



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN
NICOLÁS DE HIDALGO

INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FLUJOS
CONFINADOS MEDIANTE SPH Y LBM**

T E S I S

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

PRESENTA:

SILVANO ULICES QUE SALINAS



DIRECTOR DE TESIS:

DR. JOSÉ ANTONIO GONZÁLEZ CERVERA

MORELIA MICH.

MAYO DE 2018

Comité de evaluación

Dr. José Antonio González Cervera, Asesor
Dr. Francisco S. Guzmán Murillo, Sinodal titular
Dr. Umberto Cotti Gollini, Sinodal titular
Dr. Ulises Nucamendi Gomez, Sinodal suplente
Dr. Alfredo Raya Montaña, Sinodal suplente

Mayo, 2018

Derechos de autor
Silvano Ulices Que Salinas, Mayo, 2018
Derechos reservados.

DEDICATORIA

A mi amada esposa, sin la cual hace mucho que me habría perdido
entre las mareas del mundo.

A mi pequeña Arlet, cuya sonrisa me alienta a jamás retroceder y
siempre darlo todo.

EPÍGRAFO

*Danzamos alrededor de un círculo
y hacemos suposiciones,
pero el secreto se encuentra en el centro
y posee el conocimiento.*

Robert Frost

TABLA DE CONTENIDO

	Índice de figuras	X
	Índice de tablas	XIII
	Agradecimientos	XIV
	Vita y Publicaciones	XV
	Resumen	XVII
	Abstract	XIX
Capítulo 1.	Motivación e introducción	1
	1.1. Motivación	1
	1.2. Dinámica de fluidos computacional	2
	1.3. Ecuaciones de la mecánica de los fluidos	7
	1.4. Estructura de la tesis doctoral	9
Capítulo 2.	Hidrodinámica de partículas suavizadas	11
	2.1. Representación integral de una función	13
	2.1.1. Longitud de suavizado	14
	2.1.2. Representación integral de la derivada de una función	15
	2.2. Interpolación de partículas	16
	2.3. El Kernel	19
	2.4. Aplicación de SPH a las ecuaciones de Navier-Stokes	20
	2.5. Viscosidad Artificial	21
	2.6. Condiciones de frontera	23
	2.6.1. Condición de frontera de pared sólida	23
	2.6.2. Condición de frontera periódica	24
	2.6.3. Condición de la frontera de entrada y salida	24
	2.7. Conclusiones del capítulo	25
Capítulo 3.	Método de Boltzmann en en malla	27
	3.1. Ecuación de Boltzmann	28
	3.2. Ecuación discreta de Lattice Boltzmann	30
	3.3. Condiciones de frontera	35
	3.3.1. Condiciones de rebote sin deslizamiento	35
	3.3.2. Condiciones de fronteras periódicas	38
	3.3.3. Condiciones de entrada y salida para la velocidad y presión	39
	3.4. Implementación computacional	40

	3.5. Conclusiones del capítulo	42
Capítulo 4.	Modelos y pruebas	43
	4.1. Flujo de Poiseuille	43
	4.1.1. Implementación con SPH	45
	4.1.2. Implementación con LBM	46
	4.1.3. Simulaciones y resultados	46
	4.2. Flujo de Couette	50
	4.2.1. Implementación numérica	50
	4.2.2. Simulaciones y resultados	51
	4.3. Flujo en una cavidad impulsado por una pared en movimiento	55
	4.3.1. Implementación numérica	56
	4.3.2. Simulaciones y resultados	57
	4.4. Flujo alrededor de un disco	65
	4.4.1. Implementación numérica	68
	4.4.2. Simulaciones y resultados	71
	4.4.3. Precisión y auto convergencia	75
	4.5. Conclusiones del capítulo	79
Capítulo 5.	Estimación del número de Reynolds en el flujo alrededor de un disco	80
	5.1. Simulación con LBM del flujo alrededor de un disco en 2D	81
	5.2. Procesamiento de datos	83
	5.3. Resultados del capítulo	88
	5.4. Conclusiones del capítulo	96
Capítulo 6.	Reconocimiento de un obstáculo en un flujo en un tubo dos dimensional	98
	6.1. Simulaciones numéricas	100
	6.2. Metodología	101
	6.2.1. Construcciones de las bases de datos y casos de estudio	103
	6.2.2. Región objetivo	113
	6.2.3. Estructura de la red neuronal artificial	114
	6.3. Resultados del capítulo	115
	6.4. Conclusiones del capítulo	127
Capítulo 7.	Conclusiones y perspectivas	129
	7.1. Perspectivas	132
Apéndice A.	Discretización LBM usando diferencias finitas	135

Apéndice B.	Fuerza de cuerpo en LBM	137
Apéndice C.	Conversión de unidades en LBM	139
Apéndice D.	Vórtice de Taylor-Green	141
Apéndice E.	Conceptos de redes neuronales artificiales	143
Bibliografía		147

Índice de figuras

Figura 2.1.: Dominio de la función kernel W para la partícula i -ésima. . . .	17
Figura 3.1.: Representación de las etapas de Colisión y Propagación para LBM.	32
Figura 3.2.: Espacio de fase discreto en dos dimensiones (Malla D2Q9). . .	34
Figura 3.3.: Ilustración del Full Bounce Back.	37
Figura 3.4.: Ilustración del Half Bounce Back.	38
Figura 4.1.: Perfil de velocidades para el flujo de Poiseuille para un $Re = 0.025$	47
Figura 4.2.: Perfiles de velocidad para el flujo de Poiseuille.	48
Figura 4.3.: Perfil de velocidades para el flujo de Couette para un $Re = 0.025$	51
Figura 4.4.: Perfiles de velocidad para el flujo de Couette.	53
Figura 4.5.: Esquema del flujo en una cavidad cuadrangular impulsado por una pared en movimiento.	55
Figura 4.6.: Magnitud y líneas de contorno de la componente z de la vorticidad para el flujo en una cavidad.	59
Figura 4.7.: Líneas de corriente resultantes para las simulaciones del flujo en una cavidad.	60
Figura 4.8.: Comparación de la componente x de la velocidad y la componente y de la velocidad para $Re = 10$	61
Figura 4.9.: Comparación de la componente x de la velocidad y la componente y de la velocidad para $Re = 100$	62
Figura 4.10.: Comparación de la componente x de la velocidad y la componente y de la velocidad para $Re = 400$	63
Figura 4.11.: Magnitud y líneas de contorno de la componente z de la vorticidad y líneas de corriente resultantes para $Re = 1000$	64
Figura 4.12.: Comparación de la componente x de la velocidad y la componente y de la velocidad para $Re = 1000$	64
Figura 4.13.: Esquema del dominio físico para el flujo alrededor de un disco.	66
Figura 4.14.: Calle de vórtices de von Kármán	68
Figura 4.15.: Magnitud de la vorticidad para la simulación con LBM del flujo alrededor de un disco.	72
Figura 4.16.: Magnitud de la vorticidad para la simulación con LBM del flujo alrededor de un disco.	73
Figura 4.17.: Magnitud de la vorticidad para la simulación con SPH del flujo alrededor de un disco.	74
Figura 4.18.: Series de tiempo de la componente x de la velocidad del flujo.	75
Figura 4.19.: Valor del factor de convergencia para la simulación numérica del vórtice en decaimiento de Taylor-Green	77

