



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE
HIDALGO

INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE MALLA DE
BOLTZMANN EN VARIEDADES CURVAS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS EN EL ÁREA DE FÍSICA

PRESENTA:

GUILLERMO ALBERTO ESTRADA GONZALEZ

DIRECTOR DE TESIS:

DR. JOSÉ ANTONIO GONZÁLEZ CERVERA



MORELIA, MICHOACÁN.

AGOSTO DEL 2018

Dedicada con todo mi amor y cariño a mi familia. Mi mamá Bertha, mi padre Alberto y mi hermana Lunuen.

AGRADECIMIENTOS

Primero que nada agradezco a mi asesor José González, quien siempre confió en mi y me dejó total libertad en la elaboración de ésta tesis. A mis revisores Francisco Guzmán, Alfredo Raya, Ulises Nucamendi y Umberto Cotti por tomarse el tiempo de leer mi tesis. A mi amiga y colega, Venecia Chávez, quien me dió correcciones puntuales en mi tesis. A todos mis profesores del IFM, en especial a Christian Schubert, Luca Tessieri y Ulises Nucamendi que en cuyas clases siempre aprendía algo nuevo y hacían que cambiara la forma en que veo la física. A mi amigo y compañero de cubo, Pancho, quien soportó todas mis platicas por más raras que fuesen. A mi querido amigo César, con quién siempre podía contar para discutir problemas y resolver ejercicios juntos. A mi amiga Gaby, quien siempre me muestra una forma alterna de ver y analizar las cosas. Al resto de la comunidad IFM, quienes me hicieron sentir siempre como en casa. Un agradecimiento especial a Don Manuel quien siempre se la rifa y nos muestra diariamente que las cosas hay que hacerlas bien y con entusiasmo. Agradezo también a todo el pueblo mexicano que a través de Conacyt nos brindan todo el apoyo necesario para seguir con nuestros sueños y así fomenta

Morelia, Michoacán, Agosto del 2018.

Índice general

1. Introducción	13
2. Hidrodinámica y Teoría Cinética	15
2.1. Navier-Stokes y el medio continuo	15
2.1.1. La Ecuación de Continuidad	15
2.1.2. La Ecuación de Euler	17
2.1.3. Las Ecuaciones de Navier-Stokes	17
2.1.4. Ecuación de Estado	18
2.1.5. Escalas	20
2.2. Flujos de Couette y Poiseuille	22
2.3. Teoría Cinética	24
2.3.1. La Función de Distribución y sus Momentos	25
2.3.2. La Ecuación de Boltzmann	26
2.3.3. El Término de Colisión	28
2.3.4. La Función de Distribución en Equilibrio	29
2.3.5. La Entropía y El Teorema \mathcal{H} de Boltzmann	30
3. El Método de Malla de Boltzmann	33
3.1. Discretización de la Ecuación de Boltzmann	33
3.1.1. Discretización del Tiempo	33
3.1.2. Cálculo de los Momentos Hidrodinámicos	35
3.2. Modelos de la Malla de Boltzmann en 2D	36
3.2.1. D2Q7	36
3.2.2. D2QN	41
3.3. Implementación	45
3.4. Aplicaciones	49
3.4.1. Flujo Couette	49
3.4.2. Flujo de Poiseuille	54
3.4.3. Flujos de Couette sobre una cavidad cuadrada	58
3.5. Análisis de Convergencia	59

4. Extensión del Método de Malla de Boltzmann a Variedades Curvas	61
4.1. Evolución de la Función de Distribución en Variedades	63
4.2. Discretización de La Ecuación de Boltzmann en Variedades	65
4.2.1. Discretización Temporal	69
4.3. Implementación en la Esfera	71
5. Conclusiones	73
A. Polinomios de Hermite y cuadratura Gauss-Hermite	75
Referencias	77

Resumen

En esta tesis presento una forma sistemática para calcular la ecuación de Boltzmann discretizada en variedades Riemannianas a través de la proyección en los polinomios de Hermite. La función de distribución es calculada explícitamente para orden uno, dos y tres en los polinomios de Hermite así como el término de la fuerza hasta segundo orden. A modo de ejemplo se implementa la formulación para el caso de una esfera.

Palabras Clave— Métodos Numéricos, LBM, Flúidos en Variedades, Ecuación de Boltzmann.

Abstract

In this thesis I present a systematic way to compute the discretized Boltzmann equation in any almost arbitrary Riemannian manifold. The distribution function is truncated up to third order in Hermite polynomials and the force term is truncated up to second order. As an example I implement this formulation in the case of a sphere.

Palabras Clave— Numerical Methods, Lattice Boltzmann Method, Fluid Mechanics on Manifolds, Boltzmann Equation.

Capítulo 1

Introducción

El método de malla de Boltzmann, LBM por sus siglas en inglés, es un método computacional para resolver problemas de mecánica de fluidos el cual fue implementado exitosamente por primera vez en Frish et al. [1]. Surge como una manera alternativa de estudiar fluidos donde en vez de resolver numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes se resuelve la ecuación de Boltzmann y las variables hidrodinámicas son calculadas como los momentos de la función de distribución.

En la naturaleza aparecen frecuentemente problemas de dinámica de fluidos en espacios curvos. Por ejemplo, si se desea estudiar el clima de la Tierra se necesitan resolver las ecuaciones de Navier-Stokes sobre la superficie terrestre. En astrofísica existen sistemas que involucran fluidos que pueden ser o no relativistas sobre un espacio-tiempo curvo, por ejemplo, agujeros negros supermasivos acreando materia en el centro de galaxias tipo Vía Láctea. En microbiología existen las bicapas lipídicas las cuales recubren células y sus estructuras internas. Las bicapas lipídicas son comúnmente modeladas como un fluido dos dimensional sobre superficies curvas [2] de acuerdo a las ecuaciones de Navier-Stokes en variedades curvas [3].

En esta tesis presento una forma sistemática de calcular la forma de la función de equilibrio para variedades Riemannianas arbitrarias. La tesis está organizada como sigue. En el capítulo 2 se introducen los conceptos principales de la física de fluidos así como de la teoría cinética esenciales para el desarrollo del método de malla de Boltzmann. En el capítulo 3 desarrollo toda la teoría estándar de LBM para procesos isotérmicos. Se presenta de forma explícita cómo discretizar la ecuación de Boltzmann en el tiempo y en el espacio de momentos así como una pequeña discusión sobre la interpretación correcta de la velocidad del sonido. Además calculo de manera explícita la forma para la función de distribución para el caso de la malla hexagonal de siete velocidades que fue de las primeras en presentarse históricamente. Después presento una forma sistemática para calcular la forma de la función de distribución en D dimensiones y N velocidades. La discretización en el espacio de momentos se hace a través de la proyección de la ecuación de Boltzmann en los polinomios de Hermite similar a la presentada en [4]. Se presentan tres problemas clásicos

como complemento, el flujo de Couette, el flujo de Poiseuille y el flujo de Couette de una cavidad cuadrada. En el capítulo 4 doy una pequeña revisión de geometría diferencial esenciales para poder extender el método de malla de Boltzmann a variedades Riemannianas. Se calculan la forma explícita de la función de distribución a primer, segundo y tercer orden en los polinomios de Hermite así como la forma del término de la fuerza a segundo orden. Finalmente implemento la formulación presentada para la simulación de un fluido sobre una esfera.

Capítulo 2

Hidrodinámica y Teoría Cinética

2.1. Navier-Stokes y el medio continuo

La dinámica de fluidos es el campo que estudia el movimiento de los fluidos (líquidos y gases). Dado que los fenómenos asociados a la dinámica de fluidos son macroscópicos es necesario tratar al fluido como un medio continuo. Es decir, se asume que dado un elemento de fluido, éste es lo suficientemente pequeño respecto al tamaño del sistema pero lo suficientemente grande en comparación del tamaño de las moléculas y la distancia típica entre ellas. Aunque la validez de estas consideraciones pueden discutirse (y lo haremos más adelante), para la mayoría de las aplicaciones en dinámica de fluidos esta es una aproximación lo suficientemente robusta.

La descripción matemática del estado de un fluido moviéndose es afectado por promedios de funciones que dan la distribución de la velocidad del fluido $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, y, z, t)$ y por cualquier par de variables termodinámicas pertenecientes al fluido, como la presión $p(x, y, z, t)$ y la densidad $\rho(x, y, z, t)$. Todas las cantidades termodinámicas están determinadas por los valores de solamente dos de ellas y están relacionadas por la ecuación de estado del sistema. Por tanto, el estado del sistema (el fluido) está completamente determinado si uno conoce las tres componentes de la velocidad $\mathbf{u}=(u_x, u_y, u_z)$, la presión p y la densidad ρ . Todas estas funciones son en general funciones de las coordenadas (x, y, z) y del tiempo t .

2.1.1. La Ecuación de Continuidad

Empecemos por considerar un elemento de fluido con densidad ρ ocupando un volumen V_0 . La masa de dicho elemento de fluido es $\int_{V_0} \rho dV$. Ya que el fluido está en movimiento, el cambio de la masa por unidad de tiempo se debe al flujo que entra o sale de ese elemento de fluido. Matemáticamente

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

donde la integral cerrada se hace sobre la frontera ∂V_0 del volumen V_0 , \mathbf{u} es la velocidad del fluido y hemos tomado la normal que apunta hacia afuera como la dirección de $d\mathbf{A} = dA\hat{\mathbf{n}}$. Usando el teorema de la divergencia¹ en la parte derecha de la ecuación anterior, podemos reescribirla como

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

Dado que el volumen V_0 es arbitrario, podemos quitar el simbolo de la integral y obtener finalmente la ecuación de continuidad

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

Esta ecuación diferencial parcial refleja la ley de conservación de la masa. En la literatura, también es común ver la ecuación de continuidad escrita de diferentes formas

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (2.4)$$

donde $\mathbf{j} = \rho \mathbf{u}$ es el flujo de la densidad de masa. Otras formas comunes de encontrarla son

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.5)$$

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

donde hemos introducido la derivada material

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla. \quad (2.7)$$

La derivada material no es mas que una especie de derivada total la cual muestra el ritmo con el que cambia una función a través del espacio. Por ejemplo, si la cantidad de interés es ρ , la derivada material de esta nos dice como cambia la densidad en un elemento de fluido en el tiempo pero no en un punto fijo si no a través de la trayectoria sobre la que fluye dicho elemento.

¹ $\oint_{\partial V_0} \rho \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} = \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) dV$. El teorema fue descubierto originariamente por Joseph Louis Lagrange en 1762, e independientemente por Carl Friedrich Gauss en 1813, por George Green en 1825 y en 1831 por Mikhail Vasilievich Ostrogradsky, que también dio la primera demostración del teorema. Posteriormente, variaciones del teorema de divergencia se conocen como teorema de Gauss, teorema de Green o teorema de Ostrogradsky. Hoy en día este teorema se deja como ejercicio para estudiantes de ciencia e ingeniería.

2.1.2. La Ecuación de Euler

Ahora consideremos el cambio de densidad de momento de un elemento de fluido $\frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho \mathbf{u} dV$, con densidad ρ y velocidad \mathbf{u} ocupando un volumen V_0 . Para un fluido ideal, el cambio en el momento es debido a: (i) el flujo de momento $\rho \mathbf{u} \mathbf{u}$ (donde $\mathbf{u} \mathbf{u}$ es el producto directo del campo \mathbf{u} consigo mismo, es decir es un tensor cuyas componentes son $u_i u_j$) que entra o sale del elemento de fluido a través de su frontera $\oint_{\partial V_0} \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A}$, (ii) a diferencias o gradientes de la presión $\int_{V_0} \nabla p dV$, y (iii) por fuerzas externas \mathbf{F} que actúan sobre el fluido $\int_{V_0} \mathbf{F} dV$, como por ejemplo la gravedad \mathbf{g} .

Usando el teorema de la divergencia podemos transformar la integral de superficie (i) en una de volumen y notando que el volumen donde se hace la integral es arbitrario obtenemos la ecuación de Euler:

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

La ecuación de momento Ec.(2.8) puede ser escrita de forma más general, llamada la ecuación de Cauchy

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

donde hemos introducido el tensor de densidad de flujo de momento Π y cuyas componentes están dadas por

$$\Pi_{ij} = \rho u_i u_j - \sigma_{ij}. \quad (2.10)$$

El término σ_{ij} es el tensor de esfuerzos y corresponde a las transferencias indirectas de momento en el elemento de fluido en movimiento. Para fluidos simples descritos por la ecuación de Euler el tensor de esfuerzos es isotrópico, es decir, solo contiene elementos en la diagonal los cuales son los mismos en todas direcciones $\sigma_{ij} = -p \delta_{ij}$.

2.1.3. Las Ecuaciones de Navier-Stokes

La transferencia del flujo de momento en la ecuación de Euler solamente incluye transferencias de momento reversibles. Para fluidos reales, necesitamos incluir un término de viscosidad o términos de fricción internos del fluido, los cuales son responsables de la disipación en la transferencia de momento de un elemento de fluido a otro de manera irreversible.

Para esto, ocupamos del llamado tensor de esfuerzos viscoso σ'_{ij} , el cual cumple con dos consideraciones: (i) sus contribuciones deben de ser cero cuando el flujo es uniforme, y (ii) si el gradiente de velocidad es pequeño, entonces la transferencia de momento debido a la viscosidad es capturado por términos proporcionales a las primeras derivadas de la velocidad solamente. Un tensor general de rango que satisface dichas consideraciones es el

siguiente

$$\sigma'_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \zeta \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}, \quad (2.11)$$

donde η y ζ son coeficientes de la viscosidad. El tensor de esfuerzos viscoso es comunmente separado en dos términos

$$\sigma'_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + \eta_B \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}. \quad (2.12)$$

El primer coeficiente de viscosidad η aparece cuando hay esfuerzos cortantes sobre el elemento de fluido, mientras que el término $\eta_B = 2\eta/3$ es llamado el segundo coeficiente de viscosidad o viscosidad dilatacional y tiene que ver con los esfuerzos o tensiones normales en un elemento de fluido. Finalmente tomando en cuenta las contribuciones de la presión y la viscosidad, el tensor de esfuerzos se escribe

$$\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} - p\delta_{ij}. \quad (2.13)$$

Insertando la Ec.(2.12) y Ec.(2.13) en la ecuación de Cauchy, Ec.(2.9), obtenemos finalmente las ecuaciones de Navier-Stokes

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

Las ecuaciones de Navier-Stokes pueden ser considerablemente simplificadas si se asume incompresibilidad, esto es $\rho = \text{constante}$, lo que reduce la ecuacion de continuidad, Ec.(2.3), a $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. En este caso, podemos escribir las ecuaciones de Navier-Stokes en su forma mas común

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\eta}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}. \quad (2.15)$$

El tensor de esfuerzos para un fluido incompresible toma la forma

$$\sigma_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - p\delta_{ij}. \quad (2.16)$$

2.1.4. Ecuación de Estado

Hasta este punto tenemos 4 ecuaciones que juntas describen el movimiento de un fluido. La ecuación de continuidad, Ec.(2.3), y las 3 ecuaciones de Navier-Stokes Ec.(2.14) (una para cada componente de la velocidad). Sin embargo, estas 4 ecuaciones forman un sistema de ecuaciones indeterminado, es decir, ocupamos cinco variables para describir completamente el estado del fluido pero tenemos solamente 4 ecuaciones y a menos que se hagan consideraciones que fijen ciertas variables (como una densidad constante) el sis-

tema es insoluble. Para tener un sistema de ecuaciones consistente es necesario agregar una quinta ecuación. La ecuación de estado relaciona a todas las variables de estado del sistema, tal como la densidad ρ , la presión p , la temperatura T , la energía interna e y la entropía s . Aunque más adelante haremos una descripción detallada sobre las variables de estado termodinámicas, lo importante aquí es saber que cualesquiera de estas variables se relacionan con cualquiera otras 2 a través de una ecuación de estado.

La ecuación de estado más famosa es conocida como la ley de los gases ideales

$$p = \rho RT. \quad (2.17)$$

Esta en particular, relaciona la presión con la densidad y la temperatura a través de la constante universal de los gases ideales R , con unidades $[R] = \text{J}/(\text{kgK})$. Otra ecuación de estado que se puede encontrar en la literatura es la ecuación de un gas ideal y que expresa a la presión como función de la densidad y la entropía es

$$\frac{p}{p_0} = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma e^{(s-s_0)/c_v}. \quad (2.18)$$

Las constantes p_0 , ρ_0 y s_0 son los valores dado un estado de referencia. Esta ecuación hace uso de las capacidades caloríficas, a volumen constante c_v y a presión constante c_p y el cociente γ , conocido como el índice adiabático. Estos están definidos en general como:

$$c_v = \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v, \quad c_p = \left(\frac{\partial(e+p)/\rho}{\partial T} \right)_p, \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v}. \quad (2.19)$$

En un gas ideal, las dos capacidades caloríficas están relacionadas entre sí como $c_p = c_v + R$.

Hay que observar que la ecuación de estado por sí sola no cierra el sistema de ecuaciones, pues siempre introduce una nueva variable, como por ejemplo en la Ec.(2.17) se introduce la temperatura T y en la Ec.(2.18) se introduce la entropía s . El sistema de ecuaciones puede ser totalmente cerrado si se puede derivar una ecuación que describa la evolución de esta variable a partir de la ecuación de energía. Sin embargo, el sistema de ecuaciones resulta ser incómodo para trabajar por lo que la ecuación de estado es una manera de cerrar el sistema de ecuaciones bajo ciertas aproximaciones. Por ejemplo, la mayoría de los trabajos en acústica están basados en la suposición que la entropía es aproximadamente constante. Esto simplifica (2.18) en la ecuación de estado isentrópica

$$p = p_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma, \quad (2.20)$$

y cierra el sistema de ecuaciones. En otros casos lo que se asume es que el sistema tiene temperatura constante $T \approx T_0$ lo que simplifica la Ec.(2.17) en la ecuación de estado

isotérmica

$$p = \rho RT_0, \quad (2.21)$$

la cual es una relación lineal entre la presión y la densidad. Para desviaciones pequeñas sobre un estado de referencia, las ecuaciones de estado se pueden aproximar por linealización. Uno puede hacer uso de la derivada total y linealizar la ecuación de estado $p(\rho, s)$ de la siguiente forma

$$p = p_0 + p' \approx p_0 \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \Delta \rho + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho \Delta s. \quad (2.22)$$

En este caso las derivadas son evaluadas en el punto $p = p_0$, y las desviaciones Δ son respecto al estado de referencia definido por p_0, ρ_0 , y s_0 . Para la ecuación de estado isentrópica (2.20), la ecuación (2.22) se simplifica a

$$p \approx p_0 + c_S^2 \Delta \rho, \quad (2.23)$$

donde c_S es la velocidad del sonido y en general está dada por la siguiente relación:

$$c_S^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s. \quad (2.24)$$

Para el caso de la ecuación de estado isentrópica (2.20), la velocidad del sonido es $c_S = \sqrt{\gamma RT_0}$ y para el caso de la ecuación de estado isotérmica (2.21) la velocidad del sonido es

$$c_S = \sqrt{RT_0}. \quad (2.25)$$

2.1.5. Escalas

Uno de los físicos más famosos de todos, Albert Einstein, recibió el Nobel de Física en 1905 por la descripción detallada del movimiento que sufren partículas atrapadas en fluidos en reposo, como el polen en una gota de agua. Robert Brown fue la primer persona en documentar este tipo de movimiento (más tarde bautizado movimiento Browniano en su honor). El movimiento Browniano es una prueba de que la materia está compuesta por átomos y/o moléculas diminutas y que son las responsables del movimiento aleatorio que sufren partículas pequeñas como el polvo, suspensiones coloidales o el polen.

Por este motivo, cuando uno estudia un sistema macroscópico es necesario analizar las diferentes escalas en longitud y tiempo de los diferentes procesos que se realizan dentro del sistema. Empecemos nuestro análisis desde el punto de vista de la mecánica clásica, desde lo más pequeño a lo más grande, entonces tenemos (1) el tamaño de los átomos o moléculas que componen el fluido ℓ_a , (2) la distancia promedio que hay entre dos colisiones sucesivas -camino libre medio- ℓ_{mfp} , (3) la escala típica de los gradientes de algunas de las propiedades macroscópicas ℓ y (4) la tamaño del sistema ℓ_S . El orden típico de estas escalas de longitud es $\ell_a \ll \ell_{mfp} \ll \ell \leq \ell_S$.

Respecto a las diferentes escalas de tiempo con las que se desarrollan los diferentes procesos dentro del sistema, definimos el tiempo de colisión $t_c \sim \ell_a/v_T$, es decir, es el tiempo de duración de una colisión donde $v_T = (k_B T/m)^{1/2}$ es la velocidad térmica promedio de las moléculas. Hay que observar que por un lado la velocidad térmica v_T es diferente a la velocidad macroscópica de un elemento de fluido, $\|\mathbf{u}\| =: u \ll v_T$, y por otro esta debe ser del orden de la velocidad del sonido $c_S \sim v_T$. Análogamente podemos definir el tiempo promedio que hay entre dos colisiones sucesivas, $t_{mfp} = \ell_{mfp}/v_T$. Esta es la escala de tiempo con la que se trabaja en teoría cinética y es el tiempo en el que el sistema se relaja hacia el equilibrio local por medio de las colisiones. El equilibrio local no significa que el sistema se encuentre en equilibrio global. Esa es la situación que pasa más a menudo y en la que estamos interesados en estudiar.

