f_6^{izq}(t)$$

$$f_9^{der}(t + \Delta t) = f_{10}^{izq}(t)$$

$$f_{11}^{der}(t + \Delta t) = f_{12}^{izq}(t)$$

$$f_{16}^{der}(t + \Delta t) = f_{15}^{izq}(t)$$

$$f_{18}^{der}(t + \Delta t) = f_{17}^{izq}(t)$$

$$f_{19}^{der}(t + \Delta t) = f_{20}^{izq}(t)$$

$$f_{22}^{der}(t + \Delta t) = f_{21}^{izq}(t)$$

$$f_{23}^{der}(t + \Delta t) = f_{24}^{izq}(t)$$

$$f_{25}^{der}(t + \Delta t) = f_{26}^{izq}(t)$$

Apéndice D

Análisis de Chapman-Enskog

D.1. Análisis para la función de distribución f

El propósito del análisis de Chapman-Enskog es el de recuperar las ecuaciones de Navier-Stokes por medio de expansiones multiescala de la función de distribución, y del espacio y tiempo. Esto se describe a continuación de manera muy compacta y breve:

Se hace una expansión de la función de distribución en el equilibrio, alrededor de el numero de Knudsen, que se llamará ϵ , tal que,

$$f_\alpha = f_\alpha^{(0)} + \epsilon f_\alpha^{(1)} + \epsilon^2 f_\alpha^{(2)} + \dots \quad (\text{D.1})$$

donde el primer término del lado derecho $f_\alpha^{(0)}$ corresponde a la función de distribución en el equilibrio f^{eq} .

Por otro lado

$$\frac{\partial}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^{(0)} + \epsilon \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^{(1)} + \epsilon^2 \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^{(2)} + \dots, \quad (\text{D.2})$$

sin embargo, por herarquia de escalas y por evitar problemas al recuperar las variables macroscópicas se tiene que las expansiones apropiadas en el tiempo y el espacio:

$$\Delta t \partial_t f_\alpha = \Delta t (\epsilon \partial_t^{(1)} f_\alpha + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} f_\alpha + \dots), \quad \Delta t \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = \Delta t (\epsilon \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1) f_\alpha \quad (\text{D.3})$$

a estas expansiones se les conoce como expansiones a multiples escalas.

Reescribiendo nuevamente la ecuación de Boltzmann discretizada:

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (\text{D.4})$$

se hace la expansión de $f_\alpha(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t, t + \Delta t)$ alrededor de Δt y $\boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t$, por lo que se tiene la expresión

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Delta t^n}{n!} D_{t\alpha}^{(n)} f_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (\text{D.5})$$

con $D_{t\alpha} \equiv (\partial_t + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla)$, de esta manera, y con $f(\mathbf{x}, t) = f$ se tiene que

$$f_\alpha + \Delta t(\partial_t + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla)f_\alpha + \frac{\Delta t^2}{2}(\partial_t + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla)^2 f_\alpha + \mathcal{O}(\Delta t^3) - f_\alpha = -\frac{\Delta t}{\tau}(f_\alpha - f_\alpha^{eq}), \quad (\text{D.6})$$

donde los términos f se cancelan. Sustituyendo (D.3) en la ecuación anterior se tiene que, solo hasta órdenes de $\mathcal{O}(\epsilon^2)$,

$$\begin{aligned} \Delta t(\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \epsilon \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1) f_\alpha + \frac{\Delta t^2}{2}(\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \epsilon \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1)^2 f_\alpha \\ = -\frac{\Delta t}{\tau}(f_\alpha - f_\alpha^{eq}). \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Sustituyendo ahora la ecuación (D.1) en la ecuación anterior se tiene que

$$\begin{aligned} \Delta t(\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \epsilon \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1)(f_\alpha^{(0)} + \epsilon f_\alpha^{(1)}) \\ + \frac{\Delta t^2}{2}(\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \epsilon \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1)^2(f_\alpha^{(0)} + \epsilon f_\alpha^{(1)}) = -\frac{\Delta t}{\tau}(\epsilon f_\alpha^{(1)} + \epsilon^2 f_\alpha^{(2)}) \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Recordando que $\sum_\alpha f_\alpha = \sum_\alpha f_\alpha^{eq} = \rho$, $\sum_\alpha \boldsymbol{\xi}_\alpha f_\alpha = \sum_\alpha \boldsymbol{\xi}_\alpha f_\alpha^{eq} = \rho \mathbf{u}$, se tiene entonces que $\sum_\alpha f_\alpha^{(n)} = 0$ y $\sum_\alpha \boldsymbol{\xi}_\alpha f_\alpha = 0$ para $n \geq 1$.