Figura 5.1.: Representación esquemática del flujo alrededor del disco y de las ubicaciones de los detectores.	82
Figura 5.2.: Magnitud de v_x para el flujo alrededor de un disco.	84
Figura 5.3.: Magnitud de la componente z de la vorticidad para el flujo alrededor de un disco	85
Figura 5.4.: Ejemplo de las mediciones obtenidas para diferentes ubicaciones de los detectores para un $Re = 100$	86
Figura 5.5.: Ejemplo de las mediciones obtenidas fijando el detector en $x = 0.3m$	87
Figura 5.6.: RMSE para el promedio del conjunto de predicciones.	90
Figura 5.7.: Errores relativos en las predicciones utilizando 83 valores.	91
Figura 5.8.: Errores relativos en las predicciones utilizando 83 valores para $Re = 30$	95
Figura 5.9.: Errores relativos en las predicciones utilizando 83 valores para $Re = 99$	95
Figura 6.1.: Representación esquemática del tubo dos dimensional	100
Figura 6.2.: Magnitud de v_x para el flujo para valores de $\beta = 0.012, 0.183, 0.378, 0.573$ y 0.768	104
Figura 6.3.: Ejemplo de las mediciones obtenidas para diferentes diámetros del obstáculo en el sitio de medición B.	105
Figura 6.4.: Series de tiempo de v_x medida en $y = 0.210m$ sobre el sitio de medición B	106
Figura 6.5.: Series de tiempo de la componente x del campo de velocidades medidas en $y = 0.105m, 0.210m$ y $0.315m$ en el sitio de medición B.	107
Figura 6.6.: Magnitud de v_x para el flujo para obstáculos con diámetros de $0.05m, 0.1m$ y $0.2m$	108
Figura 6.7.: Ejemplo de las mediciones obtenidas para diferentes ubicaciones de obstáculos.	109
Figura 6.8.: Series de tiempo de la componente x del campo de velocidades medidas en $y = 0.105m, 0.210m$ y $0.315m$ en el sitio de medición B.	109
Figura 6.9.: Magnitud de v_x del flujo para valores de $\beta = 0.0976, 0.488, 0.878$	112
Figura 6.10.: Representación de elementos sólidos/líquidos de la malla de la simulación y de la malla objetivo.	113
Figura 6.11.: Magnitud de la componen x de la velocidad del flujo en los sitios A, B y C.	116
Figura 6.12.: Comparación del objetivo y la predicción de una RNA considerando el perfil de v_x	117
Figura 6.13.: Coeficiente de R^2 para las predicciones para los obstáculos ubicados en el centro del tubo dos dimensional con diferentes diámetros.	118

Figura 6.14:.. Análisis de la predicción del coeficiente R^2 para varios tamaños de obstáculos centrados en el tubo dos dimensional.	119
Figura 6.15:.. Comparación del objetivo y la predicción de una RNA considerando el perfil de v_x	120
Figura 6.16:.. Análisis de la predicción de obstáculos en diferentes posiciones sobre el eje y	121
Figura 6.17:.. Análisis de la predicción de obstáculos en diferentes posiciones a lo largo del eje y	122
Figura 6.18:.. Resultados de R^2 obtenidos para obstáculos en diferentes posiciones sobre el eje y	123
Figura 6.19:.. Magnitud de v_x para un flujo alrededor de un obstáculo cuadrangular.	126
Figura 6.20:.. Predicción para un obstáculo cuadrado en el centro del diámetro del tubo dos dimensional.	126
Figura D.1:.. Magnitud de la componente z de la vorticidad para el vórtice de Taylor-Green	142

Índice de tablas

Tabla 4.1.: Error porcentual de la componente x del campo de velocidades .	49
Tabla 4.2.: Error porcentual de la componente x del campo de velocidades .	54
Tabla 5.1.: RMSE de la predicción promedio en los puntos de medición usando v_x	89
Tabla 5.2.: RMSE de la predicción promedio en los puntos de medición usando la componente z de la vorticidad.	89
Tabla 5.3.: Resultados del conjunto de predicción para v_x	92
Tabla 5.4.: Resultados del conjunto de predicción para la componente z de la vorticidad.	93
Tabla 6.1.: Parámetros utilizados en las simulaciones para los diferentes casos estudiados.	102
Tabla 6.2.: Base de datos para diámetros, velocidades del flujo de entrada y ubicaciones de los sensores utilizados en el caso 3	111
Tabla 6.3.: R^2 para el conjunto de predicción.	125

AGRADECIMIENTOS

Agradezco plenamente al Dr. González por su esfuerzo y dedicación guiándome durante mi formación doctoral. Así mismo por su valioso tiempo y su amplia paciencia durante estos años.

Agradezco a los Drs. Francisco Siddhartha Guzmán, Umberto Cotti, Alfredo Raya y Ulises Nucamendi por su participación en la culminación de esta tesis y mi formación doctoral.

A los hijos de Cuauhtémoc, que me han proporcionado su sincera amistad y apoyo durante todos estos largos años, les agradezco por todo lo que han hecho por mí. Como hermanos, les tendré siempre en la sangre.

Finalmente, agradezco a todos aquellos compañeros estudiantes del IFM que voluntaria o involuntariamente, contribuyeron a la consolidación de esta tesis. A todo el personal académico y administrativo del Instituto de Física y Matemáticas. A la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo por prestarme todos los servicios necesarios para el desarrollo de mis estudios doctorales. Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por su apoyo fundamental como parte del programa de Doctorado

VITA

- 2014 Maestría en Ciencias en el Área de Física,
Instituto de Física y Matemáticas,
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.
- 2010 Licenciatura en Física,
Facultad de Física e Inteligencia Artificial,
Universidad Veracruzana.

PUBLICACIONES

- Carrillo, M., Que, U., González, J.A. & López, C., *Recognition of an obstacle in a flow using artificial neural networks*. Physical Review E, 96 (2), 2017.
- Carrillo, M., Que, U. & González, J.A. *Estimation of Reynolds number for flows around cylinders with lattice Boltzmann methods and artificial neural networks*. Physical Review E, 94(6), 2016.

Resumen

En el estudio de los fenómenos naturales que involucran a fluidos y que presenciemos día con día, usualmente es necesario estudiarlos desde una perspectiva computacional debido a su complejidad física, o a la imposibilidad de analizar toda la información que los representa. Este planteamiento nos lleva a la implementación de métodos numéricos para el estudio de la dinámica de los fluidos, con los cuales, es posible obtener aproximaciones numéricas de las propiedades relevantes del fenómeno de interés, y con ello, conseguir una descripción física del mismo.

En este trabajo de tesis doctoral se plantea el uso de métodos numéricos como herramientas para la simulación numérica de la dinámica de fluidos incompresibles confinados. Dos métodos ampliamente distintos fueron empleados para esta labor; a decir, los métodos “Hidrodinámica de partículas suavizadas” y “el método de Boltzmann en malla”; el primero de ellos un método de partículas libre de malla, y el segundo un método de malla mesoscópico. Con éstos, se construyeron códigos numéricos 2-dimensionales que habrían de resolver las ecuaciones gobernantes de la dinámica de los fluidos.

Los códigos se probaron bajo distintos modelos clásicos en el área de la dinámica de fluidos computacional, mostrando un buen desempeño en todos los casos propuestos. No obstante, el código desarrollado con el método de Boltzmann en malla mostró ser mas estable y preciso en todos los casos, por lo cual, sumado a su simplicidad de implementación, fue el empleado para la realización de las investigaciones científicas desarrolladas en este trabajo doctoral.

Las dos investigaciones realizadas se enfocan en el estudio de obstrucciones en flujos incompresibles en tuberías. La primera de ellas está motivada en la necesidad de caracterizar a los flujos en tuberías que presentan un obstáculo en su interior, para lo cual con la ayuda de redes neuronales artificiales, se busca determinar el número de Reynolds a través de la información obtenida de una amplia base de datos de las simulaciones numéricas realizadas con el método de Boltzmann en malla. La segunda investigación sigue una línea similar, enfocándose en

el reconocimiento del tamaño y la ubicación de una obstrucción presente dentro de la tubería.

Con estas investigaciones se corrobora el potencial que tiene el método de Boltzmann en malla para la simulación de flujos incompresibles, sobre todo al atacar la interacción entre sólidos y fluidos. A su vez, se muestra la versatilidad que tiene el método para implementarse en configuraciones complejas y obtener resultados a distintos regímenes del número de Reynolds.

Palabras clave: *Simulaciones numéricas, SPH, LBM, obstrucciones en tuberías, flujo en un tubo de dos dimensiones.*

Abstract

In the study of natural phenomena that involve fluids and that we witness every day, it is usually necessary to study them from a computational perspective due to their physical complexity, or the impossibility of analyzing all the information that represents them. This approach leads us to the implementation of numerical methods for the study of fluid dynamics, with which it is possible to obtain numerical approximations of the relevant properties of the phenomenon of interest, and thus, to obtain a physical description of it.