Las escalas de tiempo y escalas de longitud más grandes existen debido al flujo hidrodinámico de una región a otra. En general, en un fluido podemos tener situaciones de advección (régimen inercial) o de difusión (régimen viscoso) y la escala de tiempo mas corta y relevante para estos casos son $t_{conv} \sim \ell/u$ y $t_{diff} \sim \ell^2/\nu$ respectivamente, donde ν es la viscosidad cinemática. La viscosidad cinemática está relacionada con el primer término de viscosidad (viscosidad dinámica) por $\eta = \rho\nu$. El cociente entre estas dos escalas hidrodinámicas temporales es el famoso número de Reynolds

$$\text{Re} = \frac{t_{diff}}{t_{conv}} = \frac{u\ell}{\nu}. \quad (2.26)$$

En la investigación, es de interés tanto números de Reynolds altos como pequeños. Flujos con números de Reynolds grandes son usualmente dominados por turbulencia y son relevantes para el diseño de vehículos aerodinámicos, edificios, puentes y muchas otras aplicaciones. Por otro lado, números de Reynolds pequeños toman importancia al momento de hacer microfluidos y biofísica. El número de Reynolds es adimensional y nos ayuda a caracterizar flujos, es decir, en sistemas con el mismo número de Reynolds se espera que el flujo se comporte de manera igual o similar ya sea laminar para Reynolds pequeños y flujos turbulentos para Reynolds grandes.

Otra escala de tiempo importante es la escala de tiempo acústica, $t_{sonido} \sim \ell/c_S$, donde c_S es la velocidad del sonido en el fluido. Esta escala temporal determina qué tan rapido se propagan las ondas de compresión en el fluido. Cuando este número es mayor comparado con la escala de tiempo advectiva, el fluido se comporta muy parecido a lo que haría un fluido incompresible. La compresibilidad del fluido es un factor importante y gracias a este tenemos muchos más fenomenos físicos como las ondas de choque. El número Mach

$$\text{Ma} = \frac{t_{sonido}}{t_{conv}} = \frac{u}{c_S} \quad (2.27)$$

es el cociente entre las escalas de tiempo acústica y convectiva. En la práctica podemos asumir que el flujo de una corriente estacionaria se comporta como la de un fluido incom-

presible cuando $Ma \leq 0.1$.

Existen casos donde el orden típico en las escalas de longitud cambia respecto a la mencionada al principio. Por ejemplo, la miniaturización de dispositivos fluidicos hace que la escala del sistema sea comparable con el camino libre medio $\ell_S \sim \ell_{mfp}$, por lo que otro número adimensional útil es el cociente entre las escalas de camino libre medio y del sistema, llamado el número de Kudsén

$$Kn = \frac{\ell_{mfp}}{\ell}. \quad (2.28)$$

Para números de Kudsén $Kn \leq 1$, la descripción continua de Navier-Stokes es válida, mientras que para $Kn \geq 1$, la descripción del sistema se tiene que hacer a través de la teoría cinética o en general de la física estadística. El número de Kudsén es importante en la formulación LBM, ya que es el parametro más pequeño usado en la expansión de Chapman-Enskog con el cual se derivan las ecuaciones de Navier-Stokes a partir de la ecuación de Boltzmann.

Estos 3 números, Re , Ma y Kn , aparecen a lo largo de la literatura de fluidos. Su importancia recae en que los flujos de fluido que tengan los mismos números adimensionales comparten la misma física salvo un escalamiento dado por la longitud y velocidad típica del sistema en particular y están relacionados entre sí por la relación de von Kármán

$$Kn = \alpha \frac{Ma}{Re}, \quad (2.29)$$

donde α es una constante numérica. Este enunciado es conocido como la Ley de Similitud.

Hay que hacer notar que incluso dos sistemas que comparten el mismo número de Reynolds, pueden que no compartan los mismos números de Mach o Knudsen. Sin embargo, mientras el orden en las escalas de longitud y tiempo sean iguales en los dos sistemas sus valores exactos no son tan importantes. Por ejemplo, si Ma y Kn son lo suficientemente pequeños, sus valores exactos son irrelevantes para los flujos hidrodinámicos de interés donde el número de Reynolds es el parámetro clave. Por tanto, se puede argumentar que para todos los flujos con el mismo número de Reynolds son comparables entre sí.

2.2. Flujos de Couette y Poiseuille

Consideremos el flujo de un fluido incompresible ($\nabla \cdot \mathbf{u}=0$) y Newtoniano² a través de dos placas paralelas tal que uno de estos tiene una velocidad relativa a la otra y constan-

²Un fluido Newtoniano es aquel en la que su viscosidad no depende de la velocidad. Formalmente se dice que un fluido es Newtoniano si el tensor de esfuerzos viscosos Ec.(2.12) no depende del estado de deformación ni de la velocidad del flujo.

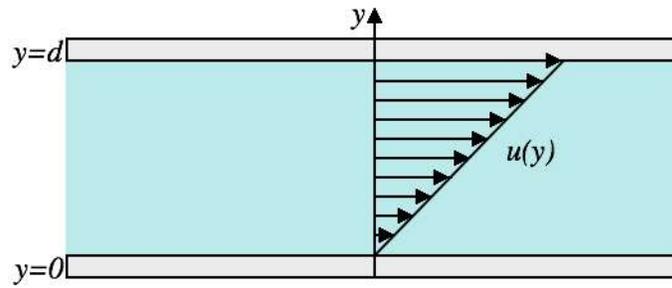


Figura 2.1: Flujo de Couette. El campo de velocidades sólo depende de la distancia en la que se encuentre un elemento de fluido entre las placas y tiene dependencia lineal. La pendiente del perfil es u_0/d .

te u_0 en dirección de las x . Partiendo de las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido incompresible y suponiendo que el fluido está localizado entre dos placas paralelas con una distancia d alineado con el eje y , y que el flujo es laminar con velocidad \mathbf{u} apuntando sólo en dirección de las x , las ecuaciones (2.15) se reducen a

$$\frac{dp}{dy} = 0, \quad \frac{d^2u}{dy^2} = 0. \quad (2.30)$$

Por tanto $p = \text{constante}$, $u(y) = ay + b$. Tomando en cuenta condiciones de frontera sin deslizamiento, es decir, $u(0) = 0$ y $u(d) = u_0$ obtenemos

$$u = \frac{u_0}{d}y. \quad (2.31)$$

La condición sin deslizamiento quiere decir que la velocidad del fluido cerca de una pared sólida es igual a la de la pared. En este caso la pared es la placa norte que se mueve a velocidad constante y el perfil de velocidades descrito por (2.31) es conocido como el flujo de Couette. En la Fig.(2.1) se muestra el perfil de velocidad para el flujo de Couette. Una variación de este sistema es cuando uno considera ahora un flujo en una cavidad, como un rectángulo tal que la tapa superior se mueve con velocidad constante y el resto de las tapas están fijas. Este sistema no cuenta con una solución analítica pero daremos una aproximación numérica en el siguiente capítulo.

Ahora consideremos el flujo de un fluido entre dos placas paralelas fijas y un gradiente de presión constante. Al flujo laminar y estático que se forma entre las placas es llamado flujo de Poiseuille. Partiendo otra vez de las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido incompresible y notando que la velocidad sólo puede depender de y , obtenemos

$$\frac{\partial u}{\partial y^2} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial p}{\partial x}, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = 0. \quad (2.32)$$

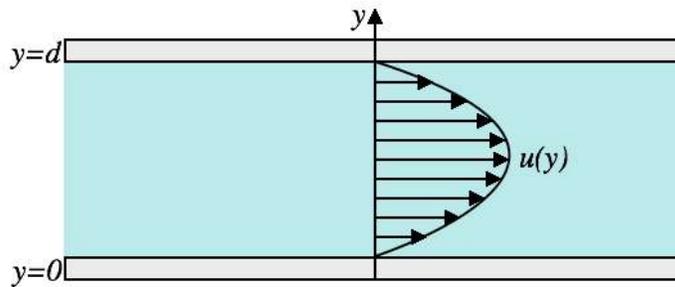


Figura 2.2: Flujo de Poiseuille. El campo de velocidades sólo depende de la distancia vertical entre las placas pero la presión varía de forma lineal en la dirección del flujo. El perfil de la velocidad es parabólico y la magnitud de la velocidad tiene su máximo en $d/2$ mientras que cerca de las placas tiende a cero.

La segunda ecuación muestra que la presión es constante e independiente de y . La parte izquierda de la primera ecuación es función solamente de y mientras que la parte derecha solamente de x . Esto solo puede pasar si las funciones son constantes. Por tanto $\partial p / \partial x = cte$. Para la velocidad se obtiene

$$u = \frac{1}{2\eta} \frac{dp}{dx} y^2 + ay + b. \quad (2.33)$$

Las constantes a y b se determinan por las condiciones de frontera $u(0) = u(d) = 0$. El resultado es

$$u = -\frac{1}{2\eta} \frac{dp}{dx} y(y-d). \quad (2.34)$$

El perfil de velocidad es parabólico y alcanza su máximo a la mitad ($y = d/2$). En la Fig.(2.2) se muestran el perfil de velocidad para el flujo de Poiseuille.

2.3. Teoría Cinética

En sus inicios, la teoría cinética fue desarrollada para poder describir el comportamiento hidrodinámico de un gas diluido a partir de primeros principios, tomando como primeros principios que las moléculas se rigen por las leyes de Newton. Ahora sabemos que los átomos y las moléculas que componen la materia se rigen por las leyes de la mecánica cuántica y cuya dinámica se hace a través de la ecuación de Schroedinger. Aún sabiendo esto, cuando uno considera un sistema de N moléculas encerradas en un volumen V tal que la temperatura del sistema es lo suficientemente alta y la densidad lo suficientemente baja para que las moléculas tengan un paquete de onda lo suficientemente localizado, entonces la imagen clásica de Newton se puede retomar. Para que esto se cumpla, la longitud de onda de de Broglie de las moléculas debe de ser mucho más pequeña que la distancia típica

entre ellas

$$\lambda_D := \frac{\hbar}{\sqrt{2mkT}} \ll \ell_{mfp} \approx \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}. \quad (2.35)$$

Este resultado se conoce como Teorema de Ehrenfest. Dice que el estado del sistema está determinado por las posiciones y las velocidades de las N moléculas y su evolución temporal está descrita a través de las leyes de la mecánica clásica. La única cosa que se hereda de la visión cuántica es que las N partículas se consideran indistinguibles³.

2.3.1. La Función de Distribución y sus Momentos

Si N es muy grande (lo cual es cierto para sistemas macroscópicos donde el número de partículas es al menos del orden del número de Avogadro), no es realista ni práctico resolver las ecuaciones de movimiento de cada una de las partículas, por lo que es mejor tratar al sistema desde el punto de vista estadístico. Para lograr esto, introducimos la función de distribución $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)\Delta\mathbf{x}\Delta\boldsymbol{\xi}$ la cual nos dice el número de partículas que hay entre \mathbf{x} y $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ con velocidades entre $\boldsymbol{\xi}$ y $\boldsymbol{\xi} + \Delta\boldsymbol{\xi}$ al tiempo t . Los elementos de volumen $\Delta\mathbf{x}$ y $\Delta\boldsymbol{\xi}$ deben considerarse lo suficientemente grandes para contener un número grande de partículas, pero lo suficientemente pequeños tal que al ser comparados con las dimensiones macroscópicas del problema, se puedan tomar como puntos. En condiciones de ambiente típicas hay 3×10^{19} partículas/cm³ en un gas. Si escogemos $\Delta\mathbf{x} \sim 10^{-10}$ cm³, es lo suficientemente pequeño como para considerarlo un punto pero aún contiene 3×10^9 partículas. Esta es la escala mesoscópica de la que hablamos al principio del capítulo. Para formalizar la definición de la función de distribución es necesario introducir el espacio fase $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ de una partícula. Cada punto en este espacio 6-dimensional representa un estado de la partícula. En un sistema con N partículas podemos verlo como N puntos en el espacio fase. Si queremos saber cuantos puntos hay en un elemento del volumen del espacio fase $\Delta\mathbf{x}\Delta\boldsymbol{\xi}$ es justamente por definición $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)\Delta\mathbf{x}\Delta\boldsymbol{\xi}$. Si el tamaño de los elementos de volumen es escogida tal que en cada uno hay un gran número de partículas, del orden $\sim 10^9$, entonces podemos hacer una aproximación tomando el límite de la suma del espacio fase en el sentido usual del cálculo

$$\sum f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)\Delta\mathbf{x}\Delta\boldsymbol{\xi} \rightarrow \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.36)$$

Definida la función de distribución, podemos expresar la información de que hay N partículas en el volumen V a través de la normalización

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi} = N. \quad (2.37)$$

Si las partículas están uniformemente distribuidas en el espacio, tal que f es independiente

³En los inicios de la teoría cinética aún no se tenía una visión cuántica de la naturaleza por lo que no considerar las partículas como indistinguibles fue la causa de la famosa paradoja de Gibbs.

de \mathbf{x} , entonces

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \frac{N}{V}. \quad (2.38)$$

El problema principal en la teoría cinética es, dada la interacción entre las partículas hay que encontrar la función de distribución $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$. La forma límite de $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ cuando $t \rightarrow \infty$ contiene entonces todas las propiedades termodinámicas del sistema en equilibrio. Para lograr esto, es necesario encontrar la ecuación de evolución de la función de distribución, la cual se presenta en la siguiente subsección.

Una última cosa que decir a cerca de la función de distribución f es que está directamente relacionada con las variables macroscópicas del sistema a través de sus momentos. Estos momentos se definen como integrales de f con pesos que dependen en general de $\boldsymbol{\xi}$ sobre todo el espacio de velocidades. La densidad de masa macroscópica ρ es por definición

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.39)$$

La densidad de momento se encuentra como

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.40)$$

Similarmente la densidad de energía total es

$$E(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.41)$$

La densidad de energía interna del sistema debida al movimiento térmico aleatorio de las partículas en un fluido también puede calcularse como un momento de f pesada con la velocidad relativa $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$,

$$\rho(\mathbf{x}, t)e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int |\mathbf{v}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.42)$$

2.3.2. La Ecuación de Boltzmann

La función de distribución cambia con el tiempo debido a que en un elemento de volumen en el espacio fase, las partículas pueden entrar o salir de dicho elemento. Imaginemos por un momento que no existen colisiones entre las partículas, entonces una partícula con coordenadas $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ al tiempo t se moverá a $(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{F}\delta t/m)$ al tiempo $t + \delta t$, donde \mathbf{F} es la fuerza externa total actuando sobre la partícula. Tomemos a δt en el sentido infinitesimal del cálculo. Entonces todas las partículas contenidas en el elemento $d^3x d^3\xi$ del espacio fase en la coordenada $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$, al tiempo t , se moverán al elemento $d^3x' d^3\xi'$, en

$(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{F}\delta t/m)$, al tiempo $t + \delta t$. Por tanto, en la ausencia de colisiones

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{F}\delta t/m, t + \delta t)d^3x'd^3\xi' = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)d^3xd^3\xi, \quad (2.43)$$

la cual se reduce a

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{F}\delta t/m, t + \delta t) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t), \quad (2.44)$$

porque el elemento de volumen es invariante en la ausencia de colisiones $d^3x'd^3\xi' = d^3xd^3\xi$. Ya que el número de partículas es invariante en este caso, se puede analizar como si simplemente cambiáramos de coordenadas cuyo Jacobiano tiene determinante $J = 1$. Por tanto, si expandimos en serie de Taylor el lado izquierdo de (2.43) truncando a primer orden en δt obtenemos

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = 0, \quad (2.45)$$

donde la componente i -ésima de $\nabla_{\boldsymbol{\xi}} f$ es $\partial f / \partial \xi^i$. Este resultado es más evidente cuando uno toma el diferencial total de la función de distribución con las componentes de la velocidad y la fuerza $\xi^i = \dot{x}^i$ y $\mathbf{F}^i = m\dot{\xi}^i$, tal que (2.45) está dado por

$$\frac{d}{dt}f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \dot{x}^i \frac{\partial f}{\partial \xi^i} + \sum_i \dot{\xi}^i \frac{\partial f}{\partial \xi^i} =: \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{x}^i \frac{\partial f}{\partial \xi^i} + \dot{\xi}^i \frac{\partial f}{\partial \xi^i} = 0. \quad (2.46)$$

De aquí en adelante se usará la notación de Einstein, es decir, siempre que haya índices repetidos significa suma y se omitirá entonces el símbolo de la sumatoria.

Hasta este momento hemos considerado solamente gases en las que las partículas no colisionan. Ahora imaginemos un escenario más realista donde las partículas interactúan entre sí a través de colisiones elásticas binarias. Estas colisiones producen que partículas se muevan al punto $(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{F}\delta t/m)$ sin haber venido necesariamente de $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$. Similarmenete otras colisiones no permitirán que partículas que estaban en $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ se muevan a $(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{F}\delta t/m)$. Esta consideración puede expresarse al modificar la ecuación (2.43) a

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{F}\delta t/m, t + \delta t)d^3x'd^3\xi' = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)d^3xd^3\xi + C(f)d^3xd^3\xi\delta t. \quad (2.47)$$

En este caso, los elementos de volumen $d^3x'd^3\xi'$ y $d^3xd^3\xi$ serán iguales si el Jacobiano del cambio de coordenadas es igual a 1 al menos a primer orden $J = 1 + \mathcal{O}(\delta t)$, esto implica que $d^3x'd^3\xi' = Jd^3xd^3\xi = d^3xd^3\xi + \mathcal{O}(\delta t)$ reduciéndose a

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{F}\delta t/m, t + \delta t) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + C(f)\delta t, \quad (2.48)$$

donde $C(f)\delta t$ representa el cambio neto por unidad de tiempo del número de partículas en el elemento al rededor de $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ causado por las colisiones. Expandiendo el lado izquierdo a primer orden en δt , se obtiene la ecuación de evolución para la función de distribución

tomando el limite $\delta t \rightarrow 0$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = C(f) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}. \quad (2.49)$$

La cantidad $C(f) = (\partial f / \partial t)_{coll}$ es llamada el término de colisión ó integral de colisión y en general, a las ecuaciones tipo (2.49) se les llama ecuaciones de transporte. Claramente la ecuación de transporte tendrá sentido sólo cuando se conozca la forma explícita de la integral de colisión.

2.3.3. El Término de Colisión

Para un gas monoatómico el término de colisión es [5]

$$C(f) = \int v_{rel} (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d\sigma d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.50)$$

donde $v_{rel} = |\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}_2|$, $d\sigma$ es la sección eficaz de dispersión, f_i representa la función de distribución de la partícula i antes de la colisión f'_i después de la colisión.

Para hacer un tratamiento cualitativo de los fenómenos de transporte en gases, la integral de colisión puede estimarse como promedios del camino libre medio ℓ_{mfp} . El camino libre medio puede expresarse en términos de la sección eficaz de dispersión σ y por la densidad de número de partículas N que hay en un gas. Si una partícula viaja una unidad de distancia en su trayectoria, colisionará con las partículas contenidas en un volumen σ (el volumen es un cilindro tal que el área de la sección transversal es σ y tiene de profundidad una unidad de distancia), dicho número es σN . Por tanto $\ell_{mfp} \sim 1/N\sigma$. La sección eficaz de dispersión es del orden de las dimensiones de la partícula al cuadrado $\sigma \sim \ell_a^2$. Con $N \sim 1/\bar{r}^3$, donde \bar{r} es la distancia entre dos partículas, por lo que $\ell_{mfp} \sim \bar{r}(\bar{r}/\ell_a)^2 = \ell_a(\bar{r}/\ell_a)^3$. Dado que un gas $\bar{r} \gg \ell_a$, el camino libre medio $\ell_{mfp} \gg \bar{r}$. El cociente $\tau \sim \ell_{mfp}/\bar{v}$ es el tiempo entre dos colisiones sucesivas. Por tanto, podemos hacer una estimación de la integral de colisión y poner

$$C(f) \sim -\frac{(f - f^{eq})}{\tau}, \quad (2.51)$$

donde f^{eq} es la función de distribución en equilibrio. El término de colisión en su forma (2.51) es conocido en la literatura como el operador de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK).

El término $f - f^{eq}$ en el numerador refleja el hecho de que la integral de colisión es cero para el caso de la función de distribución en equilibrio. El signo menos expresa el hecho de que las colisiones son un mecanismo por medio del cual alcanzan el equilibrio estadístico, es decir, las colisiones tienden a reducir la desviación de la función de distribución de la de equilibrio. Dicho esto, τ actúa como el tiempo de relajación hacia el equilibrio en cada elemento de volumen del fluido.