Se tiene que para los términos de orden $\mathcal{O}(1)$, se reafirma que $f_\alpha^{(0)} = f_\alpha^{eq}$. Entoces para los siguientes órdenes:

$$\mathcal{O}(\epsilon) \quad (\partial_t^{(1)} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1) f_\alpha^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^{(1)} \quad (\text{D.9})$$

$$\mathcal{O}(\epsilon^2) \quad \partial_t^{(2)} f_\alpha^{(0)} + (\partial_t^{(1)} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1) f_\alpha^{(1)} + \frac{\Delta t}{2}(\partial_t^{(1)} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1)^2 f_\alpha^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^{(2)} \quad (\text{D.10})$$

Al multiplicar la ecuación (D.9) por $(\partial_t^{(1)} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1)$ en ambos lados, se puede modificar la ecuación (D.10) de modo que se tenga finalmente:

$$\mathcal{O}(\epsilon) \quad (\partial_t^{(1)} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1) f_\alpha^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^{(1)} \quad (\text{D.11})$$

$$\mathcal{O}(\epsilon^2) \quad \partial_t^{(2)} f_\alpha^{(0)} + (\partial_t^{(1)} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^1) \left(1 + \frac{\Delta t}{2\tau}\right) f_\alpha^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^{(2)} \quad (\text{D.12})$$

Al tomarse los momentos cero, primero y segundo de la ecuación (D.11), se llega a que

$$\partial_t^{(1)} \rho + \nabla^1 \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{D.13})$$

$$\partial_t^{(1)} (\rho \mathbf{u}) + \nabla^1 \cdot (\rho c_s^2 \mathbb{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{D.14})$$

Al tomarse el momento cero y el primero de la ecuación (D.12), se llega a que

$$\partial_t^{(2)}\rho = 0 \quad (\text{D.15})$$

$$\partial_t^{(2)}(\rho\mathbf{u}) + \nabla^1 \cdot \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) \mathbf{\Pi}^1 = 0 \quad (\text{D.16})$$

Finalmente aparecen las relaciones

$$p = c_s^2\rho, \quad \eta = \rho c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right). \quad (\text{D.17})$$

D.2. Análisis para la función de distribución \mathbf{g}

Se hace una expansión de la función de distribución en el equilibrio, un número pequeño ϵ similar a la función de distribución f , tal que,

$$\mathbf{g}_\beta = \mathbf{g}_\beta^{(0)} + \epsilon\mathbf{g}_\beta^{(1)} + \epsilon^2\mathbf{g}_\beta^{(2)} + \dots \quad (\text{D.18})$$

donde el primer término del lado derecho $f_\alpha^{(0)}$ corresponde a la función de distribución en el equilibrio f^{eq} .

Las expansiones apropiadas en el tiempo y el espacio:

$$\Delta t\partial_t\mathbf{g}_\beta = \Delta t(\epsilon\partial_t^{(1)}\mathbf{g}_\beta + \epsilon^2\partial_t^{(2)}\mathbf{g}_\beta + \dots), \quad \Delta t(\mathbf{\Xi}_\beta \cdot \nabla)\mathbf{g}_\beta = \Delta t(\epsilon\mathbf{\Xi}_\alpha \cdot \nabla^1)\mathbf{g}_\beta \quad (\text{D.19})$$

a estas expansiones se les conoce como expansiones a multiples escalas.