In this doctoral thesis work, the use of numerical methods is proposed as tools for numerical simulation of the dynamics of confined incompressible fluids. Two widely differing methods were used for this work, namely the "Hydrodynamic method of softened particles" and the "lattice Boltzmann method"; the first one a mesh free particle method, and the second one a mesoscopic mesh method. With these, 2-dimensional numerical codes were constructed to solve the governing equations of fluid dynamics.

The codes were tested under different classical models in the area of computational fluid dynamics, showing good performance in all the proposed cases. However, the code developed with lattice-Boltzmann proved to be more stable and precise in all cases, so that, added to its simplicity of implementation, it was the one used to carry out the scientific research developed in this doctoral work.

The two investigations carried out focus on the study of obstructions in incompressible flows in pipes. The first of these is motivated by the need to characterize flows in pipes that present an obstacle inside them, for which with the help of artificial neural networks, is sought to determine the number of Reynolds through the information obtained from a large database of numerical simulations made with lattice-Boltzmann. The second investigation follows a similar line, focusing on recognizing the size and location of an obstruction present within the pipeline.

This research corroborates the potential of the lattice Boltzmann method

for the simulation of incompressible flows, especially when attacking the interaction between solids and fluids. In turn, it shows the versatility of the method to be implemented in complex configurations and obtain results at different Reynolds number regimes.

Keywords: *Numerical Simulations, SPH, LBM, pipe obstructions, flow in a pipe in two dimensions.*

Capítulo 1

Motivación e introducción

1.1. Motivación

Los flujos que se generan debido al desplazamiento de los fluidos se pueden encontrar por todas partes en la naturaleza y ocupan un lugar relevante en nuestro mundo tecnológico, así como en el funcionamiento de un gran número de procesos industriales. No sólo son esenciales para la vida, sino también para comprender procesos físicos fundamentales a todas las escalas mensurables, desde el mundo nanométrico hasta las escalas cosmológicas. Los fluidos intervienen en muchos procesos biológicos, fisiológicos y ambientales, lo cual incluye los flujos presentes en el cuerpo humano, la multitud de flujos en toda la fauna y flora, y los procesos de flujo atmosférico, que influyen en el clima y la meteorología. Por lo tanto, comprender la evolución dinámica de los fluidos es importante.

Los principios teóricos de la mecánica de fluidos (que es el área de la física que se enfoca en la descripción de las propiedades y el comportamiento de los fluidos) se utilizan en casi todas las formas de ingeniería mecánica y química, con efectos de gran alcance en avances tecnológicos. El estudio del movimiento de los fluidos es, en general, un problema muy complejo. Las moléculas de un fluido, además de ejercer entre sí acciones mutuas que rigen su dinámica, pueden tener diferentes velocidades y estar sujetas a distintas aceleraciones. Por esta razón es necesario tener en cuenta conceptos adicionales al aplicar las leyes de la dinámica a los fluidos en movimiento, y a su vez, herramientas modernas que nos permitan

facilitar y profundizar su comprensión. Es en esto último es donde la dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en Inglés) adquiere relevancia, pues esta área de la física, que se enfoca en la simulación numérica de la dinámica de los fluidos, permite describir su comportamiento para algunos casos en los que las ecuaciones que rigen su dinámica no tienen solución exacta.

1.2. Dinámica de fluidos computacional

Cuando estamos comprometidos con modelar matemáticamente la materia, o cualquier otro sistema de interés, es obligatorio el tomar inmediatamente el estado más fundamental; es decir, aquel con el menor número de suposiciones posibles. Por tanto, tenemos que elegir el nivel de abstracción que deseamos para nuestro modelo matemático; esto es, una descripción física que puede incluir detalles minuciosos del sistema o que puede funcionar sobre bases más generales.

En el contexto de la dinámica de fluidos, que es el objeto de interés en este trabajo doctoral, estos dos niveles de abstracción corresponden, uno, al mundo subyacente de átomos y moléculas invisibles al ojo humano, y otro, a un volumen continuo de fluido tal como lo percibimos con nuestros sentidos. La escala de las partículas, átomos y moléculas se conoce como escala microscópica y la escala de las características visibles se conoce como escala macroscópica. La conexión entre estos dos niveles extremos, un tipo de puente, es un nivel intermedio denominado adecuadamente como escala mesoscópica, la cual se encuentra entre la escala macroscópica del mundo en que vivimos, y la escala microscópica. Las descripciones físicas a nivel mesoscópico apuntan esencialmente a un compromiso entre los detalles y la abstracción más general del sistema.

Los modelos matemáticos que buscan describir la dinámica de los fluidos sólo ocasionalmente pueden ser susceptibles al tratamiento analítico, debido a la complejidad física que presentan la mayoría de los fenómenos físicos de interés que involucran a fluidos. Por este motivo, lo habitual es que, bajo un cierto nivel de abstracción, estos modelos sean simplificados o modificados; de tal modo que se obtengan nuevos modelos, para los cuales existan medios prácticos de extraer

resultados concretos y aproximados. Dado que el mundo en el que vivimos se ha precipitado a la era digital desde hace ya algún tiempo, la forma más práctica o al menos la más efectiva de resolver numéricamente ecuaciones con mayor complejidad hoy en día, es mediante el uso de la computación. Con este fin, las llamadas contrapartes discretas se construyen generalmente para los modelos continuos originales; los modelos discretos se construyen cuidadosamente con el propósito de producir resultados que se aproximen, de manera consistente, a situaciones más realistas.

Un modelo numérico es un procedimiento que busca discretizar a las ecuaciones de la física del continuo e incluye no sólo a las ecuaciones del modelo en particular; sino también al método para realizar el cálculo numérico; a las condiciones iniciales y de frontera bien definidas, garantizando tanto la existencia como la unicidad de la solución aproximada para una configuración en particular; así como parámetros significativos para controlar las propiedades del modelo [1]. El método numérico en ciertos casos, solo se encarga de resolver las ecuaciones sin importarle si las condiciones iniciales impuestas tienen, o no, sentido para interpretar lo que en principio se intenta simular; mientras que, en otros, dichas condiciones iniciales impuestas al método, deben satisfacer condiciones de restricción durante la evolución numérica, a fin de interpretar fielmente al fenómeno de interés. Las simulaciones computacionales de un sistema físico bajo investigación son entonces factibles de realizar simplemente ejecutando el programa informático construido con dicho método numérico, el cual es implementado para calcular soluciones aproximadas de nuestro modelo matemático original.

En general, las ecuaciones gobernantes de la dinámica de los fluidos (para el intercambio de calor, masa y momento) pueden ser resueltas numéricamente en diferentes escalas. En una escala macroscópica, se utilizan ecuaciones diferenciales parciales (PDE por sus siglas en Inglés) como la ecuación de Navier-Stokes [2]. Este tipo de ecuaciones son difíciles de resolver analíticamente debido a la falta de linealidad, geometría complicada y condiciones frontera. Con la ayuda de esquemas numéricos como el método de la diferencia finita (FDM por sus siglas en inglés) [3], el método del volumen finito (FVM por sus siglas en inglés) [4], el método

del elemento finito (FEM por sus siglas en inglés) [5], o los métodos espectrales [6], las PDE se convierten en un sistema de ecuaciones algebraicas. Normalmente estas ecuaciones se resuelven iterativamente hasta obtener resultados satisfactorios respecto al nivel de descripción deseado.