En general, las masa, momento y energía son cantidades que se conservan durante las

colisiones [6]. Estas leyes de conservación se pueden representar a través de los momentos del término de colisión, análogamente a los definidos en (2.39)-(2.42):

$$\text{conservación de masa} : \int C(f)d\xi = 0, \quad (2.52)$$

$$\text{conservación de momento} : \int \xi C(f)d\xi = \mathbf{0}, \quad (2.53)$$

$$\text{conservación de la energía total} : \int |\xi|^2 C(f)d\xi = 0, \quad (2.54)$$

$$\text{conservación de la energía interna} : \int |\mathbf{v}|^2 C(f)d\xi = 0. \quad (2.55)$$

2.3.4. La Función de Distribución en Equilibrio

Las direcciones en las que se dispersan las partículas al momento de colisionar son sensibles a las condiciones iniciales de las partículas. Por tanto, las colisiones tienden a igualar la distribución angular de la velocidad de la partícula alrededor de la velocidad promedio \mathbf{u} . En consecuencia, cuando a un fluido se le deja evolucionar por un periodo de tiempo lo suficientemente grande, se puede asumir que la función de distribución $f(\mathbf{x}, \xi, t)$ tiende a una de equilibrio $f^{eq}(\mathbf{x}, \xi, t)$ la cual es isotrópica en el espacio de velocidades alrededor de $\xi = \mathbf{u}$. En un sistema de referencia inercial con velocidad \mathbf{u} , la función de distribución en equilibrio puede ser expresada como $f^{eq}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t)$, donde $\mathbf{v} = \xi - \mathbf{u}$. Asumiendo que la función de distribución en equilibrio es separable, es decir, que la distribución en equilibrio en 3D es el producto de 3 distribuciones en equilibrio en 1D, entonces

$$f_{3D}^{eq}(|\mathbf{v}|^2) = f^{eq}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = f_{1D}^{eq}(v_x^2)f_{1D}^{eq}(v_y^2)f_{1D}^{eq}(v_z^2). \quad (2.56)$$

Si ahora asumimos que la magnitud de la velocidad es constante, $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = \text{cte.}$, se encuentra que

$$\log f^{eq}(v_x^2) + \log f^{eq}(v_y^2) + \log f^{eq}(v_z^2) = \text{constante}. \quad (2.57)$$

Este requerimiento se cumple cuando las distribuciones 1D en equilibrio tienen la forma $\log f^{eq}(v_i^2) = a + bv_i^2$, con a, b constantes. Por tanto,

$$\log f^{eq}(v_x^2) + \log f^{eq}(v_y^2) + \log f^{eq}(v_z^2) = 3a + b(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \text{constante}, \quad (2.58)$$

y la función de distribución 3D en equilibrio tiene la forma

$$f^{eq}(|\mathbf{v}|) = e^{3a} e^{b|\mathbf{v}|^2}. \quad (2.59)$$

Dado que en colisiones binarias en un gas monoatómico hay conservación de masa, momento y energía, las constantes a y b se pueden encontrar explícitamente pidiendo que f^{eq}

tenga los mismos momentos de densidad y energía que f . La forma final de la función de distribución en equilibrio es

$$f^{eq}(|\mathbf{v}|) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} e^{-|\mathbf{v}|^2/2RT}. \quad (2.60)$$

Esta derivación tan corta sigue los mismos pasos que el trabajo original de Maxwell y aunque no es formal y no demostramos la unicidad de la solución uno puede llegar a la misma distribución usando mecánica estadística tal y como lo hizo Boltzmann. Hoy en día, ésta función de distribución en equilibrio se conoce como la distribución de Maxwell-Boltzmann.

En general, una función $G(\mathbf{x})d\mathbf{x}$ puede descomponerse en $G(|\mathbf{x}|)|\mathbf{x}|^2 d\Omega d|\mathbf{x}|$, donde $d\Omega$ es el elemento de volumen angular. Para el caso de la distribución en equilibrio de Maxwell-Boltzmann en su forma (2.60) podemos encontrar el máximo de la función tomando en cuenta el factor geométrico introducido por el diferencial angular $4\pi|\mathbf{v}|^2 f^{eq}$. Dicho máximo se alcanza en $\bar{v} = \sqrt{2RT}$. También es útil calcular el valor cuadrático medio de la velocidad v_{rms} definido como

$$v_{rms} = \left(\frac{\int v^2 f^{eq}(\mathbf{v}) d\mathbf{v}}{\int f^{eq}(\mathbf{v}) d\mathbf{v}} \right)^{1/2} = \left(\frac{\int 4\pi v^2 v^2 f^{eq}(v) dv}{\int 4\pi v^2 f^{eq}(v) dv} \right)^{1/2} = \sqrt{3RT}. \quad (2.61)$$

En la sección 2.3.3 mencionamos cómo el término de colisión conserva los primeros momentos de la función de distribución. Estas leyes de conservación implican que los momentos de la función de distribución de equilibrio f^{eq} coincidan con los de f

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.62)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \int \boldsymbol{\xi} f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.63)$$

$$E(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \frac{1}{2} \int |\boldsymbol{\xi}|^2 f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.64)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int |\mathbf{v}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \frac{1}{2} \int |\mathbf{v}|^2 f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.65)$$

2.3.5. La Entropía y El Teorema \mathcal{H} de Boltzmann

Hemos dicho que el estado de un fluido tiende alcanzar el equilibrio cuando se deja transcurrir el suficiente tiempo pero no hemos dado ningún argumento que justifique formalmente dicha afirmación. El teorema \mathcal{H} de Boltzmann es crucial en los fundamentos de la teoría puesto que con él se demuestra que sin importar la forma de la función de distribución esta convergerá a la de Maxwell-Boltzmann.

Antes de proseguir con el teorema daremos un pequeño recordatorio sobre la entropía.

La entropía s , es una variable termodinámica que mide la densidad de estados microscópicos compatibles con el estado macroscópico del sistema. Esto se puede entender más claramente con el siguiente ejemplo. Imaginemos que se tienen 2 dados y que el estado macroscópico se representa por la suma de los valores de los dados al ser arojados aleatoriamente. De esta forma, todos los microestados serán compatibles con el estado macroscópico si la suma es la misma. Por ejemplo, si el estado del sistema es 7, los microestados compatibles con este son $\{(1, 6), (2, 5), (3, 4), (4, 3), (5, 2), (6, 1)\}$, es decir hay 6 microestados compatibles, mientras que si el estado del sistema es 2, solamente existe 1 microestado compatible $\{(1, 1)\}$. En este ejemplo de juguete, el estado de equilibrio es 7 puesto que el espacio de microestados es el más grande de todos de los que se tiene acceso y por tanto la entropía alcanza su máximo. Por supuesto, hablar del estado en equilibrio sólo tiene sentido en el límite termodinámico, esto es, cuando el número de partículas (o dados en este ejemplo) es muy grande ($N \rightarrow \infty$) tal que nuestro espacio de combinaciones pasa de ser una distribución binomial a gaussiana.

Regresemos ahora al contexto de gases diluidos. Imaginemos N partículas idénticas distribuidas en un volumen V . Ahora dividamos nuestro volumen en k cajas y sea N_j el número de partículas que hay dentro del volumen j -ésimo Δx_j y sea f_j la frecuencia, es decir, el número de partículas en el volumen Δx_j sobre el número total de partículas $f_j = N_j/N$. Denotemos por $\Omega(f)$ a todas las combinaciones posibles tal que $f_j = N_j/N$, entonces

$$\begin{aligned} \Omega(f_1 f_2 f_3 \cdots f_k) &\longrightarrow e^{-N \sum f_j \log f_j}, \\ N &\longrightarrow \infty. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Tomando logaritmo en ambas partes de (2.66) obtenemos que $1/N \log \Omega(f)$ converge a $-\sum f_j \log f_j$. Esto no es más que la versión discreta del funcional⁴ que Boltzmann define en su teorema \mathcal{H} el cual dice lo siguiente.

Sea $\mathcal{H}(t) = \int f(\xi, t) \log f(\xi, t) d\xi$, donde $f(\xi, t)$ es la función de distribución al tiempo t . La evolución temporal de \mathcal{H} es determinada por la evolución de $f(\xi, t)$, que en general no satisface la ecuación de Boltzmann. De hecho satisface la ecuación de Boltzmann sólo

⁴Un funcional es una función cuyo dominio es algún espacio de funciones y su rango o imagen son números reales o en general elementos de un campo, es decir, como funciones y escupe números.

cuando la hipótesis de caos molecular⁵ es válida. Entonces

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} \leq 0, \quad (2.67)$$

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = 0 \text{ si y sólo si } f \text{ es la distribución de Maxwell-Boltzmann.} \quad (2.68)$$

⁵La hipótesis de caos molecular asume que las velocidades entre cuales quiera 2 partículas no están correlacionadas entre sí incluso después de la colisión. Formalmente quiere decir que la probabilidad simultánea de encontrar a una partícula con velocidad ξ y otra con velocidad ξ' al tiempo t es $f(\xi, t)f(\xi', t)$. La hipótesis de caos molecular es importante y más adelante veremos el alcance de su validez para espacios donde la curvatura de la geometría deja de ser plana.

Capítulo 3

El Método de Malla de Boltzmann

3.1. Discretización de la Ecuación de Boltzmann

3.1.1. Discretización del Tiempo

Partiendo de la Ecuación de Boltzmann (2.49) en la ausencia de fuerzas externas y usando el término de colisión (2.50), escribimos

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \quad (3.1)$$

donde $f=f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ es la función de distribución de una partícula, $\boldsymbol{\xi}$ es la velocidad microscópica, τ es el tiempo de relajación debido a la colisión y f^{eq} es la función de distribución de Boltzmann-Maxwell (2.60)

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right), \quad (3.2)$$

donde D es la dimensión del espacio, $R = k_B/m$ está dada por la constante de Boltzmann k_B y la masa de la partícula m , y ρ , \mathbf{u} y T son la densidad de masa macroscópica, la velocidad macroscópica y la temperatura respectivamente.

La Ec.(3.1) puede ser escrita formalmente como una ecuación diferencial

$$\frac{df}{dt} + \frac{1}{\tau}f = \frac{1}{\tau}f^{eq}, \quad (3.3)$$

donde

$$\frac{d}{dt} := \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \quad (3.4)$$

es la derivada temporal a lo largo de la línea característica $\boldsymbol{\xi}$. Multiplicando por $e^{t/\lambda}$ en

ambos lados de la Ec.(3.3)

$$e^{t/\tau} \frac{df}{dt} + \frac{1}{\tau} f e^{t/\tau} = \frac{1}{\tau} f^{eq} e^{t/\tau} \quad (3.5)$$

se puede observar que se tiene el diferencial total de la función $e^{t/\tau} f$, es decir,

$$\frac{d(e^{t/\tau} f)}{dt} = e^{t/\tau} \frac{df}{dt} + \frac{1}{\tau} f e^{t/\tau}. \quad (3.6)$$

Por lo que la Ec.(3.1) puede escribirse como:

$$\frac{d(e^{t/\tau} f)}{dt} = \frac{1}{\tau} f^{eq} e^{t/\tau}. \quad (3.7)$$

Integrando la ecuación (3.7) sobre un intervalo temporal δ_t , tenemos en el lado izquierdo

$$\int_0^{\delta_t} d(e^{t'/\tau} f) = (e^{t'/\tau} f) \Big|_0^{\delta_t} = e^{\delta_t/\tau} f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t), \quad (3.8)$$

y en el lado derecho

$$\int_0^{\delta_t} \frac{1}{\tau} f^{eq} e^{t'/\tau} dt' = \frac{1}{\tau} \int_0^{\delta_t} f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} t', \boldsymbol{\xi}, t + t') e^{t'/\tau} dt'. \quad (3.9)$$

Finalmente, igualando (3.8) con (3.9) y despejando a $f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t)$ obtenemos:

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) = \frac{1}{\tau} e^{-\delta_t/\tau} \int_0^{\delta_t} f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} t', \boldsymbol{\xi}, t + t') e^{t'/\tau} dt' + e^{-\delta_t/\tau} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t). \quad (3.10)$$

Asumiendo que δ_t es suficientemente pequeño y que f^{eq} es suave (al menos localmente), podemos expandir a f^{eq} de la siguiente forma

$$f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} t', \boldsymbol{\xi}, t + t') = \left(1 - \frac{t'}{\delta_t}\right) f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{t'}{\delta_t} f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) + O(\delta_t^2), \quad (3.11)$$

donde se ha hecho una aproximación a primer orden en la derivada temporal (a un paso δ_t), y cuya validez se da para $0 \leq t' \leq \delta_t$.

Sustituyendo la función de distribución en equilibrio (3.11) en (3.10) obtenemos

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) &= f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - e^{-\delta_t/\tau} f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \\
&+ \frac{\tau}{\delta_t} f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - \frac{\tau}{\delta_t} e^{-\delta_t/\tau} f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \\
&+ f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) - \frac{\tau}{\delta_t} f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) \\
&+ \frac{\tau}{\delta_t} e^{-\delta_t/\tau} f^{eq}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) + e^{-\delta_t/\tau} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t). \quad (3.12)
\end{aligned}$$

Expandiendo en serie de Taylor a $e^{-\delta_t/\tau} = 1 - (\delta_t/\tau) + O(\delta_t^2)$ y sustituyéndola en (3.12)

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\delta_t}{\tau} f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - \frac{\delta_t}{\tau} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t). \quad (3.13)$$

Restando $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ de ambos lados de la Ec.(3.13) nos queda finalmente

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta_t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta_t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\frac{\delta_t}{\tau} [f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)]. \quad (3.14)$$

La Ec.(3.14) es la ecuación de evolución de la función de distribución f para tiempos discretos, también conocida como la Ecuación de Boltzmann Discretizada¹.

3.1.2. Cálculo de los Momentos Hidrodinámicos

Para poder calcular los momentos hidrodinámicos (2.39)-(2.42) a partir de la ecuación (3.14) se necesita una discretización apropiada del espacio de momentos $\boldsymbol{\xi}$. Dicha discretización es necesaria para poder aproximar las integrales en el espacio de momentos por medio de cuadraturas² que en general tienen la forma

$$\int \Psi(\boldsymbol{\xi}) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \sum_i W_i \Psi(\boldsymbol{\xi}_i) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_i, t), \quad (3.15)$$

donde $\Psi(\boldsymbol{\xi})$ es un polinomio, W_i es el coeficiente del peso de la cuadratura, y $\boldsymbol{\xi}_i$ es un conjunto discreto de velocidades que a la vez son las abscisas de la cuadratura. De esta

¹El lector puede notar que la expresión (3.13) es consistente con (2.48) tal y como se esperaba.

²Las cuadraturas es el nombre que reciben en general los métodos numéricos usados para aproximar integrales. En ésta tesis estamos interesados especialmente en la cuadratura de Gauss-Hermite (ver apéndice A).

forma podemos calcular los momentos como

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}, \quad (3.16)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i \xi_i f_i = \sum_i \xi_i f_i^{eq}, \quad (3.17)$$

$$E(x, t) \rho(x, t) = \frac{1}{2} \sum_i |\xi|^2 f_i = \frac{1}{2} \sum_i |\xi|^2 f_i^{eq}, \quad (3.18)$$

$$\rho(x, t) e(x, t) = \frac{1}{2} \sum_i (\xi_i - \mathbf{u})^2 f_i = \frac{1}{2} \sum_i (\xi_i - \mathbf{u})^2 f_i^{eq}, \quad (3.19)$$

donde

$$f_i := f_i(\mathbf{x}, t) := f(\mathbf{x}, \xi_i, t), \quad (3.20)$$

$$f_i^{eq} := f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) := f^{eq}(\mathbf{x}, \xi_i, t). \quad (3.21)$$

Se debe notar que f_i tiene las unidades de $fd\xi$.

3.2. Modélos de la Malla de Boltzmann en 2D

En esta sección se desarrollan explícitamente los cálculos para encontrar la forma de la función de distribución y en equilibrio discretizada para diferentes mallas. La discretización del espacio fase debe hacerse acoplando el espacio de momentos con la configuración espacial tal que la estructura de la malla es obtenida.

3.2.1. D2Q7

El modelo D2Q7 representa una malla triangular 2 dimensional con 7 diferentes velocidades tal que los nodos de la malla caen sobre los vértices de triángulos equiláteros como se muestra en la figura (3.1).

En este caso se ha elegido trabajar con coordenadas polares $\xi = \xi(\xi, \theta)$. Como se vio en la subsección 3.1.2, calcular los momentos hidrodinámicos es equivalente a evaluar la siguiente integral

$$I = \int \psi(\xi) f^{(eq)} d\xi, \quad (3.22)$$

donde $\psi(\xi)$ es un polinomio de ξ y $f^{(eq)}$ está dada por (2.60).

Sin pérdida de generalidad, podemos enfocarnos en el termino m, n de la expansión de ψ y trabajar con $\psi_{m,n}(\xi) = \xi_x^m \xi_y^n = \xi^{m+n} \cos^m \theta \sin^n \theta = (\sqrt{2RT})^{m+n} \zeta^{m+n} \cos^m \theta \sin^n \theta$, donde hemos introducido a $\zeta = \xi / \sqrt{2RT}$.

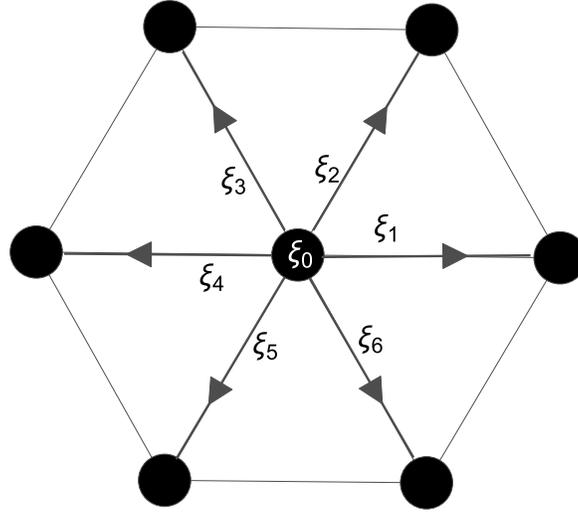


Figura 3.1: Se puede apreciar a partir de un vértice central las 7 posibles direcciones para la velocidad: $\xi_0=0$, $\xi_\alpha=\xi(\cos \theta_\alpha, \sin \theta_\alpha)$, donde $\theta_\alpha=(\alpha - 1)\pi/3$ para $\alpha=\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

De esta forma, la Ec.(3.22) se puede escribir como

$$I = \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{m+n} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\zeta^2} \zeta^{m+n} \cos^m \theta \sin^n \theta \left(1 + \frac{2\zeta(\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{u})}{\sqrt{2RT}} + \frac{\zeta^2(\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{u})^2}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) d\theta d\zeta, \quad (3.23)$$

donde $\hat{\mathbf{e}}=(\cos \theta, \sin \theta)$ y la distribución en equilibrio f^{eq} se ha truncado hasta segundo orden en \mathbf{u}

$$\begin{aligned} f^{eq} &= \frac{\rho}{(2\pi RT)} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right) \\ &= \frac{\rho}{(2\pi RT)} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}\right) \left(1 + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) + O(\mathbf{u}^3) \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$= \frac{\rho}{(2\pi RT)} \exp(-\zeta^2) \left(1 + \frac{2\zeta(\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{u})}{\sqrt{2RT}} + \frac{\zeta^2(\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{u})^2}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) + O(\mathbf{u}^3). \quad (3.25)$$

Para obtener las ecuaciones de Navier-Stokes a partir de la ecuación de Boltzmann [6], se deben de considerar las primeras dos aproximaciones de la función de distribución (es decir, $f^{eq} := f^{(0)}$ y $f^{(1)}$). Por tanto, dada la función de distribución en equilibrio en su forma (3.25), la cuadratura usada para evaluar los momentos hidrodinámicos debe de ser capaz

de calcular los siguientes momentos de f^{eq} de forma exacta:

$$\rho : 1, \xi_i, \xi_i \xi_j, \quad (3.26)$$

$$\mathbf{u} : \xi_i, \xi_i \xi_j, \xi_i \xi_k \xi_l, \quad (3.27)$$

$$T : \xi_i \xi_j, \xi_i \xi_j \xi_k, \xi_i \xi_j \xi_k \xi_l, \quad (3.28)$$

donde ξ_i es la componente de $\boldsymbol{\xi}$ en coordenadas cartesianas. Para modelos isotérmicos, que serán los discutidos de aquí en adelante, los momentos que deben de ser evaluados de forma exacta son $1, \boldsymbol{\xi}, \dots, \boldsymbol{\xi}^5$.