Reescribiendo nuevamente el similar a la ecuación de Boltzmann discretizada:

$$\mathbf{g}_\beta(\mathbf{x} + \mathbf{\Xi}_\beta\Delta t, t + \Delta t) - \mathbf{g}_\beta(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau_m}(\mathbf{g}_\beta(\mathbf{x}, t) - \mathbf{g}_\beta^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (\text{D.20})$$

se hace la expansión de $\mathbf{g}_\beta(\mathbf{x} + \mathbf{\Xi}_\beta\Delta t, t + \Delta t)$ alrededor de Δt y $\mathbf{\Xi}_\beta\Delta t$, por lo que se tiene la expresión

$$\mathbf{g}_\beta(\mathbf{x} + \mathbf{\Xi}_\beta\Delta t, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Delta t^n}{n!} D_{t\beta}^{(n)}\mathbf{g}_\beta(\mathbf{x}, t) \quad (\text{D.21})$$

con $D_{t\beta} \equiv (\partial_t + \mathbf{\Xi}_\beta \cdot \nabla)$, de esta manera, y con $\mathbf{g}_\beta(\mathbf{x}, t) = \mathbf{g}_\beta$ se tiene que

$$\mathbf{g}_\beta + \Delta t(\partial_t + \mathbf{X}\mathbf{i}_\beta \cdot \nabla)\mathbf{g}_\beta + \frac{\Delta t^2}{2}(\partial_t + \mathbf{\Xi}_\beta \cdot \nabla)^2\mathbf{g}_\beta + \mathcal{O}(\Delta t^3) - \mathbf{g}_\beta = -\frac{\Delta t}{\tau_m}(\mathbf{g}_\beta - \mathbf{g}_\beta^{eq}), \quad (\text{D.22})$$

donde los términos f se cancelan. Sustituyendo (D.19) en la ecuación anterior se tiene que, solo hasta órdenes de $\mathcal{O}(\epsilon^2)$,

$$\begin{aligned} \Delta t(\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \epsilon \Xi_\beta \cdot \nabla^1) \mathbf{g}_\beta + \frac{\Delta t^2}{2} (\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \epsilon \Xi_\beta \cdot \nabla^1)^2 \mathbf{g}_\beta \\ = -\frac{\Delta t}{\tau_m} (\mathbf{g}_\beta - \mathbf{g}_\beta^{eq}). \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

Sustituyendo ahora la ecuación (D.18) en la ecuación anterior se tiene que

$$\begin{aligned} \Delta t(\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \epsilon \Xi_\beta \cdot \nabla^1) (\mathbf{g}_\beta^{(0)} + \epsilon \mathbf{g}_\beta^{(1)}) \\ + \frac{\Delta t^2}{2} (\epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \epsilon \Xi_\beta \cdot \nabla^1)^2 (\mathbf{g}_\beta^{(0)} + \epsilon \mathbf{g}_\beta^{(1)}) = -\frac{\Delta t}{\tau_m} (\epsilon \mathbf{g}_\beta^{(1)} + \epsilon^2 \mathbf{g}_\beta^{(2)}) \end{aligned} \quad (\text{D.24})$$

Recordando que $\sum_\beta \mathbf{g}_\beta = \sum_\beta \mathbf{g}_\beta^{eq} = \mathbf{B}$, es decir, que a órdenes mayores no hay contribución al campo magnético, se tiene entonces que $\sum_\beta \mathbf{g}_\beta^{(n)} = 0$ para $n \geq 1$. Se tiene que para los términos de orden $\mathcal{O}(1)$, se reafirma que $\mathbf{g}_\beta^{(0)} = \mathbf{g}_\beta^{eq}$. Entoces bajo el mismo argumento usado en f se tiene que la forma final de las ecuaciones a órdenes $\mathcal{O}(\epsilon)$ y $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ es

$$\mathcal{O}(\epsilon) \quad (\partial_t^{(1)} + \Xi_\beta \cdot \nabla^1) \mathbf{g}_\beta^{(0)} = -\frac{1}{\tau_m} \mathbf{g}_\beta^{(1)} \quad (\text{D.25})$$

$$\mathcal{O}(\epsilon^2) \quad \partial_t^{(2)} \mathbf{g}_\beta^{(0)} + (\partial_t^{(1)} + \Xi_\beta \cdot \nabla^1) \left(1 + \frac{\Delta t}{2\tau_m} \right) \mathbf{g}_\beta^{(1)} = -\frac{1}{\tau_m} \mathbf{g}_\beta^{(2)} \quad (\text{D.26})$$