Hay dos marcos fundamentales para describir las ecuaciones gobernantes de la dinámica de los fluidos: la descripción euleriana y la descripción lagrangiana. La descripción euleriana es una descripción espacial en la cual un volumen de control¹ se fija en el espacio y las variables del flujo como la densidad, la velocidad o la presión se expresan como funciones espaciales temporales a través de las cuales se determina la evolución del fluido dentro del volumen de control. Por el contrario, la descripción lagrangiana es una descripción material en la cual la dinámica del fluido es analizada rastreando las propiedades de los bloques de fluido o “partículas” a medida que éstas evolucionan en el espacio y el tiempo. La diferencia fundamental de estos dos formalismos es que la descripción lagrangiana emplea la derivada temporal total como la combinación de derivada local y la derivada convectiva. Esto es:

$$\frac{d\vec{Q}}{dt} = \frac{\partial\vec{Q}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}\vec{Q}, \quad (1.1)$$

donde \vec{Q} es una cierta variable física (como puede ser la densidad), d/dt es la derivada temporal total, $\partial/\partial t$ es la derivada local que es físicamente la razón temporal de cambio en un punto fijo, $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ es la derivada convectiva que es físicamente el cambio debido al movimiento del elemento de fluido de un lugar a otro en el campo del flujo, donde las propiedades del flujo son espacialmente diferentes. Por lo tanto, la derivada total respecto al tiempo describe que la propiedad \vec{Q} del elemento de fluido está cambiando, a medida que el elemento de fluido pasa por un punto en el espacio. Esto se debe a que 1) en ese punto, la propiedad del flujo puede estar

¹El volumen de control se define como un volumen cerrado con dimensiones finitas, sumergido en un sistema conformado por un fluido en movimiento. En la descripción lagrangiana, este volumen de control puede moverse con el flujo tal que la misma materia del fluido permanece siempre dentro del mismo (no cambia), aunque cuando este resulte en una expansión, compresión y deformación del volumen. El volumen de control se considera razonablemente grande, tal que las leyes de conservación gobernantes pueden ser aplicadas directamente a los fluidos dentro de él.

fluctuando con el tiempo ($\partial/\partial t$); 2) el elemento de fluido está en camino a otra ubicación en el campo del flujo donde la propiedad del flujo puede ser diferente ($\vec{v} \cdot \vec{\nabla}$).

Otro método que también trabaja en la escala macroscópica y que recientemente ha cobrado gran relevancia en CFD es el método Hidrodinámica de Partículas Suavizadas o SPH por sus siglas en inglés. SPH es un método numérico lagrangiano sin malla propuesto independientemente por Gingold y Monaghan [7] y Lucy [8]. Inicialmente, el método se aplicó a problemas astrofísicos en espacios abiertos tridimensionales. El método no atrajo mucha atención en la comunidad científica hasta que se aplicó con éxito en otros campos. Especialmente, el trabajo de Monaghan [9] centrado en los flujos de superficie libre abrió el campo de la mecánica de fluidos. Durante las últimas tres décadas, el método ha sido modificado para su uso determinista en el campo de la hidrodinámica, con la publicación de los primeros trabajos de superficie libre a mediados de los años 90 por Monaghan en [10, 11]. Actualmente, SPH representa uno de los métodos más robustos entre los métodos de partículas para la CFD y por lo tanto es elegido como una de las metodologías principales a emplear en esta tesis.

SPH es un método utilizado para modelar la dinámica de los fluidos que integra las ecuaciones hidrodinámicas del movimiento e interacción de cada elemento de fluido (al que se le llama partícula) en el formalismo lagrangiano. Las propiedades físicas relevantes se calculan para cada partícula como una interpolación de los valores numéricos de las partículas vecinas más cercanas y, a continuación, las propiedades físicas de dichas partículas evolucionan dinámicamente de acuerdo con esos valores. Las leyes de conservación de la dinámica de los fluidos continuos, escritas en forma de ecuaciones diferenciales parciales, se transforman en expresiones discretas que son evaluadas sobre cada partícula mediante ecuaciones integrales a través del uso de una función de interpolación, la cual da la estimación de las variables del campo en un punto. Computacionalmente, la información se conoce sólo en puntos discretos (las partículas), de manera que las integrales son evaluadas como sumas sobre partículas vecinas. La principal ventaja de este método sobre los métodos con malla radica en la libertad que tienen las partículas para desplazarse

por todo el dominio computacional, lo cual permite una gran estabilidad numérica cuando se trabaja con amplias deformaciones en las fronteras del fluido.

El segundo enfoque consiste en simular partículas pequeñas en una escala microscópica. Esto representa a la dinámica molecular, donde es necesario encontrar las fuerzas que están involucradas en la interacción intermolecular y resolver entonces la ecuación diferencial ordinaria asociada a la segunda ley de Newton, identificando en cada momento la trayectoria (ubicación y velocidad) de cada una de las partículas que conforman a la totalidad del fluido. Pero simplemente habría demasiados datos que manejar para simular un problema interesante en una escala macroscópica, lo cual implica un alto costo computacional. Por dar una idea, basta saber que un litro de aire contiene aproximadamente 10^{22} moléculas. No tenemos que conocer la posición de cada partícula, lo importante es el efecto resultante, por ejemplo, el viento.

El método de Boltzmann en malla [12, 13] cierra la brecha entre la escala macro y la escala micro, el cual es también llamado método Lattice Boltzmann (LBM). LBM se basa en modelos microscópicos y ecuaciones cinéticas mesoscópicas. La idea fundamental de LBM es construir modelos cinéticos simplificados que incorporen la física esencial de los procesos microscópicos para que las propiedades macroscópicas promedio obedezcan a las ecuaciones macroscópicas deseadas [14]. La razón por la que se pueden utilizar modelos cinéticos simplificados es que la dinámica macroscópica de un fluido es el resultado del comportamiento colectivo de muchas partículas microscópicas en el sistema [14].

Lattice Boltzmann es un método relativamente nuevo para la simulación de la dinámica de los fluidos, que goza de una creciente popularidad, debido a su simplicidad de aplicación y alta capacidad para emular una amplia variedad de fenómenos [15, 16]. LBM fue introducido en 1988 por McNamara y Zang [17] para superar los inconvenientes del método lattice gas cellular automata (LGA), en el cual tiene sus orígenes [18, 19]. En LGA un fluido puede ser considerado como una colección de partículas discretas que interactúan entre sí a través de ciertas reglas específicas. LGA fue introducido por Hardy et al. [20] en 1976, aquí las partículas discretas residían en una malla cuadrada. Posteriormente se introdujo el

uso de una malla hexagonal [19], lo que permitió establecer la isotropía espacial. Desgraciadamente, las simulaciones del método LGA mostraron violación a la invariancia galileana [21, 13], sumado al problema de la alta dificultad de expandir el modelo a tres o más dimensiones. McNamara y Zanetti [17] propusieron promediar el conjunto de reglas básicas de LGA sobre un número ficticio de nodos de malla, formulando LGA en términos de densidades de partículas. Esta formulación es la ecuación de Lattice Boltzmann.

Para comprender el procedimiento que realiza LBM al simular la dinámica de un fluido, imaginase un fluido el cual es modelado por partículas, y éstas pueden moverse solo en un número limitado de direcciones en una malla numérica. Con cada paso de tiempo las partículas en un cierto nodo se mueven a un nodo vecino de la malla numérica, tras lo cual se producen las colisiones entre las partículas, redistribuyendo sus velocidades de una cierta manera.

Este es un enfoque conceptualmente muy diferente con respecto a todos los métodos antes mencionados. Básicamente, el algoritmo resuelve ecuaciones mesoscópicas que representan la interacción entre partículas y, a partir de dicha interacción, se emula el comportamiento macroscópico del sistema. LBM es más simple que la mayoría de los otros métodos, ya que es un esquema discretizado explícito de primer orden (aunque no por ello menos preciso). Esta técnica puede describir condiciones de frontera complejas con algoritmos cortos, lo que reduce drásticamente el tiempo de cálculo. A su vez, LBM ha demostrado tener un fuerte potencial en numerosas aplicaciones, principalmente en simulaciones de dinámica de fluidos, y es particularmente ventajoso para la simulación de flujos en medios porosos [22], de flujos multifase y multicomponente, y hemodinámica, por nombrar algunas de sus aplicaciones. Por todo lo anterior, LBM es el principal método numérico empleado en esta tesis.

1.3. Ecuaciones de la mecánica de los fluidos

Es importante mencionar que tanto la descripción microscópica como la descripción continua macroscópica de un fluido pueden utilizarse como punto de

partida para derivar un método que describa, bajo ciertas aproximaciones la dinámica de los fluidos.

En esta tesis se presentarán dos métodos para el estudio de la mecánica de los fluidos. Primero enfocandose en un método basado en una descripción lagrangiana y macroscópica de los fluidos, para luego enfocarnos en un método basado en la interacción de las partículas desde una perspectiva mesoscópica y euleriana.