Para obtener la ecuación de la malla de Boltzmann con 7 velocidades, se debe discretizar la variable angular θ escogiendo 6 direcciones en el intervalo $[0, 2\pi)$, es decir,

$$\theta_i = (i-1)\frac{\pi}{3}, \quad i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}. \quad (3.29)$$

Con esta discretización de θ podemos ahora calcular la integral angular como una sumatoria

$$\int_0^{2\pi} \cos^m \theta \sin^n \theta d\theta = \begin{cases} \frac{\pi}{3} \sum_{i=1}^6 \cos^m \theta_i \sin^n \theta_i & \text{si } (m+n) \text{ es par,} \\ 0 & \text{si } (m+n) \text{ es impar,} \end{cases} \quad (3.30)$$

para $(m+n) \leq 5$. Sustituyendo (3.30) en (3.23) se obtiene

$$I = \begin{cases} \frac{\rho}{3} (\sqrt{2RT})^{m+n} \sum_{i=1}^6 \cos^m \theta_i \sin^n \theta_i \left(\left(1 - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right) I_{m+n} + \frac{(\hat{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{RT} I_{m+n+2} \right) & \text{si } (m+n) \text{ es par,} \\ \frac{\rho}{3} (\sqrt{2RT})^{m+n} \sum_{i=1}^6 \cos^m \theta_i \sin^n \theta_i \frac{2(\hat{e}_i \cdot \mathbf{u})}{\sqrt{2RT}} I_{m+n+1} & \text{si } (m+n) \text{ es impar,} \end{cases} \quad (3.31)$$

donde $\hat{e}_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$, y

$$I_{p=m+n} = \int_0^\infty (\zeta e^{-\zeta^2}) \zeta^p d\zeta \quad (3.32)$$

es el momento p -ésimo con respecto al peso $\zeta e^{-\zeta^2}$.

Aunque el modelo D2Q7 tiene 7 velocidades, la celeridad de éstas son dos solamente $\zeta_0 = 0$ y $\zeta_1 = \gamma$, donde γ es un parámetro a calcular. Debido a la forma de los pesos en la integral (3.32), la cuadratura de Radau-Gauss [9] es la mejor opción en este caso para evaluar la integral I_p :

$$I_p = \sum_{j=0}^1 \omega_j \zeta_j^p = \omega_0 \zeta_0^p + \omega_1 \zeta_1^p. \quad (3.33)$$

Por un lado tenemos que las integrales I_p para $p \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ valen:

$$I_0 = \int_0^\infty \zeta e^{-\zeta^2} = 1/2, \quad (3.34)$$

$$I_1 = \int_0^\infty \zeta^2 e^{-\zeta^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4}, \quad (3.35)$$

$$I_2 = \int_0^\infty \zeta^3 e^{-\zeta^2} = 1/2, \quad (3.36)$$

$$I_3 = \int_0^\infty \zeta^4 e^{-\zeta^2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8}, \quad (3.37)$$

$$I_4 = \int_0^\infty \zeta^5 e^{-\zeta^2} = 1. \quad (3.38)$$

Comparando las integrales (3.34)-(3.38) con (3.33) nos genera el siguiente conjunto de ecuaciones algebraicas

$$I_0 = \omega_0 + \omega_1 = 1/2, \quad (3.39)$$

$$I_2 = \omega_1 \gamma^2 = 1/2, \quad (3.40)$$

$$I_4 = \omega_1 \gamma^4 = 1. \quad (3.41)$$

Las integrales I_1 e I_3 no juegan ningún rol debido a la forma de (3.31). La solución a éste sistema de ecuaciones es

$$\omega_0 = 1/4, \quad (3.42)$$

$$\omega_1 = 1/2, \quad (3.43)$$

$$\zeta_1 = \gamma = \sqrt{2}. \quad (3.44)$$

Por lo tanto, en general tenemos

$$I_p = \frac{1}{4}(\zeta_0^p + \zeta_1^p), \quad p = 0, 2, 4. \quad (3.45)$$

Sustituyendo (3.45) en (3.31) obtenemos

$$\begin{aligned} I = & \frac{\rho}{12} (\sqrt{2RT})^{m+n} \sum_{i=1}^6 \cos^m \theta_i \sin^n \theta_i \left(\left(1 - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) (\zeta_0^{m+n} + \zeta_1^{m+n}) \right. \\ & \left. + \frac{2(\hat{e}_i \cdot \mathbf{u})}{\sqrt{2RT}} (\zeta_0^{m+n+1} + \zeta_1^{m+n+1}) + \frac{(\hat{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{RT} (\zeta_0^{m+n+2} + \zeta_1^{m+n+2}) \right). \end{aligned} \quad (3.46)$$

agrupando términos respecto a ζ_i

$$I = \frac{\rho}{12} (\sqrt{2RT})^{m+n} \sum_{i=1}^6 \cos^m \theta_i \sin^n \theta_i \zeta_0^{m+n} \left(1 - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{2(\hat{e}_i \cdot \mathbf{u})}{\sqrt{2RT}} \zeta_0 + \frac{(\hat{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{RT} \zeta_0^2 \right) \\ + \frac{\rho}{12} (\sqrt{2RT})^{m+n} \sum_{i=1}^6 \cos^m \theta_i \sin^n \theta_i \zeta_1^{m+n} \left(1 - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{2(\hat{e}_i \cdot \mathbf{u})}{\sqrt{2RT}} \zeta_1 + \frac{(\hat{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{RT} \zeta_1^2 \right). \quad (3.47)$$

Identificando los términos $\Psi_{m,n}(\xi_i) = \zeta_i^{m+n} (\sqrt{2RT})^{m+n} \cos^m \theta \sin^n \theta$, y recordando que $\zeta_0 = 0$ y $\zeta_1 = \sqrt{2}$ nos queda

$$I = \frac{\rho}{2} \Psi_{m,n}(\xi_0) \left(1 - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) + \frac{\rho}{12} \sum_{i=1}^6 \Psi_{m,n}(\xi_i) \left(1 + \frac{(\xi_i \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\xi_i \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right), \quad (3.48)$$

donde $|\xi_0| = \sqrt{2RT} \zeta_0 = 0$ y $\xi_i = \sqrt{2RT} \zeta_1 \hat{e}_i = 2\sqrt{RT} \hat{e}_i$.

Comparando la forma de (3.48) con (3.15) resulta evidente que la forma final de la función de distribución en equilibrio es

$$f_i^{eq} := f^{eq}(\mathbf{x}, \xi_i, t) = w_i \rho \left(1 + \frac{(\xi_i \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\xi_i \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right), \quad (3.49)$$

donde

$$w_i = \begin{cases} 1/2, & i = 0. \\ 1/12, & i = 1, 2, 3, 4, 5, 6. \end{cases} \quad (3.50)$$

En general, la magnitud de las velocidades es proporcional a la velocidad del sonido (2.25), por lo que definimos la velocidad de la malla

$$c_m^2 := \alpha^{-1} RT = \alpha^{-1} c_s^2, \quad (3.51)$$

donde α es una constante que sale de la cuadratura, para el caso de D2Q7 $\alpha = 2$. Dado que la velocidad del sonido isotérmica es constante, la fijamos a uno $c_s^2 = RT = 1$. De esta forma la velocidad de la malla es $c_m = 1/2$ por lo que la distribución en equilibrio toma la forma más usual

$$f_i^{eq} := f^{eq}(\mathbf{x}, \xi_i, t) = w_i \rho \left(1 + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})}{c_m^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_m^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_m^2} \right). \quad (3.52)$$

3.2.2. D2QN

Aquí haremos la construcción general de modelos en dos dimensiones con N velocidades D2QN. Empecemos por expandir la función de distribución en equilibrio sobre los polinomios de Hermite $H_n(\xi)$ (ver apéndice A)

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \xi, t) = w(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_n(\mathbf{x}, t) H_n(\xi), \quad (3.53)$$

donde $a_n(\mathbf{x}, t)$ son los coeficientes de la expansión, $w(\xi)$ son los pesos tal que los polinomios de Hermite forman una base ortogonal

$$\int w(\xi) H_m(\xi) H_n(\xi) d\xi = 0 \text{ para } m \neq n. \quad (3.54)$$

De esta forma podemos calcular los coeficientes a_n proyectando a f^{eq} con H_n

$$a_n(\mathbf{x}, t) = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \xi, t) H_n(\xi) d\xi. \quad (3.55)$$

Se puede observar en (4.23) que los coeficientes a_n están íntimamente relacionados con los momentos hidrodinámicos (2.62) y (2.63). Esta es la razón por la cual los polinomios de Hermite fueron elegidos para expandir la función de equilibrio.

Como se mencionó en la sección (2.1.5), dos sistemas tendrán la misma física si ambos comparten el mismo número de Reynolds, por lo que se suele adimensionalizar las ecuaciones de Navier-Stokes. Aquí haremos lo mismo, adimensionalizaremos la ecuación de Boltzmann no sólo por esta razón si no porque simplifica bastante las cuentas. Sean U , ℓ y ρ_0 la velocidad, la longitud y la densidad característica del sistema, entonces definimos las siguientes derivadas adimensionales

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\ell}{U} \frac{\partial}{\partial t}, \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \ell \frac{\partial}{\partial x}, \quad (3.57)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi'} = U \frac{\partial}{\partial \xi}. \quad (3.58)$$

Sustituyendo (3.56)-(3.58) en la ecuación de Boltzmann nos queda la ecuación adimensional de Boltzmann la cual mantiene la misma forma

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + \xi'^i \frac{\partial f'}{\partial x'^i} + \frac{F'^i}{\rho'} \frac{\partial f'}{\partial \xi'^i} = C'(f'), \quad (3.59)$$

donde $f' = fU^D/\rho_0$, $F' = F\ell/(\rho_0 U^2)$, $\rho' = \rho/\rho_0$ y $C'(f') = C(f)\ell U^2/\rho_0$. La función de

distribución sin dimensiones es

$$f^{eq} = \frac{\rho'}{(2\pi\theta')^{D/2}} \exp\left(\frac{-(\xi'^i - u'^i)(\xi'^j - u'^j)}{2\theta'}\right), \quad (3.60)$$

donde $\theta' = RT/U^2$.

De aquí en adelante se omitirán las primas ', y se usará la notación por componentes para representar tensores en general³.

Los pesos de los polinomios de Hermite tienen la forma

$$w(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \quad (3.61)$$

por lo que podemos escribir a la distribución en equilibrio como

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{D/2}} \exp\left(\frac{-(\xi - \mathbf{u})^2}{2\theta}\right) = \frac{\rho}{\theta^{D/2}} w\left(\frac{(\xi - \mathbf{u})}{\sqrt{\theta}}\right). \quad (3.62)$$

Para recuperar los primeros 3 momentos hidrodinámicos basta con expandir hasta cuarto orden en los polinomios de Hermite, esto nos conduce a calcular los primeros 4 coeficientes. Para el caso de modelos en dos dimensiones ($D = 2$), los coeficientes están dados por

$$a_n = \frac{\rho}{\theta} \int w\left(\frac{(\xi - \mathbf{u})}{\sqrt{\theta}}\right) H_n(\xi) d\xi. \quad (3.63)$$

Definiendo una nueva variable $\eta^i := (\xi^i - u^i)/\sqrt{\theta}$ implica $d\xi^i = \sqrt{\theta}d\eta^i$ por lo que la integral anterior toma la forma

$$a_n = \rho \int w(\eta) H_n(\sqrt{\theta}\eta + \mathbf{u}) d^2\eta. \quad (3.64)$$

Los primeros 4 polinomios de Hermite son:

$$H_0 = 1, \quad (3.65)$$

$$H_1^i = \xi^i, \quad (3.66)$$

$$H_2^{ij} = \xi^i \xi^j - \delta^{ij}, \quad (3.67)$$

$$H_3^{ijk} = \xi^i \xi^j \xi^k - (\delta^{ij} \xi^k + \delta^{kj} \xi^i + \delta^{ik} \xi^j), \quad (3.68)$$

donde hemos introducido la delta de Kronecker δ^{ij} .

³Con esta notación escribimos ϕ^i para vectores (tensores contravariantes de rango (1,0) y en general $\phi_{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_s}^{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r}$ son las componentes de un tensor de rango (r, s) con r componentes contravariantes y s covariantes.

El primer coeficiente a_0 resulta ser el primer momento hidrodinámico

$$\begin{aligned}
 a_0 &= \rho \int w(\eta) d^2\eta = \frac{\rho}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\eta^x \eta^x + \eta^y \eta^y}{2}\right) d\eta^x d\eta^y \\
 &= \frac{\rho}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{2\pi} \exp\left(-\frac{\eta^y \eta^y}{2}\right) d\eta^y \\
 &= \frac{\rho}{2\pi} 2\pi = \rho.
 \end{aligned} \tag{3.69}$$

Las componentes del segundo coeficiente son

$$\begin{aligned}
 a_1^i &= \rho \int w(\eta) H_1(\sqrt{\theta}\eta + \mathbf{u}) d^2\eta = \frac{\rho}{2\pi} \int \exp\left(-\frac{\delta^{ij} \eta^i \eta^j}{2}\right) (\sqrt{\theta}\eta^i + u^i) d\eta^i d\eta^j \\
 &= \frac{\rho}{2\pi} \left(\sqrt{\theta} \int \eta^i \exp\left(-\frac{\delta^{ij} \eta^i \eta^j}{2}\right) d\eta^i d\eta^j + u^i \int \exp\left(-\frac{\delta^{ij} \eta^i \eta^j}{2}\right) d\eta^i d\eta^j \right) \\
 &= \rho u^i.
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

Para el tercer coeficiente obtenemos

$$\begin{aligned}
 a_2^{ij} &= \rho \int w(\eta) H_2(\sqrt{\theta}\eta + \mathbf{u}) d^2\eta = \frac{\rho}{2\pi} \int \exp\left(-\frac{\delta^{ij} \eta^i \eta^j}{2}\right) (\theta \eta^i \eta^j + 2\sqrt{\theta} u^i \eta^j + u^i u^j - \theta \delta^{ij}) d\eta^i d\eta^j \\
 &= \frac{\rho}{2\pi} (\theta 2\pi \delta^{ij} + 0 + 2\pi u^i u^j - 2\pi \delta^{ij}) \\
 &= \rho (u^i u^j + (\theta - 1) \delta^{ij}),
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

y por último, el cuarto coeficiente de la expansión es

$$\begin{aligned}
 a_3^{ijk} &= \rho \int w(\eta) H_3(\sqrt{\theta}\eta + \mathbf{u}) d^2\eta \\
 &= \rho (u^i u^j u^k + (\theta - 1) (\delta^{ij} u^k + \delta^{jk} u^i + \delta^{ki} u^j)).
 \end{aligned} \tag{3.72}$$

Podemos identificar a θ con la velocidad del sonido y dado que es un modelo isotérmico podemos fijar $\theta = 1$ y los coeficientes se reducen a

$$a_0 = \rho, \tag{3.73}$$

$$a_1^i = \rho u^i, \tag{3.74}$$

$$a_2^{ij} = \rho u^i u^j, \tag{3.75}$$

$$a_3^{ijk} = \rho u^i u^j u^k. \tag{3.76}$$

Ahora sí ya tenemos todos los ingredientes para expandir a f^{eq} . Antes de proseguir será bueno mencionar que la mayoría de los trabajos con LBM usan la expansión del número

Mach pequeño, esto es, expandir la distribución en equilibrio hasta segundo orden en \mathbf{u} tal y como lo hicimos en (3.25). Esto nos garantiza que los primeros 3 momentos hidrodinámicos son recuperados de forma exacta. Por lo que para este caso, es suficiente con expandir la función de distribución en equilibrio hasta segundo orden en los polinomios de Hermite,

$$\begin{aligned} f^{eq}(\boldsymbol{\xi}) &\approx w(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^2 \frac{1}{n!} a_n H_n(\boldsymbol{\xi}) \\ &= w(\boldsymbol{\xi}) \rho \left(1 + \xi^i u^i + \frac{1}{2} u^i u^j (\xi^i \xi^j - \delta^{ij}) \right). \end{aligned} \quad (3.77)$$

Para discretizar el espacio de momentos usaremos la cuadratura de Gauss-Hermite (ver apéndice A) la cual nos permite aproximar integrales de la forma $\int w(\boldsymbol{\xi}) \Phi(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}$ a través de una sumatoria

$$\int w(\boldsymbol{\xi}) \Phi(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \approx \sum_{\lambda=1}^N w_\lambda \Phi(\boldsymbol{\xi}_\lambda), \quad (3.78)$$

donde $w_\lambda := w(\boldsymbol{\xi}_\lambda)$ y $\{\boldsymbol{\xi}_\lambda\}$ son las raíces de los polinomios de Hermite. La cuadratura de Gauss-Hermite también nos garantiza que si $\Phi(\boldsymbol{\xi})$ es un polinomio de grado G , entonces la integral puede ser calculada de forma exacta

$$\int w(\boldsymbol{\xi}) \Phi^{(G)}(\boldsymbol{\xi}) d\mathbf{x} = \sum_{\lambda=1}^N w_\lambda \Phi^{(G)}(\boldsymbol{\xi}_\lambda), \quad (3.79)$$

con al menos $N = (G + 1)/2$ número de abscisas $\boldsymbol{\xi}_\lambda$ asociadas con los pesos $w_\lambda := w(\boldsymbol{\xi}_\lambda)$. Esto nos genera un conjunto de N funciones de distribución asociadas con cada abscisa $\boldsymbol{\xi}_\lambda$

$$f_\lambda^{eq} := f^{eq}(\boldsymbol{\xi}_\lambda) = w_\lambda \rho \left(1 + \xi_\lambda^i u^i + \frac{1}{2} u^i u^j (\xi_\lambda^i \xi_\lambda^j - \delta^{ij}) \right). \quad (3.80)$$

Si normalizamos las velocidades respecto la velocidad de la malla $\xi_\lambda^i = \frac{c_\lambda^i}{c_m}$ y $u^i = \frac{u^i}{c_m}$, la ecuación (3.80) toma la forma más usada dentro de la literatura LBM

$$f_\lambda^{eq} = w_\lambda \rho \left(1 + \frac{c_\lambda^i u^i}{c_m^2} + \frac{c_\lambda^i c_\lambda^j u^i u^j}{2c_m^4} - \frac{u^i u^i}{2c_m^2} \right). \quad (3.81)$$

Aquí será bueno mencionar que la forma de la distribución en equilibrio discretizada (3.81) coincide con la obtenida para D2Q7 (3.52). Esto tiene que ver con que la expansión usada en D2Q7 (conocida como número Mach pequeño) fue a segundo orden en la velocidad ($\mathcal{O}(\mathbf{u}^3)$), pero si uno quiere dejar más términos en la expansión, estos no coincidirán necesariamente con la expansión en la base de Hermite. Debido a la ortogonalidad de los polinomios de Hermite, esta no mezcla momentos de diferentes órdenes, mientras que

la expansión en Mach pequeños sí. La función de distribución en equilibrio en su forma discreta (3.81) recobra los primeros 3 momentos (densidad, momento, energía) de forma exacta, pero si se quiere alcanzar la forma correcta del término de disipación, es necesario recuperar también hasta el cuarto momento. Dicho esto, expandamos la función de distribución en equilibrio hasta tercer orden en los polinomios de Hermite

$$\begin{aligned}
f^{eq}(\xi) &\approx w(\xi) \sum_{n=0}^3 \frac{1}{n!} a_n H_n(\xi) \\
&= w(\xi) \rho \left[1 + \xi^i u^i + \frac{1}{2} (u^i u^j) (\xi^i \xi^j - \delta^{ij}) + \right. \\
&\quad \left. \frac{1}{6} (u^i u^j u^k) (\xi^i \xi^j \xi^k - (\delta^{ij} \xi^k + \delta^{kj} \xi^i + \delta^{ik} \xi^j)) \right].
\end{aligned} \tag{3.82}$$

Aplicando la cuadratura de Gauss-Hermite en (3.82) y haciendo la normalización respecto la velocidad de la malla obtenemos finalmente

$$f_\lambda^{eq} = w_\lambda \rho \left[1 + \frac{c_\lambda^i u^i}{c_m^2} + \frac{c_\lambda^i c_\lambda^j u^i u^j}{2c_m^4} - \frac{u^i u^i}{2c_m^2} + \frac{c_\lambda^i c_\lambda^j c_\lambda^k u^i u^j u^k}{6c_m^6} - \frac{c_\lambda^i u^i u^j u^j}{2c_m^4} \right]. \tag{3.83}$$

Esta formulación nos permite escoger cualquier conjunto de pesos w_λ compatible con las velocidades $\{c_\lambda\}$ escogidas y con su respectiva velocidad de malla. En la tabla (3.1) se muestran los valores de todos estos conjuntos para diferentes modelos.