Al tomarse los momentos cero, primero de estas ecuaciones, se llega a que

$$\partial_t \mathbf{B} + \partial_i (\Lambda_{ij}^{(0)} + \epsilon \Lambda_{ij}^{(1)}) = 0 \quad (\text{D.27})$$

con

$$\Lambda_{ij}^{(n)} = \sum_\beta \Xi_{i\beta} g_{j\beta}^{(n)}. \quad (\text{D.28})$$

Con $\epsilon = 0$ se recuperan las ecuaciones de la magnetogidrodinámica ideal y eligiendo la función en el equilibrio que satisfaga los momentos $\sum_\beta \mathbf{g}_\beta = \mathbf{B}$ y $\Lambda_{ij}^{(0)} = u_i B_j - B_i u_j$, la elección más simple es:

$$g_{i\beta}^{eq} = \bar{\omega}_\beta (B_i + \Xi_{i\beta}/c_{sm}^2 (u_i B_j - B_i u_j)). \quad (\text{D.29})$$

Para los modelos D2Q5 y D2Q7, $c_{sm} = \sqrt{1/3}$ y $c_{sm} = \sqrt{1/4}$ respectivamente.

Bibliografía

- [1] X. He y L.-S. Luo, “Theory of the lattice boltzmann method: From the boltzmann equation to the lattice boltzmann equation”, *Physical Review E*, vol. 56, n.º 6, pág. 6811, 1997.
- [2] D. O. Martinez, S. Chen y W. H. Matthaeus, “Lattice boltzmann magnetohydrodynamics”, *Physics of Plasmas*, vol. 1, n.º 6, págs. 1850-1867, 1994.
- [3] W. Schaffnerberger y A. Hansmeier, “Two-dimensional lattice boltzmann model for magnetohydrodynamics”, *Physical Review E*, vol. 66, n.º 4, pág. 046702, 2002.
- [4] P. J. Dellar, “Lattice kinetic schemes for magnetohydrodynamics”, *Journal of Computational Physics*, vol. 179, n.º 1, págs. 95-126, 2002.
- [5] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva y E. M. Vigen, “The lattice boltzmann method”, *Springer International Publishing*, vol. 10, págs. 978-3, 2017.
- [6] C. K. Batchelor y G. Batchelor, *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press, 2000.
- [7] K. Huang, “Statistical mechanics”, *2nd edn John Wiley & Sons*, 1987.
- [8] D. J. Griffiths, *Introduction to electrodynamics*, 2005.
- [9] P. Davidson, *Introduction to magnetohydrodynamics*. Cambridge University Press, 2016, vol. 55.
- [10] Q. Zou y X. He, “On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model”, *Physics of fluids*, vol. 9, n.º 6, págs. 1591-1598, 1997.
- [11] B. M. Riley, “Magnetohydrodynamic lattice boltzmann simulations of turbulence and rectangular jet flow”, Tesis doct., MS thesis, Texas A&M University, College Station, TX, 2007.
- [12] G. Breyiannis y D. Valougeorgis, “Lattice kinetic simulations of 3-d mhd turbulence”, *Computers & fluids*, vol. 35, n.º 8-9, págs. 920-924, 2006.
- [13] M. Pattison, K. Premnath, N. Morley y M. Abdou, “Progress in lattice boltzmann methods for magnetohydrodynamic flows relevant to fusion applications”, *Fusion Engineering and Design*, vol. 83, n.º 4, págs. 557-572, 2008.
- [14] C. Xing-Wang y S. Bao-Chang, “A new lattice boltzmann model for incompressible magnetohydrodynamics”, *Chinese Physics*, vol. 14, n.º 7, pág. 1398, 2005.

- [15] J.-F. Gerbeau, C. Le Bris y T. Lelièvre, *Mathematical methods for the magnetohydrodynamics of liquid metals*. Clarendon Press, 2006.
- [16] K. N. Premnath, M. J. Pattison y S. Banerjee, “Steady state convergence acceleration of the generalized lattice boltzmann equation with forcing term through preconditioning”, *Journal of Computational Physics*, vol. 228, n.º 3, págs. 746-769, 2009.