Las ecuaciones macroscópicas que describen la conservación de la masa y el momento para un fluido newtoniano compresible y no relativista son las ecuaciones de Navier-Stokes [2, 23]:

Ec. de Continuidad:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v}, \quad (1.2)$$

Ec. de Momento:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla} P + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{v} + \frac{1}{3} \mu \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) + \rho \vec{f}_{ext}, \quad (1.3)$$

siendo $\frac{d}{dt}$ la derivada total, ρ la densidad del fluido, \vec{v} su velocidad, P su presión, μ la viscosidad dinámica y \vec{f}_{ext} las fuerzas externas presentes en dicho fluido. Además de las ecs. 1.2 y 1.3, la descripción completa de la dinámica de un fluido requiere del uso de una ecuación de estado para equilibrar el número de incógnitas del sistema y sus ecuaciones.

En esta tesis se trabajó con fluidos newtonianos incompresibles no relativistas, por lo que las ecs. 1.2 y 1.3 se simplifican. A su vez, las propiedades térmicas del fluido no son de interés en este trabajo, y por lo tanto no se necesita de una ecuación de energía adicional para la simulación numérica de dichos fluidos; esto es, si por definición el tensor de esfuerzos es linealmente proporcional al tensor de deformación [2], para un flujo incompresible ($\rho = \text{constante}$) también se supone un flujo aproximadamente isotérmico sabiendo que los cambios locales en temperatura son pequeños o inexistentes; esto elimina la necesidad de una ecuación diferencial de conservación de energía. Una consecuencia de la última suposición es que las propiedades del fluido, como la viscosidad dinámica μ , también son constantes. Lo cual nos arroja que la ec. 1.3 tome finalmente la forma:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla}P + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{v} + \rho \vec{f}_{ext}. \quad (1.4)$$

1.4. Estructura de la tesis doctoral

La tesis proporciona una descripción de los métodos SPH y LBM, las pruebas realizadas para los códigos, y a su vez diferentes aplicaciones para CFD usando LBM. Está organizada en un total de siete capítulos que se exponen a continuación:

El Capítulo 1 presenta la motivación de esta tesis doctoral y de las investigaciones desarrolladas para defenderla. A su vez introduce los conceptos fundamentales de la dinámica de fluidos y de la dinámica de fluidos computacional, haciendo especial mención en la presentación y trasfondo de los métodos SPH y LBM.

El Capítulo 2 proporciona los elementos fundamentales y básicos para la descripción de SPH. Describiendo las dos etapas que caracterizan al método: la representación integral de una función y la interpolación de partículas. Así mismo se presenta la aplicación de SPH a las ecuaciones de Navier-Stokes y se establecen las condiciones de frontera a emplear por el método.

El Capítulo 3 describe el método LBM. En él mismo se presenta la ecuación discreta de Lattice Boltzmann (LBE por sus siglas en inglés) y se establece su implementación computacional, las condiciones de frontera a emplear y la conversión de unidades en LBM.

El Capítulo 4 introduce los modelos iniciales que se desarrollaron con los métodos SPH y LBM, asimismo se presentan los resultados obtenidos a fin de probar los códigos desarrollados con ambos métodos. Se da un mayor peso al caso del flujo alrededor de un obstáculo con forma de disco, al ser éste la base para los estudios presentados en los capítulos 5 y 6.

El Capítulo 5 describe el estudio desarrollado con LBM en conjunto con redes neuronales artificiales (RNAs) para la caracterización de los patrones de flujo producidos en el flujo alrededor de un disco mediante la estimación del número de Reynolds asociado a los mismos.

El Capítulo 6 describe el estudio desarrollado con LBM en conjunto con RNAs enfocado en el reconocimiento de la forma y la localización de una obstrucción presente en un tubo dos dimensional.

El Capítulo 7 presenta las conclusiones de esta tesis doctoral y las perspectivas a futuro relacionadas, tanto con los resultados obtenidos en las investigaciones desarrolladas, como con la evolución de los códigos desarrollados hasta ahora.

Capítulo 2

Hidrodinámica de partículas suavizadas

En este capítulo se presentará el método Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (SPH). La información proporcionada se centra en los modelos y conceptos utilizados en esta tesis. Si se requiere una descripción más completa y detallada, el lector puede consultar los libros de texto de Liu et al.[23] y Violeau[24], así como los trabajos de Monaghan [9, 10, 25].

SPH comparte muchas similitudes con otros métodos de partículas y métodos sin malla, mientras que posee sus características únicas. Entre ellas, SPH posee características que lo hacen superior a otros métodos; por ejemplo, su alta capacidad para tratar problemas con grandes deformaciones de las fronteras geométricas del fluido [26, 27], como son las fluctuaciones de la superficie libre de un flujo [28] que se generan debido a movimientos violentos. Esta capacidad se debe a que su carácter lagrangiano permite que las partículas que conforman la frontera del fluido se desplacen libremente al mismo ritmo que se deforma la frontera, evitando el problema de tener una malla que deba ir deformándose a cada paso de tiempo para adaptarse a la forma del fluido. Entre las desventajas del método, se tiene en primer lugar, su dificultad para trabajar con modelos que contemplen condiciones de frontera no periódicas. También presenta una dificultad para controlar la evolución numérica debido a la libertad que se le da a las partículas; esto es, no se tiene control del comportamiento individual de cada partícula. Aunado a

lo anterior el método requiere del uso de varias herramientas que permitan mantener dicho orden, como es la viscosidad artificial (que se presentará más adelante). Una de las desventajas con respecto a técnicas basadas en malla es la necesidad de un alto número de partículas para producir simulaciones de resolución equivalente. Finalmente, es sabido que realmente no es posible asegurar la convergencia del método debido a que la resolución de la malla no está relacionada solo con el número de partículas empleado, sino también con la longitud de suavizado.

El método es atractivo en muchas aplicaciones, especialmente en simulaciones hidrodinámicas en los que la densidad es una variable determinante en las ecuaciones gobernantes. La aproximación de las partículas en el método SPH se lleva a cabo en cada paso de tiempo con partículas en el dominio, y se realiza para las PDE que gobiernan en la descripción lagrangiana. Esta naturaleza lagrangiana, de adaptabilidad, libre de malla y de partículas del método SPH evitan problemas tales como la deformación de la malla, y por lo tanto es muy atractiva en el tratamiento de grandes deformaciones en el dominio computacional.

SPH emplea partículas para representar al fluido y formar el bloque de cálculo [9]. No hay necesidad de conectividad predefinida entre estas partículas; esto es, no es necesario establecer para cada partícula cuales son sus vecinos directos con los cuales habrá de interactuar. Por ello, todo lo que se necesita es la distribución inicial de las partículas [23, 29]. Por lo tanto, a diferencia de todos los métodos basados en mallas tales como FEM y FDM, SPH no necesita una malla para calcular derivadas espaciales. En lugar de ello, se encuentran por diferenciación analítica de las fórmulas de interpolación presentadas mas adelante.

La formulación de SPH se basa en aplicar dos conceptos fundamentales a una ecuación diferencial, y por tanto, es a menudo dividida en dos pasos fundamentales: la representación integral y la aproximación de partículas. El primero, también llamado aproximación kernel, se refiere a la representación de una función continua mediante una convolución con una función de suavizado. El segundo concepto consiste en la aproximación que se lleva a cabo para llevar el resultado de la representación integral a una descripción discretizada.

2.1. Representación integral de una función

Los tipos de problemas abordados con SPH generalmente implican encontrar una solución aproximada de las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) de la dinámica de los fluidos para las que no es posible un tratamiento analítico. Los resultados numéricos consisten en un conjunto de funciones escalares y vectoriales (por ejemplo, deformación, velocidad, presión, etc.) que describen la evolución espacial y temporal del medio investigado. El primer concepto hacia la formulación de un conjunto de ecuaciones de conservación para el método SPH es la representación integral de una función, $F(\vec{x})$. Partiendo de la identidad

$$F(\vec{x}) = \int F(\vec{x}') \delta(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}', \quad (2.1)$$

es posible aproximar la función delta del Dirac, $\delta(\vec{x} - \vec{x}')$ por un interpolante compacto, $W(\vec{x} - \vec{x}', h)$, llamado kernel o función de suavizado [23, 25]. Esto es,

$$F(\vec{x}) \approx \int F(\vec{x}') W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}', \quad (2.2)$$

donde la integral se evalúa sobre todo el espacio. La ecuación 2.2 toma el nombre de la aproximación kernel de $F(\vec{x})$, y está marcada por corchetes angulares $\langle \rangle$,

$$\langle F(\vec{x}) \rangle = \int F(\vec{x}') W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}', \quad (2.3)$$

que describe la aproximación de una función mediante una representación integral pesada con un kernel.