3.3. Implementación

Hasta ahora hemos discretizado la función de distribución y de equilibrio en el espacio de momentos usando la cuadratura de Gauss-Hermite, por lo que tenemos N ecuaciones de Boltzmann, una para cada f_λ

$$\frac{\partial f_\lambda}{\partial t} + c_\lambda^i \frac{\partial f}{\partial x^i} = -\frac{f_\lambda - f_\lambda^{eq}}{\tau}. \tag{3.84}$$

Podemos discretizar en el tiempo la ecuación (3.84) de la misma forma como se mostró en la sección 3.1.1 obteniendo así N ecuaciones de evolución

$$f_\lambda(x^i + c_\lambda^i \delta_t, c_\lambda^i, t + \delta_t) - f_\lambda(x^i, c_\lambda^i, t) = -\frac{\delta_t}{\tau} \left[f_\lambda(x^i, c_\lambda^i, t) - f_\lambda^{eq}(x^i, c_\lambda^i, t) \right]. \tag{3.85}$$

Hay que observar que en la ecuación (3.84) las funciones f_λ y f_λ^{eq} dependen continuamente de la posición x^i . Para discretizar la configuración espacial, nos paramos en un punto

Modelo	c_λ	w_λ	c_m
D2Q7	(0,0) ($\cos \theta_\lambda, \sin \theta_\lambda$)	1/2 1/12	1/2
D2Q9	(0,0) (0, ± 1), (± 1 , 0) (± 1 , ± 1)	4/9 1/9 1/36	$1/\sqrt{3}$
D2Q17	(0,0) (0, ± 1), (± 1 , 0) (± 1 , ± 1) (± 2 , ± 2) (0, ± 3), (± 3 , 0)	$\frac{575+193\sqrt{193}}{8100}$ $\frac{3355-91\sqrt{193}}{18000}$ $\frac{655+17\sqrt{193}}{27000}$ $\frac{685-49\sqrt{193}}{54000}$ $\frac{1445-101\sqrt{193}}{162000}$	$\sqrt{\frac{25-\sqrt{193}}{30}}$
D2Q25	(0, 0) (0, ± 1), (± 1 , 0) (0, ± 3), (± 3 , 0) (± 1 , ± 1) (± 1 , ± 3), (± 3 , ± 1) (± 3 , ± 3)	$\frac{416+128\sqrt{10}}{2025}$ $\frac{22+4\sqrt{10}}{300}$ $\frac{14+4\sqrt{10}}{8100}$ $\frac{666-144\sqrt{10}}{6400}$ $\frac{178-56\sqrt{10}}{19200}$ $\frac{506-160\sqrt{10}}{518400}$	$\sqrt{1 - \sqrt{\frac{2}{5}}}$

Tabla 3.1: Aquí se muestran los valores de los pesos w_λ , el conjunto de velocidades c_λ (absisas de la cuadratura) y la velocidad de la malla c_m para 4 modelos diferentes. Los primeros dos modelos, D2Q7 y D2Q9, se usan junto con la ecuación (3.81) mientras que si se quiere usar la ecuación (3.83) es necesario usar los modelos D2Q17 ó D2Q25 para garantizar que se recuperan los primeros 4 momentos.

de referencia x^i tal que si se escoge un modelo con N velocidades entonces se requieren N puntos $\{x_\lambda^i\}_{\lambda=1,\dots,N}$, tal que $x_\lambda^i = x^i + \delta_t c_\lambda^i$.

Para lograr la evolución en un paso completo δ_t , la ecuación (3.84) se calcula en 2 diferentes pasos. En el primero se calcula los nuevos valores de la función de distribución en un mismo punto debido a la colisión de las partículas \hat{f} , por esto se le llama paso de colisión

$$\hat{f}_\lambda(x^i, c_\lambda^i, t) = f_\lambda(x^i, c_\lambda^i, t) - \frac{\delta_t}{\tau} [f_\lambda(x^i, c_\lambda^i, t) - f_\lambda^{eq}(x^i, c_\lambda^i, t)]. \quad (3.86)$$

El segundo paso consiste en propagar esta información hacia los puntos $x^i = x^i + \delta_t c_\lambda^i$

$$f_\lambda(x^i + c_\lambda^i \delta_t, c_\lambda^i, t + \delta_t) = \hat{f}_\lambda(x^i, c_\lambda^i, t). \quad (3.87)$$

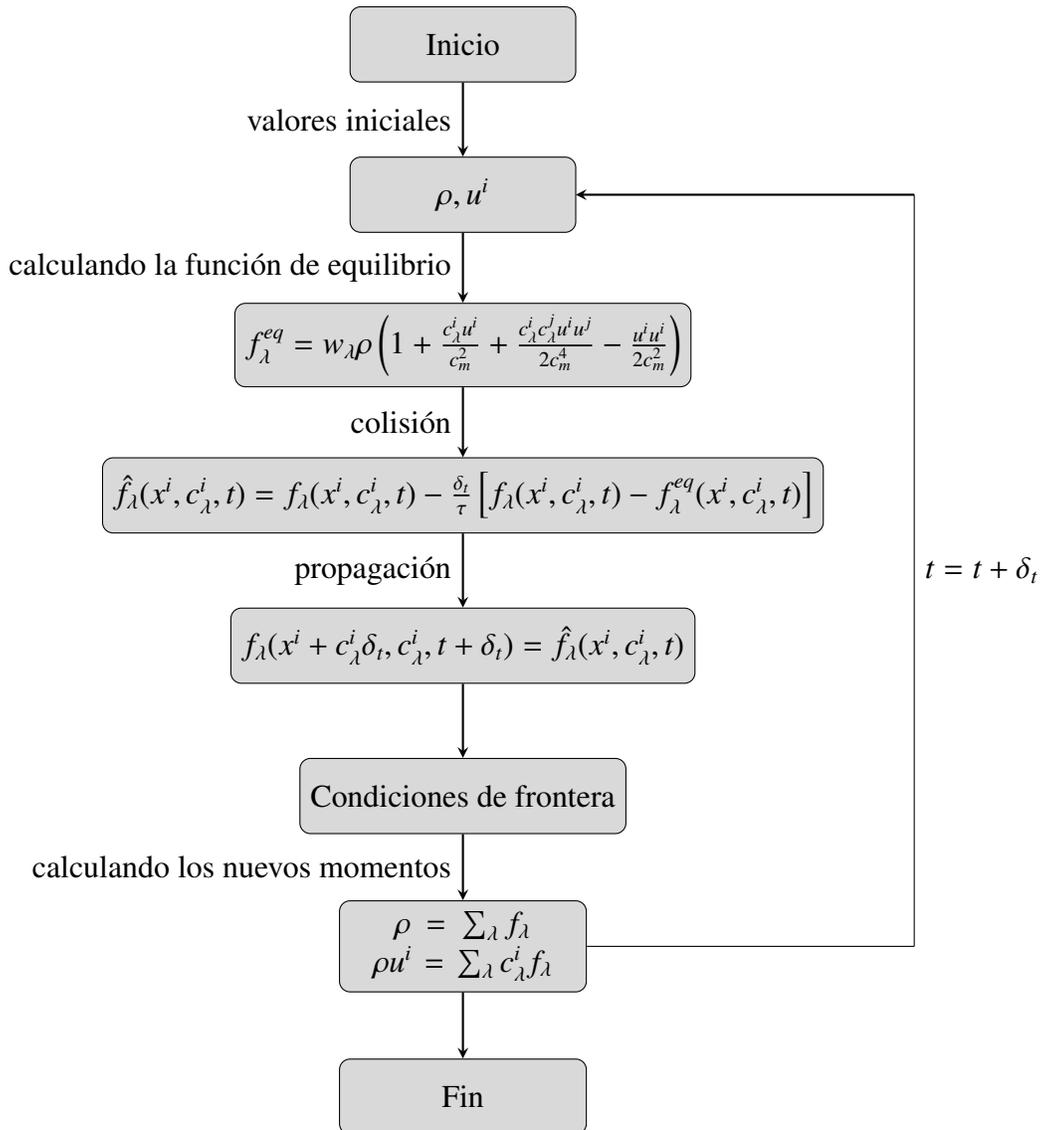
Finalmente podemos calcular los nuevos valores de la densidad ρ y del campo de velocidades u^i

$$\rho = \sum_{\lambda}^N f_\lambda, \quad (3.88)$$

$$\rho u^i = \sum_{\lambda}^N c_\lambda^i f_\lambda. \quad (3.89)$$

En la siguiente página se muestra el algoritmo central de LBM.

Algoritmo central de LBM:



3.4. Aplicaciones

Antes de pasar a las aplicaciones, necesitamos una forma de relacionar los parámetros de LBM ($\tau, \Delta x, \delta_t$) con la viscosidad cinemática ν , la cual se encuentra implícitamente en las simulaciones LBM y explícitamente en las ecuaciones de Navier-Stokes. La forma de hacerlo es a través de la expansión de Chapman-Enskog [11], la cual se basa en expansiones multiescala de la función de distribución así como de las variables, y aunque éste método es una derivación formal⁴ no es muy bien vista por los matemáticos. La viscosidad cinemática en función de los parámetros de LBM es

$$\nu = \left(\tau - \frac{\delta_t}{2} \right) c_m^2. \quad (3.90)$$

En esta sección se estudian 3 sistemas hidrodinámicos diferentes con los cuales medimos la precisión del método usando dos modelos distintos D2Q7 y D2Q9. En cada uno de los sistemas se derivan las condiciones de frontera a usar y cuyo conjunto total abarca la mayoría de las condiciones más usadas dentro de LBM. Para el flujo de Couette se muestran las condiciones de frontera tipo rebote en una pared sólida, para una pared sólida con movimiento uniforme y del tipo periódicas. En Poiseuille, se muestra cómo calcular las funciones de distribución en fronteras abiertas donde se conoce la velocidad o solo una componente y la densidad. Para el tercer problema se considera una cavidad cuadrada tal que la tapa superior se mueve a velocidad constante. Allí mostramos cómo elegir parámetros LBM ($\Delta x = \delta_t = 1$) a partir de los parámetros físicos.

3.4.1. Flujo Couette

Consideremos el flujo entre dos placas paralelas de largo L separadas a una distancia d tal que la placa superior se mueve con una velocidad relativa a la otra u_o en dirección de las equis. Nosotros consideramos un dominio numérico de $n \times m$ puntos tal que $d = m\Delta y$. Para el caso de D2Q7 $\Delta y = 0.75$ y a parte pedimos que m sea par debido a las simetrías de la malla. Para el modelo D2Q9 $\Delta y = 1$. En cada punto de las fronteras es necesario calcular los valores de las funciones de distribución incógnita, es decir, aquellas que no se pueden saber por el paso de propagación. En las figuras (3.2) y (3.3) se puede ver la estructura general de cada malla.

Empecemos con la frontera Sur ($i, 0$), $i \in \{1, \dots, n\}$. Como esta frontera se supone es una placa en reposo, la condición de frontera que se utiliza es la de rebote, es decir, que adquieren los valores de las funciones de distribución que después del paso de propagación

⁴En matemáticas, cuando se habla de obtener soluciones formales de una ecuación diferencial (ODE o PDE) se refiere a considerar símbolos bien definidos y manipularlos con reglas bien definidas pero sin preocuparse por cuestiones de convergencia o incluso sentido matemático.

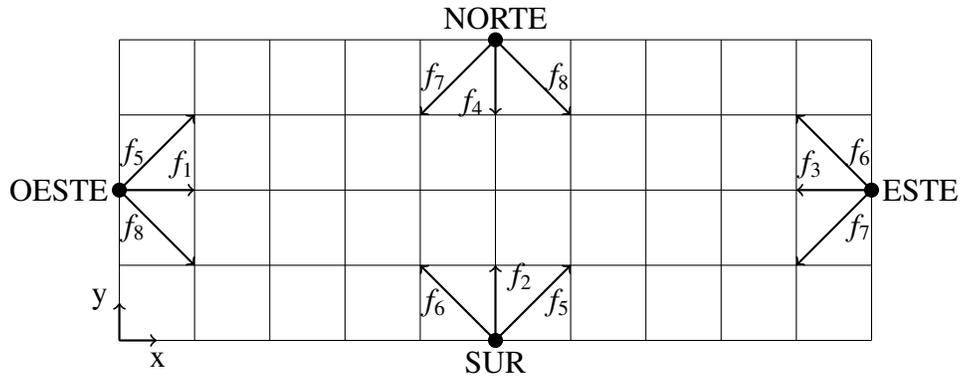


Figura 3.2: Estructura de la malla D2Q9. Se observan puntos en cada una de las fronteras y sus respectivas funciones de distribución incógnitas.

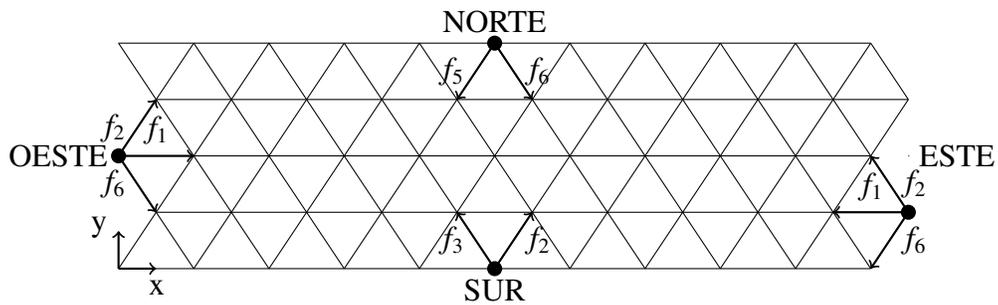


Figura 3.3: Estructura de la malla D2Q7. Se puede observar puntos representativos, uno en cada una de las fronteras y las respectivas funciones de distribución incógnitas. Aquí la frontera Oeste cae en los puntos $(0, j)$ donde j es par y la frontera este donde j es par.

apuntan hacia afuera de la frontera. Para el caso de D2Q7 se tiene

$$\begin{aligned} f_2 &= f_5, \\ f_3 &= f_6. \end{aligned}$$

Para D2Q9 las funciones de distribución en la placa inferior después de la propagación son

$$\begin{aligned} f_2 &= f_4, \\ f_5 &= f_7, \\ f_6 &= f_8. \end{aligned}$$

La frontera Norte (i, m) , $i \in \{1, \dots, n\}$, que es la placa con velocidad constante u_o requiere un poco más de trabajo aunque la idea es simple. Dado que la placa se mueve a una velocidad constante, se hace un cambio de marco de referencia al de la placa, ahí se aplica la condición de rebote y luego se vuelve a transformar el marco de referencia. De esta forma el valor de las función de distribución para fronteras sólidas y con velocidad \mathbf{u} de forma más general está dada por [12]

$$f_{\lambda'}(\mathbf{x}, t) = f_{\lambda}(\mathbf{x}, t) - 2w_{\lambda}\rho_N \frac{c_{\lambda} \cdot \mathbf{u}}{c_m^2}, \quad (3.91)$$

donde f_{λ} es la función de distribución simétrica de $f_{\lambda'}$ respecto a la frontera después del paso de propagación. Claramente si $\mathbf{u} = 0$ obtenemos las reglas de rebote usuales. Para calcular ρ_N primero debemos sustituir explícitamente $\mathbf{u} = (u_o, 0)$ en la ecuación (3.89) tomando solo la contribución en la componente de las y (ρu^y)

$$0 = \sum_{\lambda} f_{\lambda}, \quad (3.92)$$

y luego usar ésta ecuación como constricción y poder calcular ρ_N . Explícitamente, para el modelo D2Q7 tenemos

$$\rho_N = f_0 + f_1 + f_4 + 2(f_2 + f_3), \quad (3.93)$$

$$f_5 = f_2 - 8\rho_N u_o w_2 c_2^x, \quad (3.94)$$

$$f_6 = f_3 - 8\rho_N u_o w_3 c_3^x. \quad (3.95)$$

Para el modelo D2Q9 obtenemos

$$\rho_N = f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 + f_5), \quad (3.96)$$

$$f_4 = f_2, \quad (3.97)$$

$$f_7 = f_5 - \frac{\rho_N u_o}{6}, \quad (3.98)$$

$$f_8 = f_6 + \frac{\rho_N u_o}{6}. \quad (3.99)$$

Para las fronteras Este y Oeste, implementamos las condiciones de frontera periódicas, esto debido a la naturaleza del problema. En las condiciones de frontera tipo periódicas simplemente copiamos el valor de las funciones de distribución que sí conocemos en una frontera en la otra. En el caso de D2Q9 se tiene que después del paso de propagación las funciones de distribución son

$$f_1^{0,j} = f_1^{n,j}, \quad (3.100)$$

$$f_5^{0,j} = f_5^{n,j}, \quad (3.101)$$

$$f_8^{0,j} = f_8^{n,j}, \quad (3.102)$$

$$f_3^{n,j} = f_3^{0,j}, \quad (3.103)$$

$$f_6^{n,j} = f_6^{0,j}, \quad (3.104)$$

$$f_7^{n,j} = f_7^{0,j}, \quad (3.105)$$

donde $f_\lambda^{i,j}$ es la función de distribución asociada a c_λ en el punto (i, j) de la malla.

En el caso D2Q7 tenemos que dar las correcciones después del paso de colisión, las cuales son

$$f_1^{n,j} = f_1^{0,j} = \hat{f}_1^{n-1,j}, \forall j. \quad (3.106)$$

$$f_2^{0,j} = f_2^{n,j} = \hat{f}_2^{n-1,j-1} \text{ si } j \text{ es par.} \quad (3.107)$$

$$f_3^{0,j} = f_3^{n,j} = \hat{f}_3^{1,j-1} \text{ si } j \text{ es impar.} \quad (3.108)$$

$$f_4^{0,j} = f_4^{n,j} = \hat{f}_4^{1,j}, \forall j. \quad (3.109)$$

$$f_5^{0,j} = f_5^{n,j} = \hat{f}_5^{1,j+1} \text{ si } j \text{ es impar.} \quad (3.110)$$

$$f_6^{0,j} = f_6^{n,j} = \hat{f}_6^{n-1,j+1} \text{ si } j \text{ es par.} \quad (3.111)$$

En las figuras (3.4) y (3.5) se muestra el perfil de velocidad normalizado u/u_{max} respecto a la velocidad máxima del sistema $u_{max} = u_o$. Los cortes corresponden a los puntos $(n/2, j)$, $j \in \{1, \dots, m\}$ en ambos modelos.

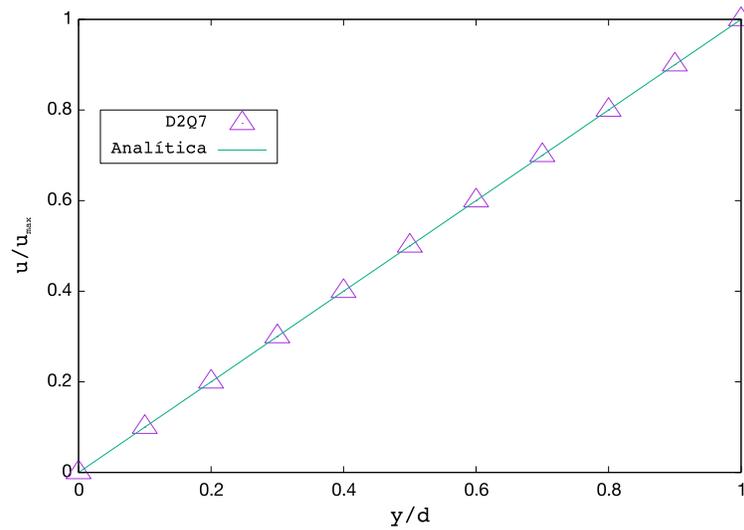


Figura 3.4: Comparación entre la simulación numérica usando el modelo D2Q7 y la solución analítica. Los parámetros utilizados fueron $\Delta x = 1$, $\delta_t = 1$, $\Delta y = 0.75$, $\tau = 0.95$ y $\nu = 0.15$ en una malla de $n \times m = 21 \times 11$ puntos.

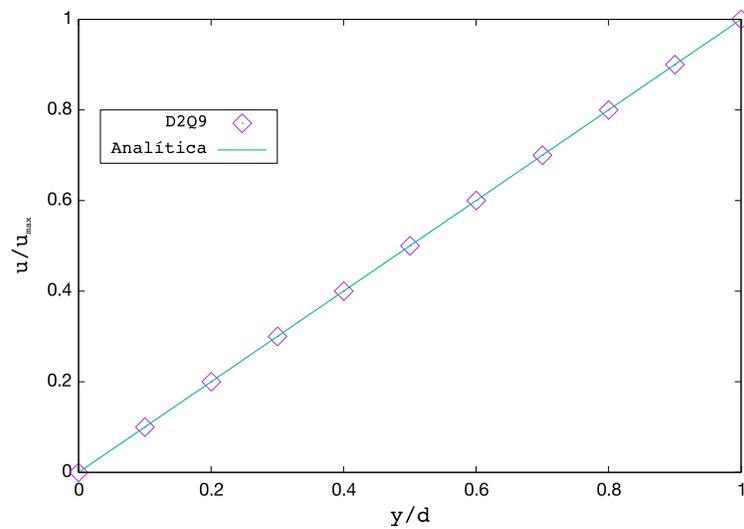


Figura 3.5: Comparación entre la simulación numérica usando el modelo D2Q9 y la solución analítica. Los parámetros utilizados fueron $\Delta x = \Delta y = \delta_t = 1$, $\tau = 0.95$ y $\nu = 0.15$ en una malla de $n \times m = 21 \times 11$ puntos.