El parámetro h gobierna el tamaño del soporte del kernel (su área de influencia) y se denomina longitud de suavizado. La función de suavizado W es usualmente escogida como una función positiva a lo largo del dominio, ya que en simulaciones hidrodinámicas, valores negativos de la función de suavizado pueden resultar parámetros no físicos, tales como valores negativos de la densidad y la energía [23]. Sumado a lo anterior, se le pide que satisfaga ciertas condiciones que se establecerán a continuación.

La primera de éstas es la condición de normalización, tal que la integración

de la función de suavizado deba producir la unidad, que se establece como

$$\int W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' = 1. \quad (2.4)$$

La segunda condición es que el comportamiento de tipo función Delta se observe cuando la longitud de suavizado tienda a cero, esto es

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' = \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (2.5)$$

donde $d\vec{x}'$ es el elemento diferencial de volumen.

Es importante resaltar que cuando W no es la función delta de Dirac, la representación integral en la ecuación 2.2 puede ser solo una aproximación; o en otras palabras, la interpolación reproduce la cantidad F exactamente si el kernel es una función delta de Dirac. Esto es el origen del término Aproximación Kernel. En la práctica, los kernel son funciones, las cuales tienden a una función delta de Dirac en la medida en que la longitud de suavizado h tiende a cero.

La tercera condición es que la función de suavizado satisfaga la condición de soporte compacto

$$W(|\vec{x} - \vec{x}'|, h) = 0 \quad \text{para} \quad kh \leq |\vec{x} - \vec{x}'|, \quad (2.6)$$

donde k es una constante relacionada con la función de suavizado para un punto en \vec{x} , y define el área efectiva (no cero) de la función de suavizado.

2.1.1. Longitud de suavizado

La longitud de suavizado h es fundamental en la aplicación del método SPH, ya que ésta tiene una influencia directa en la eficiencia computacional y en la precisión de la solución. Si h es demasiado pequeña, podría no haber suficientes partículas en el dominio de apoyo de dimensión kh para ejercer fuerzas sobre las respectivas partículas. Si la longitud de suavizado es demasiado grande, todos los detalles de la partícula o las propiedades locales del sistema pueden ser sobre suavizados y con ello la precisión sería afectada. La interpolación de partículas (descrita más adelante) usada por el método SPH depende de que se tenga un, suficiente y necesario, número de partículas dentro del dominio de apoyo dado por

kh . El esfuerzo y velocidad de cómputo también dependen del número de partículas. En una, dos o tres dimensiones, el número de partículas vecinas (incluyendo a la partícula misma) suelen ser alrededor de 5, 21 y 57 respectivamente si las partículas son emplazadas con una longitud de suavizado de 1.2 veces el espaciado entre partículas, y $k = 2$.

En problemas donde hay grandes inhomogeneidades de la densidad en el dominio y donde las partículas pueden moverse dramáticamente durante la evolución del proceso, es necesario un modelo efectivo, adaptativo y robusto para la longitud de suavizado. Para lograr esto, la longitud de suavizado h debería variar tanto en el tiempo como en el espacio.

Hay muchas maneras de evolucionar h dinámicamente tal que el número de partículas vecinas permanezca relativamente constante. En este sentido, el enfoque más simple es adaptar la longitud de suavizado de acuerdo al promedio de la densidad [12]:

$$h = h_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{1/d}, \quad (2.7)$$

donde h_0 y ρ_0 son la longitud de suavizado inicial y la densidad inicial respectivamente y d es el número de dimensiones. Es a partir de h_0 que es posible ajustar el número exacto de partículas vecinas, no obstante, debido a la libertad de las mismas, esto solo se mantiene con certeza al inicio de la evolución numérica.

2.1.2. Representación integral de la derivada de una función

La aproximación de la derivada espacial $\vec{\nabla}F(\vec{x})$ es obtenida simplemente mediante la sustitución de $F(\vec{x})$ con $\vec{\nabla}F(\vec{x})$ en la ecuación 2.3, lo cual arroja:

$$\langle \vec{\nabla}F(\vec{x}) \rangle = \int [\vec{\nabla}F(\vec{x}')] W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}', \quad (2.8)$$

donde el gradiente de la integral es operado con respecto a la coordenada primada.

Para aquellos puntos cuyo soporte está contenido totalmente en el dominio, podemos simplemente integrar por partes el lado derecho de la ecuación 2.8 y con ello la expresión se reduce a:

$$\langle \vec{\nabla} F(\vec{x}) \rangle = \int F(\vec{x}') \vec{\nabla} W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}'. \quad (2.9)$$

De la ecuación obtenida, se puede ver que la operación diferencial sobre una función F es transformada a una operación diferencial sobre la función de suavizado W . En otras palabras, la representación integral del método SPH para la derivada de una función arroja que el gradiente espacial sea determinado a través de los valores de la función F y la derivada de la función de suavizado W , y no mediante las derivadas de la función F .

2.2. Interpolación de partículas

En el método SPH, el sistema completo está representado por un número finito de partículas que acarrean una masa individual y ocupan una posición particular. Las representaciones de integrales en el continuo concernientes a la aproximación Kernel del método SPH (expresadas en las ecuaciones 2.3 y 2.8) pueden pasarse a formas discretas mediante sumatorias sobre todas las partículas en el dominio de apoyo (tal como se muestra en la figura 2.1). El correspondiente procedimiento que discretiza a las representaciones integrales mediante sumatorias sobre las partículas es comúnmente llamado aproximación (interpolación o promedio) de partículas.

Para aplicar esta interpolación a un fluido, lo dividimos en un conjunto de pequeños elementos de masa. El elemento “ j ” tendrá una masa m_j , una densidad ρ_j y una posición \vec{x}_j . El valor de F para la partícula “ j ” es denotado como F_j . Si el volumen infinitesimal $d\vec{x}'$ en las integrales anteriores sobre la partícula i -ésima es remplazado por el volumen finito dV_j de la partícula j -ésima que está relacionado con la masa de las partículas m_j por

$$m_j = dV_j \rho_j, \quad (2.10)$$

donde ρ_j es la densidad de la partícula j ($= 1, 2, \dots, N$) en la cual N es el número de partículas dentro del dominio de apoyo de la partícula i -ésima. Entonces, la

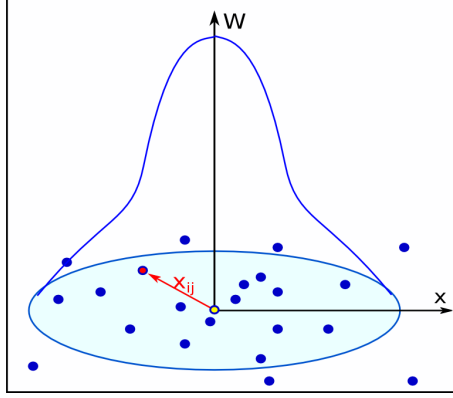


Figura 2.1: Dominio de la función kernel W para la partícula i -ésima, sobre el que se realiza la interpolación partícula en SPH. Notese que solo las partículas j -ésimas contenidas en el dominio de apoyo de W aportan al cálculo de la interpolación evaluada sobre la partícula i -ésima.