3.4.2. Flujo de Poiseuille

Como se vio en la sección 2.2 el flujo dentro de una tubería de longitud L y anchura d se puede obtener a través de un gradiente de presión

$$\frac{\Delta p}{L} = \frac{8\eta u_{max}}{d^2}, \quad (3.112)$$

tal que la solución analítica del flujo estacionario (2.34) queda

$$u^x(y) = -\frac{4u_{max}}{d^2}y(y-d). \quad (3.113)$$

La presión está relacionada con la densidad a través de (2.21), pero como nuestra función de distribución está ahora en función de las velocidades $\{c_\lambda\}_{\lambda \in I}$ la ecuación de estado isotérmica relaciona la presión con la densidad de forma lineal con la velocidad de la malla como factor de proporcionalidad en vez de la del sonido $p = \rho c_m^2$. Esto nos permite calcular las condiciones iniciales para la densidad ρ dada la presión p . Por ejemplo, si uno fija la densidad en la salida de la tubería ρ_{out} , entonces la densidad de entrada es

$$\rho_{in} = c_s^{-2}\Delta p + \rho_{out}. \quad (3.114)$$

La condición de frontera en la pared inferior de la tubería es la misma que para Couette, es decir, de rebote. Para la pared superior, como ahora está fija, la condición de frontera también es de rebote por lo que para D2Q7 son

$$f_5 = f_2, \quad (3.115)$$

$$f_6 = f_3 \quad (3.116)$$

mientras que para D2Q9 se tiene

$$f_4 = f_2, \quad (3.117)$$

$$f_7 = f_5, \quad (3.118)$$

$$f_8 = f_6. \quad (3.119)$$

Ahora necesitamos una forma de implementar fronteras abiertas en los extremos de la tubería. Empecemos por el extremo de salida que sería la frontera Este. Por supuesto, estas condiciones dependen del modelo a usar por lo que primero lo haremos para D2Q9 y después el de D2Q7.

Supongamos que conocemos el valor del campo de velocidades ahí $\mathbf{u}_{out}(x=L) = (u_{out}, v_{out})$, y queremos determinar las funciones de distribución incógnita y a ρ usando los

momentos

$$\rho_{out} = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8, \quad (3.120)$$

$$\rho_{out} u_{out} = f_1 + f_5 + f_8 - f_6 - f_3 - f_7, \quad (3.121)$$

$$\rho_{out} v_{out} = f_2 + f_5 + f_6 - f_7 - f_4 - f_8, \quad (3.122)$$

donde las funciones incógnita en este caso son f_3 , f_6 y f_7 . Consistencia entre las ecuaciones (3.120) y (3.122) nos lleva a que

$$\rho_{out} = \frac{1}{1 + u_{out}} [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_1 + f_5 + f_8)]. \quad (3.123)$$

Aún nos falta determinar las tres funciones incógnita. Para hacer esto, necesitamos cerrar el sistema de ecuaciones y se hace asumiendo que la regla de rebote es válida para la parte de no equilibrio ($f_\lambda = f_\lambda^{noeq} + f_\lambda^{eq}$) de la función de distribución que sean normales a la frontera, es decir

$$f_3 - f_3^{eq} = f_1 - f_1^{eq}, \quad (3.124)$$

donde $f_{1,3}^{eq}$ se calcula usando (3.81)

$$f_1^{eq} = \frac{\rho_{out}}{9} \left[1 + 3u_{out} + \frac{9}{2}u_{out}^2 - \frac{3}{2}(u_{out}^2 + v_{out}^2) \right], \quad (3.125)$$

$$f_3^{eq} = \frac{\rho_{out}}{9} \left[1 - 3u_{out} + \frac{9}{2}u_{out}^2 - \frac{3}{2}(u_{out}^2 + v_{out}^2) \right]. \quad (3.126)$$

Sustituyendo estas ecuaciones en (3.124) encontramos a f_3

$$f_3 = f_1 - \frac{2}{3}\rho_{out}u_{out}. \quad (3.127)$$

Finalmente con la ayuda de (3.127) podemos calcular f_6 y f_7 usando los momentos (3.121)-(3.122)

$$f_7 = f_5 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{1}{6}\rho_{out}u_{out} - \frac{1}{2}\rho_{out}v_{out}, \quad (3.128)$$

$$f_6 = f_8 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{1}{6}\rho_{out}u_{out} + \frac{1}{2}\rho_{out}v_{out}. \quad (3.129)$$

Ahora repetiremos el análisis para D2Q7. Aquí las funciones incógnita son f_3 , f_4 y f_5 .

Los momentos toman la forma

$$\rho_{out} = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6, \quad (3.130)$$

$$\rho_{out}u_{out} = f_1 + \frac{1}{2}(f_2 + f_6) - \frac{1}{2}(f_3 + f_5) - f_4, \quad (3.131)$$

$$\rho_{out}v_{out} = \frac{3}{4}(f_2 + f_3 - f_5 - f_6). \quad (3.132)$$

Si multiplicamos (3.131) por 2 y lo sumamos con (3.130) obtenemos

$$\rho_{out}(1 + 2u_{out}) = f_0 + 3f_1 + 2f_2 + 2f_6 - f_4. \quad (3.133)$$

Para saber el valor de f_4 usamos de nuevo que la regla de rebote es válida para la parte de no equilibrio normal a la frontera. En este caso

$$f_4 - f_4^{eq} = f_1 - f_1^{eq}, \quad (3.134)$$

donde $f_{1,4}^{eq}$ se calcula usando (3.81)

$$f_1^{eq} = \frac{\rho_{out}}{12} \left[1 + 4u_{out} + 8u_{out}^2 - 2(u_{out}^2 + v_{out}^2) \right], \quad (3.135)$$

$$f_4^{eq} = \frac{\rho_{out}}{12} \left[1 - 4u_{out} + 8u_{out}^2 - 2(u_{out}^2 + v_{out}^2) \right]. \quad (3.136)$$

Sustituyendo estas ecuaciones en (3.134) y resolviendo para f_4 se obtiene

$$f_4 = f_1 - \frac{2}{3}\rho_{out}u_{out}. \quad (3.137)$$

Usando este valor de f_4 en (3.133) nos permite calcular ρ_{out}

$$\rho_{out} = \frac{1}{1 + \frac{4}{3}u_{out}} \left[f_0 + 2(f_1 + f_2 + f_6) \right]. \quad (3.138)$$

Para determinar f_3 y f_5 basta con invertir los momentos (3.131) y (3.132) dado que ya conocemos f_4 , esto nos genera dos ecuaciones con 2 incógnitas cuya solución es

$$f_3 = f_6 - \frac{1}{3}\rho_{out}u_{out} + \frac{2}{3}\rho_{out}v_{out}, \quad (3.139)$$

$$f_5 = f_2 - \frac{1}{3}\rho_{out}u_{out} - \frac{2}{3}\rho_{out}v_{out}. \quad (3.140)$$

Regresemos a nuestro problema. Sabemos que la solución alcanza un estado estacionario y además que la componente-y de la velocidad es cero $\mathbf{u} = (u_{out}, 0)$. Dado que conocemos una componente de la velocidad podemos dejar la densidad fija ρ_{out} y calcular la

velocidad de salida u_{out} invirtiendo la ecuación (3.123) para D2Q9 y en (3.138) para D2Q7

$$u_{out} = \frac{1}{\rho_{out}} [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_1 + f_5 + f_8)] - 1, \quad (\text{D2Q9}) \quad (3.141)$$

$$u_{out} = \frac{3}{4\rho_{out}} [f_0 + 2(f_1 + f_2 + f_6)] - \frac{3}{4}. \quad (\text{D2Q7}) \quad (3.142)$$

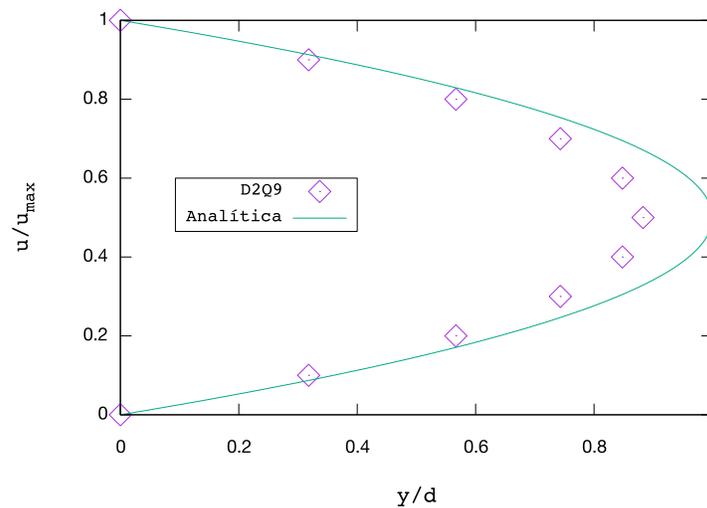


Figura 3.6: Comparación entre la simulación numérica usando el modelo D2Q9 y la solución analítica. Aunque aquí sí se muestra una diferencia considerable entre las soluciones, los resultados son consistentes con los esperados en LBM [16]. Esto se debe a los efectos de compresibilidad del método así como las condiciones de frontera juegan un rol importante. Cambiando las condiciones de frontera de rebote a medio rebote es posible alcanzar la solución deseada o aplicando una fuerza de cuerpo en el fluido. Los parámetros utilizados fueron $\Delta x = \Delta y = \delta_t = 1$, $\tau = 0.93$ y $\nu = 0.14$ en una malla de $n \times m = 10 \times 16$ puntos.

La frontera Oeste, la cual es donde suponemos entra el flujo en la tubería, requiere un tratamiento similar al ya hecho para el extremo opuesto. De nuevo, si suponemos que conocemos la velocidad de entrada $\mathbf{u} = (u_{in}, v_{in})$ podemos calcular las funciones incógnitas f_1, f_5, f_8 y la densidad ρ_{in} de forma análoga a lo hecho en la frontera Este. De esta forma

para D2Q9 tenemos:

$$\rho_{in} = \frac{1}{1 - u_{in}} [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)], \quad (3.143)$$

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3}\rho_{in}u_{in}, \quad (3.144)$$

$$f_5 = f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_{in} + \frac{1}{2}\rho_{in}v_{in}, \quad (3.145)$$

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_{in} - \frac{1}{2}\rho_{in}v_{in}, \quad (3.146)$$

y para D2Q7:

$$\rho_{in} = \frac{1}{1 - \frac{4}{3}u_{in}} [f_0 + 2(f_3 + f_4 + f_5)], \quad (3.147)$$

$$f_1 = f_4 + \frac{2}{3}\rho_{in}u_{in}, \quad (3.148)$$

$$f_6 = f_3 + \frac{1}{3}\rho_{in}u_{in} - \frac{2}{3}\rho_{in}v_{in}, \quad (3.149)$$

$$f_2 = f_5 + \frac{1}{3}\rho_{in}u_{in} + \frac{2}{3}\rho_{in}v_{in}. \quad (3.150)$$

3.4.3. Flujos de Couette sobre una cavidad cuadrada

Considere una cavidad cuadrada de $d = .20\text{m}$ por lado llena con aceite de motor a 15°C cuya viscosidad cinemática es $\nu_p = 1.2 \times 10^{-3}\text{m}^2/\text{s}$. La tapa superior se mueve con velocidad de $u_p = 6\text{m/s}$. El número de Reynolds es $Re = u * d / \nu_p = 1000$.

En las simulaciones LBM uno tiene la libertad de escoger la velocidad (no mayor a .4) u_o y viscosidad ν manteniendo Reynolds fijo. En este caso, si escogemos $u_o = 0.1$ y $\nu = 0.01$ obtenemos $Re = 0.1 * d_{lbm} / 0.01 = 1000$, donde $d_{lbm} = n\delta x = n$. Nosotros fijamos $\delta x = 1$ por lo que $n = 100$. Es decir, nuestra malla tiene $n \times n$ puntos en caso de D2Q9.

Las fronteras Este, Oeste y Sur son tratadas con la condición de rebote mientras mientras que en la frontera Norte que es donde está la tapa se usa la misma condición que en Couette.

En las figura (3.7) se muestran las líneas de corriente para diferentes número de Reynolds. Los resultados concuerdan bastante bien con estudios previos [14, 15] en donde se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes con diferencias finitas y métodos espectrales respectivamente.

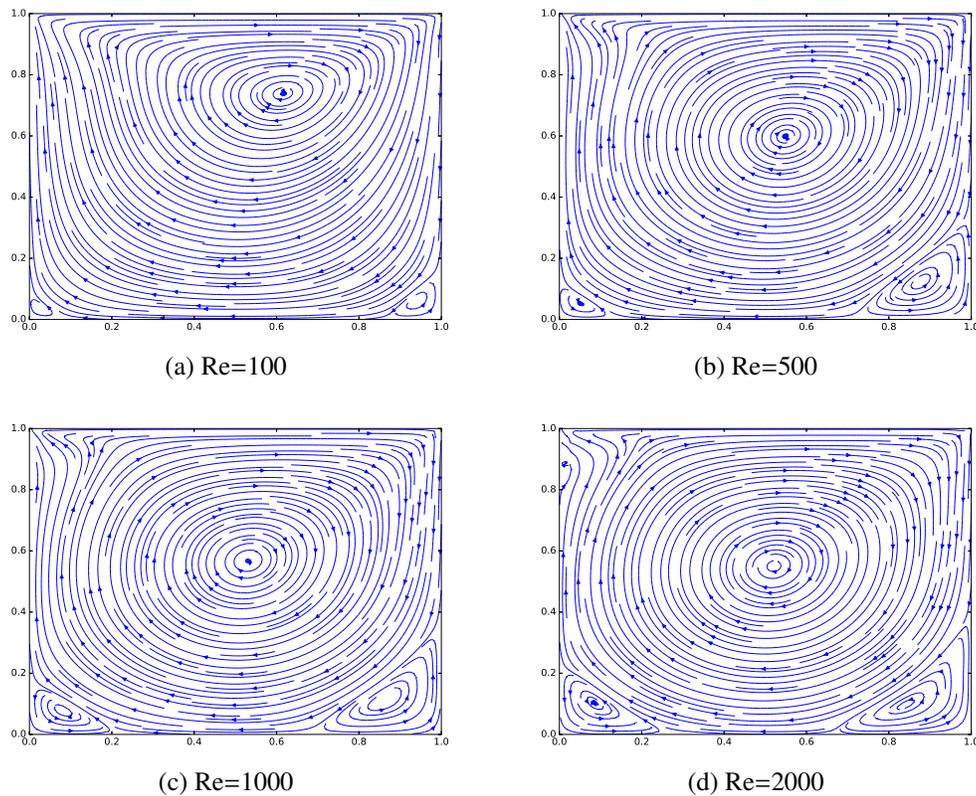


Figura 3.7: Líneas de corriente para distintos números de Reynolds usando el modelo D2Q9. Se puede apreciar la formación de un gran vórtice en el centro y dos pequeños en las esquinas inferiores. En (d) se puede observar el nacimiento de un tercer vórtice en la parte superior derecha tal y como se predice en [14, 15].

3.5. Análisis de Convergencia

El método de malla de Boltzmann es una aproximación a segundo orden en el número de Kudsén de las ecuaciones de Navier-Stokes [11], donde los errores de truncación son absorbidos mediante la redefinición de la viscosidad (3.90). Esto lleva a que los términos de orden tres son los líderes en el error de truncación, por lo que es en efecto una aproximación a segundo orden de las ecuaciones de Navier-Stokes. El paso de integración da también una aproximación a segundo orden. Una forma de medir la precisión es fijando el cociente adimensional $\nu\delta_t/\Delta x^2$ y haciendo lo siguiente. Dado los parámetros de una simulación $\delta_t, \Delta x, u_o$, podemos escoger un factor de refinamiento a , entonces si se repite la simulación usando los parámetros $\Delta x' = \Delta x/a, \delta_t' = \delta_t/a^2$ se debería ver que los errores escalan como Δx^2 . Otra forma es fijar los parámetros $\delta_t = \Delta x = 1$, entonces dado el tamaño del sistema este escala como $d_{lbm} = an\Delta x$, el tiempo en que se ejecuta la simulación se escala al cuadrado ta^2 y la velocidad característica se escala también u_o/a tal que se mantiene el

mismo número de Reynolds. Si se conoce la solución analítica de cierta cantidad ϕ_{ani} , una buena forma de cuantificar el error es a través de la norma L_2

$$L_2(\phi) = \sqrt{\frac{\sum_n^N (\phi_n - \phi_{ani})^2}{N}}. \quad (3.151)$$

Dado que la solución se conoce de manera exacta, el orden de convergencia p se puede calcular

$$p = \frac{\log \frac{L_2^{k+1}}{L_2^k}}{\log a}, \quad (3.152)$$

donde L_2^k es la 2-norma del error relativo respecto a la cantidad ϕ calculada en una malla de referencia Δx^k y L_2^{k+1} es la 2-norma del error relativo respecto a la cantidad ϕ calculada en una malla de referencia $\Delta x^{k+1} = a\Delta x^k$. En la figura (3.8) se muestra el análisis para el flujo de Couette.

Cuando no existe solución analítica al problema como lo es de esperarse para las aplicaciones en general, basta con conocer el valor de la función deseada en tres mallas distintas relacionadas entre sí por $\Delta x^1 = \Delta x$, $\Delta x^2 = a\Delta x$ y $\Delta x^3 = a^2\Delta x$ y el factor de convergencia se calcula

$$p = \frac{\log \frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_1}}{\log a}, \quad (3.153)$$

donde ϕ_k es el valor de la función calculada en la malla Δx^k .

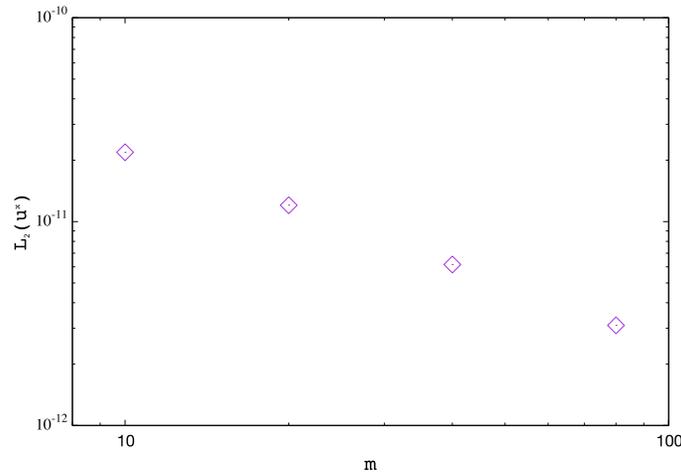


Figura 3.8: Se muestra la 2-norma del error en la componente equis de la velocidad en función del número de nodos de la malla. El número de Reynolds es $Re = 10$ usando D2Q9.

Capítulo 4

Extensión del Método de Malla de Boltzmann a Variedades Curvas

Para hacer de esta tesis lo más autocontenida posible, se revisan los conceptos mínimos de la geometría diferencial esenciales para poder entender este capítulo. Para más información se recomienda consultar los libros de texto clásicos de geometría diferencial [17, 18]. Cada que hablemos de variedades nos referimos a una variedad Riemanniana¹ (\mathcal{M}, g) donde \mathcal{M} es un conjunto tipo Hausdorff² de dimensión $= D$ dotado de una estructura diferencial. Dicha estructura es llamada atlas y es un conjunto de dupletas $\{(\phi_i, U_i)\}_{i \in I}$, donde $\phi_i : U_i \subset \mathcal{M} \rightarrow V_i \subset \mathbb{R}^D$ es un homeomorfismo³ diferenciable dotado de una métrica g . Aquí vale la pena enfatizar que cada carta define por sí mismo un conjunto de coordenadas locales $\phi_i(p) = (x_i^1, \dots, x_i^D)$, por lo que si nos fijamos en un punto en la intersección entre dos cartas entonces el cambio de coordenadas $\phi_i \circ \phi_j^{-1}$ es diferenciable.

Antes de hablar de la métrica, es necesario recordar que en este tipo de conjuntos se puede definir para todo punto $p \in \mathcal{M}$ un espacio vectorial llamado espacio tangente $T_p \mathcal{M}$ en donde viven los vectores de p , o precisamente es donde viven los vectores tangentes a todas las trayectorias que pasan por $p \in \mathcal{M}$. El dual de este espacio es llamado espacio cotangente $T_p^* \mathcal{M} := \{\omega | \omega : T_p \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}, \omega \text{ es lineal}\}$. En general a los elementos de $T_p \mathcal{M}$ se les llama vectores contravariantes o simplemente vectores y se escriben respecto una base $A = \sum A^i \frac{\partial}{\partial x^i}$. Análogamente a los covectores se les llama 1-formas y se escriben

¹La idea aquí es presentar de la forma más compacta y general las bases de la teoría y queda lejos de ser un texto completo. Para más detalles se recomienda consultar los libros de texto clásicos [17, 18].

²Un espacio de Hausdorff es básicamente un conjunto en donde es válida la noción de abiertos equivalente a \mathbb{R}^n . Es decir para cuales quiera dos puntos $p_1, p_2 \in \mathcal{M}$ existen dos abiertos $U_1, U_2 \subset \mathcal{M}$ tal que $U_1 \cap U_2$ es vacía.

³Es decir, es inyectiva y su inversa existe y es continua.

$\omega = \omega_i dx^i$. Definimos los tensores del tipo (r, s) r veces contravariante y s covariante como

$$T : (T_p^* \mathcal{M})^r \times (T_p \mathcal{M})^s \rightarrow \mathbb{R}$$

$$T(\omega_{\alpha_1} dx^{\alpha_1}, \dots, \omega_{\alpha_r} dx^{\alpha_r}, A^{\beta_1} \partial_{\beta_1}, \dots, A^{\beta_s} \partial_{\beta_s}) = \omega_{\alpha_1} \cdots \omega_{\alpha_r} A^{\beta_1} \cdots A^{\beta_s} T_{\beta_1 \cdots \beta_s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_r}, \quad (4.1)$$

donde $T_{\beta_1 \cdots \beta_s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_r} := T(dx^{\alpha_1}, \dots, dx^{\alpha_r}, \partial_{\beta_1}, \dots, \partial_{\beta_s})$.

Para aterrizar los conceptos y la notación un poco abstracta restrinjámonos al cálculo de la base del espacio tangente a superficies⁴. Sea (ϕ_i, U_i) una carta de $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^{D+k}$ entonces $\psi = \phi^{-1}$ es una parametrización y $\frac{\partial}{\partial x^i} \rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial x^i}$. Más aún, si $U_i = \{(x^1, \dots, x^D, G(\mathbf{x})) \mid \mathbf{x} \in V \subset \mathbb{R}^D, G : V \rightarrow \mathbb{R}^k\}$ está dado por el gráfico de una función, entonces definimos $\psi(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, G(\mathbf{x}))$ y

$$\left\{ \frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x^i} = \left(0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, \frac{\partial G_1}{\partial x^i}, \dots, \frac{\partial G_k}{\partial x^i} \right) \right\}_{i=1, \dots, D} \quad (4.2)$$

es la base canónica de $T_p \mathcal{M}$.

Todas estas definiciones son locales y dependen del punto $p \in \mathcal{M}$. Podemos definir un campo vectorial como una aplicación que asigna a cada $p \in \mathcal{M}$ un vector tangente $A(p) \in T_p \mathcal{M}$ de manera diferenciable. Definamos el haz tangente como la unión disjunta⁵ de todos los espacios tangentes $T \mathcal{M} = \bigsqcup_{p \in \mathcal{M}} T_p \mathcal{M}$. Entonces $A : \mathcal{M} \rightarrow T \mathcal{M}$ es un campo vectorial diferenciable. La extensión a campos tensoriales es directa $T : \mathcal{M} \rightarrow \Omega(\mathcal{M})_s^r$, donde $\Omega(\mathcal{M})_s^r = (T^* \mathcal{M})^r \times (T \mathcal{M})^s$.

Sea \mathcal{M} una variedad diferenciable. Una métrica es un producto interno $g_p : T_p \mathcal{M} \times T_p \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ para cada $p \in \mathcal{M}$. Es decir, $\forall X(p), Y(p), Z(p) \in T_p \mathcal{M}, \alpha, \beta \in \mathbb{R}$, tenemos

$$g_p(\alpha X + \beta Y, Z) = \alpha g_p(X, Z) + \beta g_p(Y, Z), \quad (4.3)$$

$$g_p(Z, \alpha X + \beta Y) = \alpha g_p(Z, X) + \beta g_p(Z, Y).$$

$$g_p(X, Y) = g_p(Y, X). \quad (4.4)$$

$$g_p(X, X) \geq 0, \quad (4.5)$$

$$g_p(X, X) = 0 \iff X = 0.$$

Con esto podemos definir la norma de los vectores $X(p) \in T_p \mathcal{M}$

$$|X(p)| := \sqrt{g_p(X, X)}. \quad (4.6)$$

El concepto de derivada direccional que se da en \mathbb{R}^n se extiende a variedades Riemannianas a través de la derivada covariante ∇_X . Para ser precisos, en una variedad Riemanniana (\mathcal{M}, g) , existe una única derivada covariante ∇ compatible con g , libre de torsión,

⁴El teorema de Nash-Whitney nos garantiza que toda variedad diferenciable \mathcal{M} se puede encajar como una superficie en \mathbb{R}^n con $n \geq \dim(\mathcal{M})$. En general no es trivial saber para qué n la variedad \mathcal{M} se puede incrustar, por ejemplo, el plano hiperbólico necesita al menos $n = 6$.

⁵Unión disjunta porque sus elementos tienen intersección vacía $T_{p_1} \mathcal{M} \cap T_{p_2} \mathcal{M} = \emptyset, \forall p_1, p_2 \in \mathcal{M}$.

conocida como derivada de Levi-Cevita y está dado por

$$\begin{aligned}\nabla_X Y &= \nabla_{X^i \frac{\partial}{\partial x^i}} Y^j \frac{\partial}{\partial x^j} = X^i \frac{\partial Y^j}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x^j} + X^i Y^j \nabla_{\frac{\partial}{\partial x^i}} \frac{\partial}{\partial x^j} = X^i \frac{\partial Y^j}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x^j} + X^i Y^j \Gamma_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x^k} \\ &= X^i \left(\frac{\partial Y^k}{\partial x^i} + Y^j \Gamma_{ij}^k \right) \frac{\partial}{\partial x^k},\end{aligned}\quad (4.7)$$

donde Γ_{ij}^k son los símbolos de Christoffel dados por

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{kl} \left(\frac{\partial g_{lj}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{il}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^l} \right). \quad (4.8)$$

La métrica es importante porque nos da información sobre la geometría intrínseca y nos permite relacionar diferentes variedades que pudieran parecer no ser lo mismo a primera vista. Sean \mathcal{M} , \mathcal{N} variedades diferenciables y (\mathcal{N}, g) una variedad Riemanniana. Sea $\psi : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{N}$ una función diferenciable. Entonces podemos definir una métrica inducida en \mathcal{M} como

$$(\psi^* g)_p(X(p), Y(p)) = g_p(d\psi(X(p)), d\psi(Y(p))), \quad \forall X(p), Y(p) \in T_p \mathcal{M}. \quad (4.9)$$

Decimos que dos variedades Riemannianas (\mathcal{M}, h) y (\mathcal{N}, g) son isomorfas si $\psi^* g = h$.

4.1. Evolución de la Función de Distribución en Variedades

Nuestra meta aquí es tener una descripción macroscópica de los fluidos en variedades arbitraias, por lo que es necesario tener una formulación de la ecuación de Boltzmann en coordenadas curvilíneas. Primero ocupamos una nueva función de distribución f' tal que podamos escribir la ecuación de Boltzmann de forma invariante. Ya que el número de partículas del sistema en un elemento de volumen se tiene que conservar, y como en una variedad arbitraria el elemento de volumen varía de punto a punto, también debe hacerlo f , incluso para una función de distribución constante. Para lograr esto, debemos multiplicar la función de distribución f por la raíz del determinante de la métrica \sqrt{g} , es decir, por el Jacobiano ($J := \sqrt{g}$) y sustituirla en la Ec.(2.49) la cual queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial(Jf)}{\partial t} + \frac{dx^i}{dt} \frac{\partial(Jf)}{\partial x^i} + \frac{F^i}{m} \frac{\partial(Jf)}{\partial \xi^i} = C(Jf). \quad (4.10)$$

Dada una variedad Riemanniana (\mathcal{M}, g) de dimensión D con la métrica dada en coordenadas locales $g := ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j$. La longitud l de una curva parametrizada $s(t)$ está dada por:

$$l(s) = \int \sqrt{g_{ij}\dot{x}^i\dot{x}^j} dt. \quad (4.11)$$

Podemos calcular la ecuación geodésica (la ecuación de la curva con la distancia mínima) a partir de el principio de mínima acción. En general, la acción se escribe $S = \int L(x, \dot{x}, t) dt$, donde L es el Lagrangiano. Calculando la variación de las trayectorias con los puntos inicial y final fijos se obtienen las ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^k} \right) = \frac{\partial L}{\partial x^k}, \quad k = 1, 2, \dots, D. \quad (4.12)$$

En nuestro caso usamos $L = \sqrt{g_{ij}\dot{x}^i\dot{x}^j}$, de esta manera la ecuación anterior toma la forma:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{g_{ki}\dot{x}^i}{\sqrt{g_{ij}\dot{x}^i\dot{x}^j}} \right) = \frac{1}{2\sqrt{g_{ij}\dot{x}^i\dot{x}^j}} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \dot{x}^i\dot{x}^j. \quad (4.13)$$

Dado que el funcional de la longitud Ec.(4.11) es invariante bajo la transformación $t = \psi(\tau)$, para cualquier función suave $\psi(\tau)$, también lo es la ecuación anterior. Esto nos permite escoger a s como parámetro τ obteniendo $s = \sqrt{g_{ij}dx^i dx^j}$. Dividiendo entre ds , uno obtiene $\sqrt{g_{ij}dx^i dx^j} = 1$ y la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{d}{dt} (g_{ki}\dot{x}^i) = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \dot{x}^i\dot{x}^j. \quad (4.14)$$

Esta ecuación coincide con la ecuación de Euler-Lagrange para la acción definida por una partícula libre con Lagrangiano $L = \frac{1}{2}g_{ij}\dot{x}^i\dot{x}^j$ y cuya aceleración es

$$\ddot{x}^k = -\Gamma_{ij}^k \dot{x}^i\dot{x}^j, \quad (4.15)$$

donde

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2}g^{kl} \left(\frac{\partial g_{lj}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{il}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^l} \right). \quad (4.16)$$

La Ec.(4.15) es conocida como la ecuación geodésica y donde hemos introducido los símbolos de Christoffel Γ_{ij}^k así como g^{ij} que es el inverso de g_{ij} .

Ahora ya tenemos todos los ingredientes para escribir la ecuación de Boltzmann en variedades. Partiendo de la Ec.(4.10), utilizando el hecho que las partículas se mueven por geodésicas Ec.(4.15) y que

$$F^i = \frac{dp^i}{dt} = m \frac{d\xi^i}{dt}, \quad (4.17)$$

finalmente podemos escribir la ecuación de Boltzmann en variedades:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi^i \frac{\partial f}{\partial x^i} - \Gamma_{jk}^i \xi^j \xi^k \frac{\partial f}{\partial \xi^i} = C(f). \quad (4.18)$$

En ésta última hemos renombrado a la función de distribución simplemente como f . También hay que notar que el tercer término de la izquierda contiene toda la información debida a las fuerzas no inerciales que aparecen por estar en geometrías generales; y que los símbolos de Christoffel y el tensor métrico son arbitrarios, por lo que podemos modelar fluidos en espacios curvos donde el tensor métrico es muy complicado o incluso sólo se saben sus valores numéricos.

4.2. Discretización de La Ecuación de Boltzmann en Variedades

La función de distribución en equilibrio en coordenadas curvilíneas generales toma la siguiente forma [19]

$$f^{eq} = \frac{\sqrt{g}\rho}{(2\pi\theta)^{D/2}} \exp\left(\frac{-g_{ij}(\xi^i - u^i)(\xi^j - u^j)}{2\theta}\right), \quad (4.19)$$

la cual expandiremos sobre los polinomios tensoriales de Hermite, análogamente a lo hecho en la sección 3.2.2

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \sqrt{g}w(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_n(\mathbf{x}, t) H_n(\boldsymbol{\xi}), \quad (4.20)$$

donde el peso $w(\boldsymbol{\xi})$, es

$$w(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{\xi}|^2}{2}\right). \quad (4.21)$$

De esta forma, escribimos la función de equilibrio como

$$f^{eq} = \frac{\rho \sqrt{g}}{(2\pi\theta)^{D/2}} \exp\left(\frac{-(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2\theta}\right) = \frac{\rho \sqrt{g}}{\theta^{D/2}} w\left(\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})}{\sqrt{\theta}}\right). \quad (4.22)$$

y de nuevo, los coeficientes se calculan proyectando f^{eq} con H_n

$$a_n(\mathbf{x}, t) = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) H_n(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}. \quad (4.23)$$

Definiendo una nueva variable $\eta^i := \xi^i - u^i / \sqrt{\theta}$ implica $d\xi^i = \sqrt{\theta} d\eta^i$ por lo que la integral anterior toma la forma

$$a_n = \rho \sqrt{g} \int w(\eta) H_n(\sqrt{\theta}\eta + \mathbf{u}) d^D \eta. \quad (4.24)$$

En este momento es útil recordar integrales gaussianas en D dimensiones⁶,

$$Z_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}\right) dx^1 dx^2 \dots dx^D = \frac{(2\pi)^{D/2}}{|\mathbf{A}|^{1/2}}, \quad (4.25)$$

donde \mathbf{A} es una matriz cuadrada $D \times D$ simétrica y definida positiva. Para funciones gaussianas con fuentes

$$Z_J = \int \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + J^T \mathbf{x}\right) dx^1 dx^2 \dots dx^D, \quad (4.26)$$

podemos completar el cuadrado para eliminar los términos cruzados. Sea $\mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{A}^{-1} J$, encontramos

$$Z_J = \int \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} + \frac{1}{2}J^T \mathbf{A}^{-1} J\right) = \frac{2\pi^{D/2}}{|\mathbf{A}|^{1/2}} \exp\left(\frac{1}{2}J^T \mathbf{A}^{-1} J\right). \quad (4.27)$$

Como necesitaremos calcular los momentos, definamos

$$\langle x^{k_1} \dots x^{k_{2D}} \rangle = \int x^{k_1} \dots x^{k_{2D}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}\right) dx^1 dx^2 \dots dx^D. \quad (4.28)$$

Hay que notar que $\langle x^{k_1} \dots x^{k_{2n+1}} \rangle = 0$ dado que la integral es impar. Esta integral puede calcularse tomando las derivadas respecto a Z_J

$$\langle x^{k_1} \dots x^{k_{2D}} \rangle = \frac{\partial}{\partial J_{k_1}} \dots \frac{\partial}{\partial J_{k_{2D}}} Z_J \Big|_{J=0}. \quad (4.29)$$

Debido a que necesitamos explícitamente el valor de los primeros 4 momentos, las únicas fórmulas que necesitamos son para $\langle x^i x^j \rangle$

$$\langle x^i x^j \rangle = \frac{\partial}{\partial J_i} \frac{\partial}{\partial J_j} \exp\left(\frac{1}{2}J^T \mathbf{A}^{-1} J\right) \Big|_{J=0} \quad (4.30)$$

$$= \frac{\partial}{\partial J_i} \frac{\partial}{\partial J_j} \frac{1}{2} J^T \mathbf{A}^{-1} J \quad (4.31)$$

$$= Z_0 \frac{1}{2} (A_{ij}^{-1} + A_{ji}^{-1}) \quad (4.32)$$

$$= Z_0 A_{ij}^{-1}. \quad (4.33)$$

En nuestro caso $\mathbf{A} = \mathbf{g}$ por lo que $A_{ij}^{-1} = g^{ij}$. Tomando en cuenta todo esto, la normali-

⁶Aquí hemos usado el famoso Teorema de Wick, el cual es bastante conocido en el contexto de Teorías Cuánticas de Campos (QFT) por lo que para una mayor discusión ver referencias [20, 21].

zación del peso es

$$\int w(\xi) d\xi = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int \exp\left(-\frac{g_{ij}\xi^i\xi^j}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{g}}, \quad (4.34)$$

y los momentos de interés son

$$\langle \xi^i \xi^j \rangle = \frac{(2\pi)^{D/2}}{\sqrt{g}} g^{ij}. \quad (4.35)$$

Con esto ya es fácil calcular los coeficientes de la expansión. Empezemos con el primero

$$\begin{aligned} a_0 &= \rho \sqrt{g} \int w(\eta) H_0(\sqrt{\theta}\eta + \mathbf{u}) d^D \eta = \frac{\rho \sqrt{g}}{(2\pi)^{D/2}} \int \exp\left(-\frac{\eta^i g_{ij} \eta^j}{2}\right) d^D \eta. \\ &= \rho. \end{aligned} \quad (4.36)$$

El segundo coeficiente

$$\begin{aligned} a_1^i &= \rho \sqrt{g} \int w(\eta) H_1(\sqrt{\theta}\eta + \mathbf{u}) d^D \eta = \frac{\rho \sqrt{g}}{(2\pi)^{D/2}} \int \exp\left(-\frac{\eta^i g_{ij} \eta^j}{2}\right) (\sqrt{\theta}\eta^i + u^i) d^D \eta. \\ &= \rho u^i. \end{aligned} \quad (4.37)$$

No es hasta el tercer coeficiente que encontramos términos que involucran al tensor métrico, veamos

$$\begin{aligned} a_2^{ij} &= \rho \sqrt{g} \int w(\eta) H_2(\sqrt{\theta}\eta + \mathbf{u}) d^D \eta \\ &= \frac{\rho \sqrt{g}}{(2\pi)^{D/2}} \int \exp\left(-\frac{\eta^i g_{ij} \eta^j}{2}\right) (\theta \eta^i \eta^j + 2\sqrt{\theta} \eta^i u^j + u^i u^j - \delta^{ij}) d^D \eta. \\ &= \rho (\theta g^{ij} + 0 + u^i u^j - \delta^{ij}) \\ &= \rho u^i u^j + \rho \Delta^{ij}, \end{aligned} \quad (4.38)$$

donde hemos hecho ya la sustitución $\theta = 1$ y definido $\Delta^{ij} := g^{ij} - \delta^{ij}$. Para el cuarto coeficiente se obtiene

$$a_3^{ijk} = \rho u^i u^j u^k + \rho (\Delta^{ij} u^k + \Delta^{jk} u^i + \Delta^{ki} u^j). \quad (4.39)$$

Es claro que si nuestra variedad es \mathbb{R}^D (y el tensor métrico dado en coordenadas cartesianas $g^{ij} = \delta^{ij} \Rightarrow \Delta^{ij} = 0$), entonces los coeficientes resultan ser los mismos que los encontrados en el capítulo anterior.

Con esto podemos calcular la función de distribución a segundo y tercer orden en los

polinomios de Hermite. Empecemos con el de segundo orden

$$\begin{aligned} f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= \sqrt{g}w(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^2 \frac{1}{n!} a_n(\mathbf{x}, t) H_n(\boldsymbol{\xi}) \\ &= \rho \sqrt{g}w(\boldsymbol{\xi}) \left[1 + u^i \xi^i + \frac{u^i u^j \xi^i \xi^j}{2} - \frac{u^i u^i}{2} + \frac{\Delta^{ij}(\xi^i \xi^j - \delta^{ij})}{2} \right]. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Aplicando la cuadratura de Gauss-Hermite en (4.41) y haciendo la normalización respecto a la velocidad de la malla

$$f_\lambda^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho \sqrt{g}w_\lambda \left[1 + \frac{u^i c_\lambda^i}{c_m^2} + \frac{u^i u^j c_\lambda^i c_\lambda^j}{2c_m^4} - \frac{u^i u^i}{2c_m^2} + \frac{\Delta^{ij} c_\lambda^i c_\lambda^j}{2c_m^2} - \frac{\Delta^{ij} \delta^{ij}}{2} \right]. \quad (4.41)$$

Para el caso de la función en equilibrio a tercer orden obtenemos

$$\begin{aligned} f_\lambda^{eq}(\mathbf{x}, t) &= \rho \sqrt{g}w_\lambda \left[1 + \frac{u^i c_\lambda^i}{c_m^2} + \frac{u^i u^j c_\lambda^i c_\lambda^j}{2c_m^4} - \frac{u^i u^i}{2c_m^2} + \frac{\Delta^{ij}(c_\lambda^i c_\lambda^j - c_m^2 \delta^{ij})}{2c_m^2} + \frac{c_\lambda^i c_\lambda^j c_\lambda^k u^i u^j u^k}{6c_m^6} \right. \\ &\quad \left. - \frac{c_\lambda^i u^i u^j u^j}{2c_m^4} + \frac{\Delta^{ij} c_\lambda^i c_\lambda^j c_\lambda^k u^k}{2c_m^4} - \frac{1}{2c_m^2} (\Delta^{ij} \delta^{ij} c_\lambda^k u^k + \Delta^{ij} \delta^{jk} c_\lambda^i u^k + \Delta^{ij} \delta^{ki} c_\lambda^j u^k) \right]. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Esta discretización o mejor dicho proyección de la función de distribución nos genera -como discutido anteriorme- un conjunto de N ecuaciones de Boltzmann, una por cada velocidad elegida $\boldsymbol{\xi}_\lambda$

$$\frac{\partial f_\lambda}{\partial t} + \xi^i \frac{\partial f_\lambda}{\partial x^i} + \frac{F^i}{m} \frac{\partial f_\lambda}{\partial \xi^i} = C(f). \quad (4.43)$$

Antes de pasar a la discretización temporal hay que tratar el término de la fuerza el cual está acoplado con el gradiente respecto a la velocidad de f ,

$$\mathfrak{F}_\lambda := -\frac{F^i}{m} \frac{\partial f}{\partial \xi^i} \quad (4.44)$$

de la definición de los polinomios de Hermite (A.1) tenemos la siguiente relación

$$w(\boldsymbol{\xi}) H_n^{i_1 \dots i_n} = (-1)^n \frac{\partial}{\partial \xi^{i_1}} \dots \frac{\partial}{\partial \xi^{i_n}} w(\boldsymbol{\xi}) \quad (4.45)$$

tal que podemos escribir (4.44)

$$\begin{aligned}
\frac{F^i}{m} \frac{\partial f}{\partial \xi^i} &= \frac{F^i}{m} \frac{\partial}{\partial \xi^i} \left(\sqrt{g} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{a_n}{n!} \frac{\partial}{\partial \xi^{i_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \xi^{i_n}} w(\xi) \right) \\
&= \frac{F^i}{m} \sqrt{g} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{a_n}{n!} \frac{\partial}{\partial \xi^{i_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \xi^{i_n}} \frac{\partial}{\partial \xi^{i_{n+1}}} w(\xi) \\
&= \frac{-F^i}{m} \sqrt{g} w(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_n H_{n+1}.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Los coeficientes a_n ya los conocemos hasta $n = 3$, así que podemos truncar la expansión a primer, segundo o tercer orden en los polinomios de Hermite. A segundo orden tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{F^i}{m} \frac{\partial f}{\partial \xi^i} &= \frac{-F^i}{m} \sqrt{g} w(\xi) \sum_{n=0}^1 \frac{(-1)^{n+1}}{n!} a_n H_{n+1} \\
&= -\sqrt{g} w(\xi) \rho \frac{F^i}{m} \left(\xi^i + u^j (\xi^i \xi^j - \delta^{ij}) \right).
\end{aligned} \tag{4.47}$$

En nuestro caso $\frac{F^i}{m} = -\Gamma_{jk}^i \xi^j \xi^k$, por lo que redefinimos $F^i = -\Gamma_{jk}^i \xi^j \xi^k$. Aplicando la cuadratura de Gauss-Hermite en la ecuación anterior y normalizando respecto a la velocidad de la malla se obtiene

$$\mathfrak{F}_\lambda := -F_\lambda^i \frac{\partial f}{\partial \xi^i} = \rho \sqrt{g} w_\lambda \left(\frac{c_\lambda^i F_\lambda^i}{c_m^2} + \frac{u^j c_\lambda^j c_\lambda^i F_\lambda^i}{c_m^4} - \frac{u^i F_\lambda^i}{c_m^2} \right). \tag{4.48}$$

En la presencia de fuerzas externas la extensión es directa $F_\lambda^i \rightarrow F_\lambda^i + {}_{ext} F_\lambda^i$. Tomando en cuenta todo esto, la ecuación de Boltzmann discretizada en el espacio de velocidades es

$$\frac{\partial f_\lambda}{\partial t} + \xi_\lambda^i \frac{\partial f_\lambda}{\partial x^i} = C(f_\lambda) + \mathfrak{F}_\lambda, \tag{4.49}$$

donde $C(f_\lambda) = -(f_\lambda - f_\lambda^{eq})/\tau$.