aproximación de partículas consiste en calcular las representaciones integrales descritas por las ec. 2.3 como una sumatoria de las contribuciones de los volúmenes discretos alrededor de cada partícula. La integral puede entonces aproximarse mediante una sumatoria sobre los elementos de masa, lo cual nos arroja la sumatoria interpolante:

$$\langle F(\vec{x}) \rangle = \int F(\mathbf{r}') W(\vec{x} - \vec{x}', h) d\vec{x}' \approx \sum_{j=1}^N F_j W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \Delta V_j, \quad (2.11)$$

donde la expresión en el centro es la aproximación sobre el continuo que realiza el método SPH y la expresión a la derecha es la discretización posterior que realiza el método. Así,

$$\langle F(\vec{x}) \rangle \approx \sum_{j=1}^N F_j W(\vec{x} - \vec{x}_j, h) \frac{1}{\rho_j} (m_j), \quad (2.12)$$

donde el elemento de masa m_j es $\rho_j \Delta V_j$. Con lo que finalmente las versiones discretas de las ecs. 2.3 y 2.8 evaluadas sobre la partícula i -ésima se calculan respectivamente como:

$$\langle F(\vec{x}_i) \rangle = \sum_j m_j \frac{F_j}{\rho_j} W(\vec{x}_i - \vec{x}_j, h), \quad (2.13)$$

$$\langle \vec{\nabla} F(\vec{x}_i) \rangle = \sum_j m_j \frac{F_j}{\rho_j} \vec{\nabla}_i W(\vec{x}_i - \vec{x}_j, h), \quad (2.14)$$

donde la sumatoria se realiza sobre todas las partículas del dominio computacional, pero en la práctica, sólo se lleva a cabo sobre los vecinos j -ésimos cercanos a la partícula i -ésima, dado que W cae rápidamente con respecto a la distancia. Por lo anterior, el cálculo de una cierta propiedad física F que mediante SPH, se realiza sobre todas las partículas i -ésimas, es de orden N^2 . Si se considera que solo un número n de j -ésimos vecinos son los que contribuyen al cálculo de F para cada partícula i -ésima, entonces se vuelve importante implementar otros métodos de búsqueda de vecinos para reducir el número de operaciones a al menos orden Nn .

Las expresiones 2.13 y 2.14 por tanto, establecen que el valor de la función F con respecto a la partícula i -ésima es aproximado usando el promedio de los valores de la función con respecto a todas las partículas j -ésimas en el dominio de apoyo de la partícula i -ésima, ponderado mediante la función de suavizado o kernel. Por simplicidad se evita poner $\langle\langle F \rangle\rangle$ y se emplea solo la notación $\langle F \rangle$ para referirnos a la discretización final para una función F realizada mediante el método SPH.

Como un ejemplo del uso de la estimación por kernel, supongamos que la función F representa a la densidad ρ . La interpolación nos arroja la siguiente estimación para la densidad en un punto en torno a \vec{x} :

$$\langle \rho(\vec{x}) \rangle = \sum_j m_j W(\vec{x} - \vec{x}_j, h), \quad (2.15)$$

lo cual muestra cómo la masa del conjunto de partículas es suavizada para producir la estimación para la densidad.

Se puede observar a partir de todas las ecuaciones anteriores que la aproximación de partícula convierte las representaciones integrales continuas de una función y sus derivadas en sumas discretizadas basándose en un conjunto arbitrario de partículas. Este uso de sumas de partículas para aproximar las integrales es, de hecho, una aproximación clave que hace que el método SPH funcione, sin necesidad de utilizar una malla de fondo para la integración numérica.

2.3. El Kernel

Aun cuando la idea de usar partículas puede resultar natural, no siempre es posible reconocer con facilidad qué interacciones entre las partículas reproducirán fielmente las ecuaciones de la dinámica de fluidos o la mecánica del continuo. Una forma de hacer lo anterior es derivar las ecuaciones de movimiento usando una técnica de estimación de kernel. El kernel de suavizado o simplemente “kernel” [9, 23, 25] es una función que describe cómo una distribución de densidad está asociada con una partícula de densidad ρ . Formalmente se define a los kernels como funciones del tipo:

$$W_{ij} = W(x_i - x_j, h), \quad (2.16)$$

donde i es la partícula en la que está centrada la función, y j es una partícula dentro del soporte compacto¹ de la función kernel (vease la figura 2.1), controlado éste último por h .

Cuando aplicamos esto a la interpolación, nos arroja un estimado de una función en cualquier punto, usando los valores de la función con respecto a la posición de las partículas. Esta estimación de la función puede ser diferenciada exactamente siempre que el kernel sea diferenciable. De este modo los gradientes requeridos para las ecuaciones de la dinámica de fluidos pueden ser escritos en términos de las propiedades de las partículas.

El kernel tiene las ventajas de poseer soporte compacto, segunda derivada continua y el término de error dominante en la interpolación integrante es de orden de h^2 . Los errores en la aproximación de las integrales interpolantes mediante sumatorias son pequeños siempre que el desorden de las partícula no sea demasiado grande [23].

Un kernel usado comúnmente en la aplicación del método SPH, y que es con el que se ha trabajado en este proyecto, es el kernel *Cubic Spline (CS)* [23], que tiene la forma:

¹Se denomina soporte de una función al conjunto de puntos donde la función no es cero. Se dice que una función tiene soporte compacto si el conjunto donde no es nula conforma un conjunto cerrado y acotado.

$$CS(\vec{r}) = \frac{K^d}{h^d} \begin{cases} [(2-q)^3 - 4(1-q)^3], & \text{para } 0 \leq q \leq 1, \\ [(2-q)^3], & \text{para } 1 \leq q \leq 2, \\ 0, & \text{para } q \geq 2, \end{cases} \quad (2.17)$$

con $q = \frac{|\vec{r}|}{h}$, K es la constante de normalización y d es la dimensión espacial. Para $d = 1, 2, 3$ tenemos que $K^d = 1/6, 5/14\pi$ y $1/4\pi$ respectivamente. El kernel CS , ha sido por mucho, el kernel más usado y analizado en la literatura que involucra al método SPH; esto, dado que se asemeja a una función gaussiana al tiempo que es de soporte compacto. Dada la forma del kernel CS , el radio de alcance con el que para una partícula i -ésima se establecerá a sus n vecinos j -ésimos será de $2h$. Esto se debe a que el kernel CS tiene 3 regiones de influencia con respecto a q , la primera que va de 0 a 1 y es la que más aporta a los valores calculados, la segunda que va de 1 a 2 y que aporta en menor manera, y la tercera que va de 2 en adelante y que no aporta nada a los valores calculados.

Otro kernel usado en la presente tesis, y con el cual se realizaron todas las simulaciones presentadas en esta tesis, es el kernel Quintic Spline [23]. El cual tiene la forma:

$$QS(\vec{r}) = \frac{K^d}{h^d} \begin{cases} [(3-q)^5 - 6(2-q)^5 + 15(1-q)^5], & \text{para } 0 \leq q \leq 1, \\ [(3-q)^5 - 6(2-q)^5], & \text{para } 1 \leq q \leq 2, \\ [(3-q)^5], & \text{para } 2 \leq q \leq 3, \\ 0, & \text{para } q \geq 3, \end{cases} \quad (2.18)$$

Similar al CS , para $d = 1, 2, 3$ tenemos que $K^d = 120, 7/478\pi$ y $3/(359\pi)$ respectivamente.

2.4. Aplicación de SPH a las ecuaciones de Navier-Stokes

Para poder realizar la simulación numérica de la dinámica de fluidos mediante el método SPH, es necesario resolver las ecuaciones gobernantes de dicha dinámica mediante las ecuaciones 2.13 y 2.14.

Aproximación de la densidad: Si se aplica la aproximación SPH directamente a la densidad ρ , tal como se hizo antes, se obtiene la expresión 2.15. Alternativamente, si se aplican las ecuaciones 2.13 y 2.14 a la ecuación de continuidad 1.2, se obtiene:

$$\left\langle \frac{d\rho_i}{dt} \right\rangle = \rho_i \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \vec{v}_{ij}^\beta \frac{\partial W_{ij}}{\partial \vec{x}_i^\beta}, \quad (2.19)$$

donde esta expresión puede ser integrada usando esquemas iterativos comunes, como puede ser el método Runge-Kutta.

Aproximación de la ecuación de momento: Usando ahora las ecuaciones 2.13 y 2.14 sobre la ecuación de momento 1.3, encontramos fácilmente la expresión

$$\left\langle \frac{d\vec{v}_i^\alpha}{dt} \right\rangle = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \vec{x}_i^\alpha} + \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mu_i \varepsilon_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\mu_j \varepsilon_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \vec{x}_i^\beta}, \quad (2.20)$$

donde $\varepsilon_j^{\alpha\beta}$ es la aproximación SPH de la velocidad de deformación del fluido relacionada con las fuerzas viscosas presentes en el mismo, la cual se presenta a detalle en [23].