4.2.1. Discretización Temporal

La discretización temporal de la ecuación de Boltzmann en ausencia de fuerzas externas (Ec. (3.1)) realizada en la sección 3.1.1 fue una integración formal en un paso δ_t . Dado que conocemos la forma explícita de f^{eq} y por su forma, el cálculo de f al tiempo siguiente resultó ser la misma que si se hubiera hecho una simple aproximación a primer orden en un sólo punto

$$f(x^i + \delta_t \xi^i, t + \delta_t) - f(x^i, t) = C(f) \delta_t + \mathfrak{F}_\lambda \delta_t. \tag{4.50}$$

Si bien en ausencia de fuerzas éste esquema es suficiente para alcanzar una convergencia a segundo orden, ya no lo es al considerar fuerzas externas o provocadas por la curvatura de la geometría. Ya que la convergencia espacial es a segundo orden vamos a elegir un integrador de la familia de los métodos Runge-Kutta implícito de segundo orden conocido como la regla del trapecio⁷

$$\begin{aligned} f_\lambda(x^i + \delta_t \xi^i, t + \delta_t) - f_\lambda(x^i, t) &= \int_t^{t+\delta_t} (C(f_\lambda) + \mathfrak{F}_\lambda) dt \\ &\approx \left(\frac{C(f_\lambda(x^i, t)) + C(f_\lambda(x^i + \xi^i \delta_t, t + \delta_t))}{2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mathfrak{F}_\lambda(x^i, t) + \mathfrak{F}_\lambda(x^i + \xi^i \delta_t, t + \delta_t)}{2} \right) \delta_t. \end{aligned} \quad (4.51)$$

El problema con los métodos implícitos es que el valor nuevo a calcular sale en ambas partes de la ecuación por lo que en general se debe de resolver una ecuación algebraica. La ventaja aquí es que podemos definir una nueva variable propuesta en [22, 23]

$$\bar{f}_\lambda = f_\lambda - \delta_t \frac{C(f_\lambda) + \mathfrak{F}_\lambda}{2}, \quad (4.52)$$

la cual al sustituir en (4.51) se obtiene

$$\bar{f}_\lambda(x^i + \delta_t \xi^i, t + \delta_t) - \bar{f}_\lambda(x^i, t) = (C(f_\lambda) + \mathfrak{F}_\lambda) \delta_t. \quad (4.53)$$

Si sustituimos explícitamente la forma del término de colisión BGK en $C(f)$ y con un poco de álgebra llegamos a

$$\bar{f}_\lambda(x^i + \delta_t \xi^i, t + \delta_t) - \bar{f}_\lambda(x^i, t) = -\frac{\delta_t}{\bar{\tau}} (\bar{f}_\lambda - f_\lambda^{eq}) + \left(1 - \frac{\delta_t}{2\bar{\tau}}\right) \mathfrak{F}_\lambda \delta_t, \quad (4.54)$$

donde $\bar{\tau} = \tau + \delta_t/2$.

Con esta definición los momentos hidrodinámicos se calculan de la siguiente manera

$$\rho = \sum_\lambda \bar{f}_\lambda + \frac{\delta_t}{2} \mathfrak{F}_\lambda, \quad (4.55)$$

$$\rho u^i = \sum_\lambda \bar{f}_\lambda c_\lambda^i + \frac{\delta_t}{2} \mathfrak{F}_\lambda c_\lambda^i. \quad (4.56)$$

La ecuación (4.54) coincide con la forma propuesta en [24] por lo que este esquema es

⁷La regla del trapecio establece que si $dy(x)/dx = f(y, x)$, con $y(x_0) = y_0$ entonces $y(x_0 + \Delta x) \approx y_0 + \Delta x(f(y_0, x_0) + f(y(x_0 + \Delta x), x_0 + \Delta x))/2$.

nombrado a veces dentro de la literatura como el esquema de fuerza de Guo⁸. Es común encontrar éste esquema sin las barras y con un término fuente $S_\lambda = (1 - \delta_t/2\tau)\mathfrak{F}_\lambda$ tal que se obtiene la forma estandar de LBM

$$f_\lambda(x^i + \delta_t \xi^i, t + \delta_t) - f_\lambda(x, t) = - \left(\frac{f_\lambda(x, t) - f_\lambda^{eq}(x, t)}{\tau} \right) \delta_t + S_\lambda \delta_t. \quad (4.57)$$

4.3. Implementación en la Esfera

En este caso nuestra variedad es (\mathbb{S}^2, g) . Podemos cubrir casi toda la esfera (sin los polos) con una sola carta (Φ, U) tal que

$$\begin{aligned} \Phi : U \subset \mathbb{S}^2 &\rightarrow [\epsilon, \pi - \epsilon] \times [0, 2\pi), \\ \Phi(p) &= (\theta, \phi). \end{aligned}$$

La parametrización natural es $\psi = \Phi^{-1}(\theta, \phi) = (r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)$. La métrica inducida (4.9) en este caso es

$$g_{\theta\theta} = g \left(\frac{\partial \Phi^{-1}}{\partial \theta}, \frac{\partial \Phi^{-1}}{\partial \theta} \right) = r^2, \quad (4.58)$$

$$g_{\phi\phi} = g \left(\frac{\partial \Phi^{-1}}{\partial \phi}, \frac{\partial \Phi^{-1}}{\partial \phi} \right) = r^2 \sin^2 \theta. \quad (4.59)$$

Por tanto los símbolos de Christoffel no cero son

$$\Gamma_{\phi\phi}^\theta = -\sin \theta \cos \theta, \quad (4.60)$$

$$\Gamma_{\phi\theta}^\phi = \Gamma_{\theta\phi}^\phi = \frac{\cos \theta}{\sin \theta}. \quad (4.61)$$

La función de distribución a segundo orden (4.41) para una variedad de dimensión $D = 2$ es

$$f_\lambda^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho \sqrt{g} w_\lambda \left[2 + \frac{u^i c_\lambda^i}{c_m^2} + \frac{u^i u^j c_\lambda^i c_\lambda^j}{2c_m^4} - \frac{u^i u^i}{2c_m^2} - \frac{c_\lambda^i c_\lambda^i}{2c_m^2} - \frac{g^{ii}}{2} + \frac{g^{ij} c_\lambda^i c_\lambda^j}{2c_m^2} \right]. \quad (4.62)$$

La discretización entonces la hacemos sobre la variedad $(\Phi(U), (\Phi^{-1})^* g)$ la cual es isomorfa a (U, g) . En este caso nuestras coordenadas están dadas por $\mathbf{x} := \Phi(p) = (r, \theta)$ por lo que las componentes de la velocidad respecto a esta base son $\mathbf{u} = (u^r, u^\theta)$ y $c_\lambda = (c_\lambda^r, c_\lambda^\theta)$. El

⁸Guo et al. [24] muestran cómo manejar los efectos debido a la discretización al momento de tratar fuerzas. Ellos proponen una forma para la fuerza con parámetros a encontrar a través de la expansión de Chapman-Enskog la cual coincide con la calculada aquí (4.48) para el caso de \mathbb{R}^D .

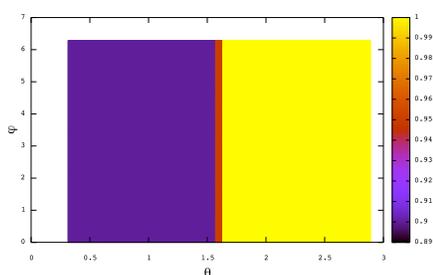
término de la fuerza es (4.48)

$$\mathfrak{F}_\lambda := -F_\lambda^i \frac{\partial f}{\partial \xi^i} = \rho \sqrt{g} w_\lambda \left(\frac{c_\lambda^i F_\lambda^i}{c_m^2} + \frac{u^j c_\lambda^j c_\lambda^i F_\lambda^i}{c_m^4} - \frac{u^i F_\lambda^i}{c_m^2} \right), \quad (4.63)$$

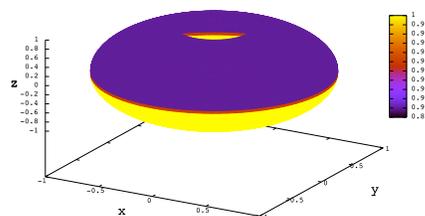
donde las componentes de la fuerza $F_\lambda^i = -\Gamma_{jk}^i c_\lambda^j c_\lambda^k$ son

$$F_\lambda^\theta = -\Gamma_{\phi\phi}^\theta c_\lambda^\phi c_\lambda^\phi, \quad (4.64)$$

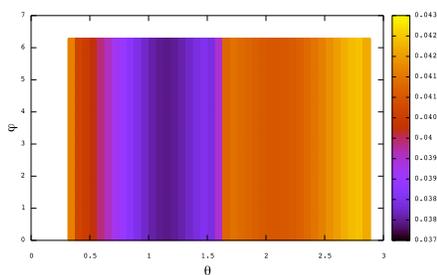
$$F_\lambda^\phi = -2\Gamma_{\theta\phi}^\phi c_\lambda^\theta c_\lambda^\phi. \quad (4.65)$$



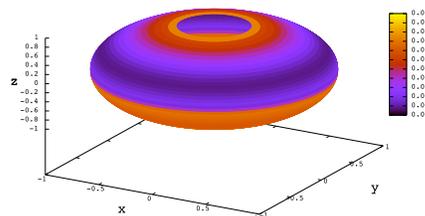
(a) t=0



(b) t=0



(c) t=21



(d) t=21

Figura 4.1: Se muestran los valores de la densidad para 2 tiempos distintos. En (a) y (c) se muestran los valores de la densidad sobre la carta en la cual se hace la simulación. En (b) y (d) se muestran nuevamente los valores de la densidad en la esfera.

Capítulo 5

Conclusiones

Se presentó una formulación general para calcular la ecuación discretizada de Boltzmann en \mathbb{R}^n y se implementaron tres de los sistemas más usados para comparar la eficiencia mostrando resultados consistentes con estudios anteriores [14, 15]. En cada uno se mostró de forma explícita cómo calcular las condiciones de frontera para los modelos D2Q7 y D2Q9. La formulación presentada es equivalente con la clásica derivación expuesta en [13] donde se ha recalcado la importancia de diferenciar entre la velocidad del sonido $\theta = c_s^2$ con la velocidad de la malla c_m^2 puesto que ambas formulaciones son equivalentes si y sólo si $\theta = 1$. Después se extendió la formulación a variedades Riemannianas donde las fuerzas producidas por estar en sistemas de referencia arbitrarios son incorporados en el término de la fuerza externa usual en LBM. Se mostró explícitamente el cálculo para la función de distribución en equilibrio a segundo y tercer orden el cual coincide con los recientes trabajos en [27, 28]. Finalmente se implementó dicha formulación para el caso de un fluido contenido en la superficie de una esfera donde se utilizó la función de distribución en equilibrio y el término de la fuerza truncadas hasta segundo orden. En nuestras simulaciones sobre la esfera se puede observar errores numéricos debidos a que el truncamiento tanto de la función de distribución en equilibrio como del término de la fuerza que se usó fue hasta segundo orden en los polinomios de Hermite. También que las condición de frontera de rebote usada pierde bastante precisión al momento de incorporar fuerzas en la ecuación de Boltzmann. Dichos errores se pueden evitar usando la distribución en equilibrio a tercer orden así como el término de la fuerza también a tercer orden como lo han hecho en [29].

Apéndice A

Polinomios de Hermite y cuadratura Gauss-Hermite

En éste apéndice se expone de manera simplificada las propiedades de los polinomios tensoriales de Hermite expuestos por Grad [25] y se hace su extensión a variedades.

Los polinomios tensoriales de Hermite en \mathbb{R}^D se pueden definir a través de la fórmula de Rodrigues

$$H_n^{i_1 \dots i_n}(\boldsymbol{\xi}) := \frac{(-1)^n}{w(\boldsymbol{\xi})} \frac{\partial}{\partial \xi^{i_1}} \dots \frac{\partial}{\partial \xi^{i_n}} w(\boldsymbol{\xi}), \quad (\text{A.1})$$

donde

$$w(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \exp\left[-\frac{|\bar{\boldsymbol{\xi}}|^2}{2}\right]. \quad (\text{A.2})$$

Los polinomios de Hermite forman una base en el espacio de Hilbert, con la norma definida como

$$(f, g)_w = \int f g w d\boldsymbol{\xi}. \quad (\text{A.3})$$

Sean $\hat{\alpha} := \alpha_1 \dots \alpha_n$ y $\hat{\beta} := \beta_1 \dots \beta_m$, entonces

$$\int w H_n^{\hat{\alpha}} H_m^{\hat{\beta}} d\boldsymbol{\xi} = \delta_{nm} \hat{\delta}_n^{\hat{\alpha}\hat{\beta}}, \quad (\text{A.4})$$

donde $\hat{\delta}_n^{\hat{\alpha}\hat{\beta}}$ es igual a uno si $\alpha_1 \dots \alpha_n$ es una permutación de $\beta_1 \dots \beta_m$, en cualquier otro caso $\hat{\delta}_n^{\hat{\alpha}\hat{\beta}} = 0$. Esta condición de normalización hace que

$$\int w(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = 1. \quad (\text{A.5})$$

Se pueden aproximar funciones en esta base a través de

$$f(\xi) = w(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_n H_n(\xi), \quad (\text{A.6})$$

donde los coeficientes se obtienen a través de la proyección

$$a_n = \left(\frac{f}{w}, H_n \right)_w = \int f H_n d\xi. \quad (\text{A.7})$$

La extensión a variedades de D dimensiones es casi directa dado que la expansión es hecha en el espacio de velocidades y el tensor métrico sólo depende de las coordenadas espaciales. La norma entonces entre vectores es $g(\xi, \xi) = g_{ij} \xi^i \xi^j$, esto nos hace redefinir el peso como¹

$$w(\xi) = \frac{\sqrt{g}}{(2\pi)^{D/2}} \exp\left(-\frac{g_{ij} \xi^i \xi^j}{2}\right), \quad (\text{A.8})$$

el cual nos garantiza que²

$$\int w d\xi = \frac{\sqrt{g}}{(2\pi)^{D/2}} \int \exp\left(-\frac{g_{ij} \xi^i \xi^j}{2}\right) d\xi = \frac{\sqrt{g}}{(2\pi)^{D/2}} \left[\frac{(2\pi)^{D/2}}{\sqrt{g}} \right] = 1. \quad (\text{A.9})$$

En la cuadratura de Hermite-Gauss, las integrales de una función f respecto al peso $w(\xi)$ son reemplazadas por una serie de valores de $f(\xi_\lambda)$ en un conjunto escogido de puntos ξ_λ , $i \in \{1, \dots, q\}$ multiplicados por los pesos w_λ . En $D = 1$

$$\int w(\xi) f(\xi) \approx \sum_{\lambda=0}^{q-1} w_\lambda f(\xi_\lambda). \quad (\text{A.10})$$

En [26] muestran que el mejor conjunto de puntos para realizar la cuadratura, donde es óptima, es cuando ξ_λ son las raíces de H_q y los pesos dados por

$$w_\lambda = \frac{(q!)}{[qH_{q-1}(\xi_\lambda)]^2}. \quad (\text{A.11})$$

La extensión a D dimensiones es directa. Por lo general se construye una malla en una dimensión y se van haciendo productos tensoriales para generar mallas en dimensiones más grandes. Para detalles respecto a esta y otras cuadraturas consultar [4].

¹Este peso es distinto al usado en la ecuación (4.21) el cual no lleva el término \sqrt{g} y se va cargando durante toda las cuentas.

²En la sección 4.2 se muestra cómo sacar los momentos de integrales gaussianas en D dimensiones de forma recursiva donde el momento cero que es la integral (A.9) se resuelve usando el teorema de Wick [20, 21].

Bibliografía

- [1] U. Frisch, B. Hasslache, and Y. Pomeau, Phys. Rev.Lett., **56**,1505 (1986).
- [2] D. Hu, P. Zhang and E. Weinan, Physical Review E **75**, 041605 (2007).
- [3] G. David, J. M. Ebin, Annals of Mathematics **92**, 102?163 (1970).
- [4] X. Shan, X-F. Yuan, H. Chen, J Fluid Mech **550**,413-441 (2006).
- [5] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, Physical Kinetics, Landau and Lifshitz Course of Theoretical Physics Volume **10**. Preuss. Akad. Wiss. Berlin, Sitzungsber.
- [6] Kerson Huang, Statistical Mechanics. 2nd edn John Wiley & Sons, 1987.
- [7] Xiaoyi He and Li-Shi Luo Phys. Rev. E **56** 6811 (1997)
- [8] L.T. Buchman, H. P. Pfeiffer, M.A. Scheel, B. Szilgyi Phys. Rev. D **86**, 084033 (2012)
- [9] P. J. Davis and P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration, 2nd ed. (Academic, New York, 1984).
- [10] S. Bonazzola, E. Gourgoulhon and J. Marck, J. Comput. Appl. Math. **109**, 892 (1999).
- [11] X.Y. He, and L.S. Luo, Journal of Statistical Physics, **88**, 927-944 (1997).
- [12] A.J.C. Ladd, R. Verberg, Journal of Statistical Physics **104**, 1191-1252 (2001).
- [13] Q. Zou, X. He, Phys. Fluids **9**, 1591 (1997).
- [14] U. Ghia, K. N. Ghia, and C. T. Shin, Journal of Computational Physics, **48**, 387-411 (1982).
- [15] O. Botella and R. Peyret, Computers & Fluids Vol. 27, No. 4, 421-433 (1998).
- [16] T. KruRger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E. M. Vigen, The Lattice Boltzmann Method, principles and practice. Springer (2017).
- [17] M. Spivak A Comprehensive Introduction to Differential Geometry, Vols 1-5 (1979).

-
- [18] R. Hermann, *Differential Geometry and Calculus of Variations* (1973).
- [19] Peter J. Love and Donato Cianci, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 369(1944):2362-2370 (2011).
- [20] A. Zee, *Quantum Field Theory in a Nutshell*, Princeton University Press (2010).
- [21] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford Science Publications (1989).
- [22] P. Dellar, *Phys. Rev. E* **64**(3) (2001).
- [23] X. He, S. Chen, G.D. Doolen, *J. Comput. Phys.* **146**(1), 282 (1998).
- [24] Z. Guo, C. Zheng, B. Shi, *Phys. Rev. E* **65**, 46308 (2002).
- [25] H. Grad, *Notes on N Dimensional Hermite Polynomials* (1949).
- [26] Deville MO, Fischer PF, Mund EH, *High-order methods for incompressible fluid flow*. Cambridge University Press, Cambridge (2002).
- [27] M. Mendoza, *Relativistic fluid dynamics in complex systems*, Ph.D.Thesis. ETH Zurich (2014).
- [28] M. Mendoza, S. Succi, and H. J. Herrmann, *Sci. Rep.* **3**, 3106 (2013).
- [29] J.-D. Debus, M. Mendoza, S. Succi and H. J. Herrmann *Sci. Rep.* **7**, 42350 (2017).