2.5. Viscosidad Artificial

Existen diversos modelos para tratar la viscosidad en SPH a fin de simular correctamente la dinámica de los fluidos introduciendo las fuerzas disipativas entre las capas de fluido. En este trabajo se presentarán dos de estos modelos, los cuales fueron empleados en diversos casos de estudio. El primero de ellos, el modelo de viscosidad artificial propuesto por Monaghan [9] ha sido ampliamente utilizado en la comunidad de SPH debido a su simplicidad y robustez. Como lo describe Monaghan [30], la viscosidad artificial tiene una relación limitada con las viscosidades reales, pero permite simular las ondas de choque suavizando la onda sobre varias partículas vecinas y, por lo tanto, estabilizar la solución numérica; esto es, de forma natural, SPH está limitado a distribuciones sin choques. Además, la formulación de

viscosidad artificial evita que las partículas se interpenetren, generando un comportamiento no físico del fluido [31, 32]. La penetración a la que nos referimos ocurre porque SPH no requiere que el campo de velocidades sea univaluado. Como consecuencia, dos o más partículas, con diferentes velocidades, pueden ocupar la misma posición. Para los flujos de números Mach bajos con campos de velocidad suaves esto es raramente un problema, pero en los flujos de números Mach altos el problema es severo. En notación SPH, la viscosidad artificial, denotada como Π_{ij} , puede escribirse como,

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{-\alpha \bar{c}_{ij} \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}} & \text{para } \vec{x}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij} < 0 \\ 0 & \text{para } \vec{x}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij} \geq 0 \end{cases}, \quad (2.21)$$

donde

$$\mu_{ij} = \frac{\bar{h}_{ij} \vec{x}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij}}{x_{ij}^2 + \epsilon \bar{h}_{ij}^2}. \quad (2.22)$$

La viscosidad asociada con el parámetro α produce una viscosidad de bulto, mientras que el segundo termino asociado con el parámetro β busca suprimir la interpenetración de partículas a altos números de Mach. El parámetro ϵ se introduce con el fin de prevenir divergencias cuando dos partículas se aproximan una a la otra. Nótese que se ha usado la notación $x_{ij} = x_i - x_j$ y $v_{ij} = v_i - v_j$. El producto $\vec{x}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij}$ por lo tanto detecta qué partículas se están acercando entre sí ($\vec{x}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij} < 0$) y sólo en estos casos la viscosidad artificial se activará. Los amplios estudios numéricos realizados con SPH sugieren los siguientes valores para los parámetros involucrados: $\alpha \approx 1$, $\beta \approx 2$ y $\epsilon \approx 0.01$ [23, 25, 30].

Así, considerando la viscosidad artificial, la ecuación para el momento 1.3 se escribe como

$$\left\langle \frac{d\vec{v}_i}{dt} \right\rangle = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \vec{\nabla}_i W_{ij} + \vec{f}_{ext}. \quad (2.23)$$

Con respecto al segundo modelo para la viscosidad, se utiliza el enfoque desarrollado por Morris en [33], el cual ha demostrado ser también un modelo

robusto para tratar la viscosidad, pero a diferencia del primer caso es ideal cuando se quiere mantener el orden entre las partículas colindantes. Este modelo está descrito por la expresión:

$$\left\{ \left(\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \cdot \mu \vec{\nabla} \right) \vec{v} \right\}_i \approx \sum_{j=1}^N \left(\frac{m_j(\mu_i + \mu_j)}{\rho_i \rho_j} \right) \frac{\vec{x}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_i W_{ij}}{x_{ij}^2} \vec{v}_{ij}, \quad (2.24)$$

donde μ es la viscosidad dinámica ($\mu = \rho\nu$). Cabe destacar que las fuerzas viscosas están alineadas con la velocidad \vec{v}_{ij} en lugar del gradiente del kernel y del desplazamiento \vec{x}_{ij} . Por lo tanto, esta expresión conserva exactamente el momento lineal, pero no el angular que se conserva sólo aproximadamente, ya que las fuerzas viscosas entre las partículas son iguales y opuestas, pero no colineales. Con lo cual, la ecuación de momento para el método SPH tendrá la forma:

$$\left\langle \frac{d\vec{v}_i}{dt} \right\rangle = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right) \vec{\nabla}_i W_{ij} + \sum_{j=1}^N \frac{m_j(\mu_i + \mu_j) \vec{v}_{ij}}{\rho_i \rho_j} \left(\frac{1}{x_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial \vec{x}_i} \right) + \vec{f}_{ext} \quad (2.25)$$

donde \vec{f}_{ext} es la fuerza externa evaluada sobre la partícula i -ésima.

2.6. Condiciones de frontera

Definir e implementar adecuadamente condiciones de frontera en el método SPH, ha sido considerado como una tarea difícil, ya que éstas no aparecen de manera natural en los fundamentos de SPH. A continuación se incluye un breve análisis de los métodos utilizados y evaluados durante el desarrollo de esta tesis.

2.6.1. Condición de frontera de pared sólida

En la literatura se pueden encontrar numerosos enfoques sobre cómo implementar condiciones de frontera de pared sólida, por ejemplo, partículas fantasmas [34, 35], partículas repulsivas [10], partículas dinámicas [36] y semi-analíticas [37]. En los primeros trabajos realizados con SPH, los límites de las paredes sólidas se modelaron como elementos finitos de carácter rígido (partículas restringidas a no moverse y con propiedades de cuerpo sólido), donde el acoplamiento entre las

partículas SPH y las fronteras se rige por un algoritmo que establece la interacción de la partícula de fluido y la superficie, basado en la penalización [10]. Esto es, si las partículas SPH penetraban las fronteras, se aplicaba una fuerza de resorte en la dirección normal de las partículas finitas.

En trabajos posteriores se utilizó el método de partículas dinámicas propuesto por Crespo et al. [36]. Para este método, las partículas de la pared satisfacen las mismas ecuaciones que las partículas de fluido pero son fijadas en el espacio. Así, cuando una partícula de fluido se acerca a una pared fija, la densidad de la partícula aumenta y por la ecuación de estado la presión también aumenta. Debido al término de presión en la ecuación del momento, el aumento de presión resulta en una fuerza repulsiva entre las partículas. Para asegurar una cobertura completa del kernel y que las partículas de fluido no penetran en las fronteras, tres capas de partículas no escalonadas pueblan las fronteras.

2.6.2. Condición de frontera periódica

La frontera periódica es una condición clásica en la mecánica de fluidos. En SPH, se han aplicado distintas variaciones del enfoque periódico a una serie de problemas, por ejemplo, el flujo Couette y Poiseuille [10, 38]. Cuando el dominio de soporte del kernel de la partícula i -ésima es truncado por la presencia de una frontera con condición periódica, entonces la parte del dominio que ha sido truncada, se rellena artificialmente con partículas próximas a la frontera opuesta, las cuales serán ahora vecinas de la partícula i -ésima. Además, si la partícula i -ésima sale del dominio computacional establecido por la mala numérica, se le vuelve a introducir a través de la frontera periódica opuesta.

2.6.3. Condición de la frontera de entrada y salida

Las condiciones de frontera de entrada y salida son, como la condición periódica, fundamentales también en la mecánica de fluidos. El problema no sólo se relaciona con la forma de aplicar tales condiciones, sino también con el manejo eficiente de un número variable de partículas durante la simulación. El enfoque

para tratar la condición de frontera de entrada y salida desarrollado por Federico et al.[39] fue el modelo empleado en esta tesis, el cual está parcialmente basado en el artículo de Lastiwka et al.[40].

Federico et al.[39] definieron cuatro tipos diferentes de partículas: partículas de fluido interno, entrantes, salientes y de pared, acopladas a diferentes zonas. Las partículas de entrada, se distribuyen en una malla regular y se trasladan hacia adelante en el tiempo con valores fijos de, por ejemplo, velocidad. Además, las partículas de entrada afectan a las partículas de fluido, pero no viceversa. Cuando las partículas de entrada entran en el dominio donde se encuentran las partículas de fluido, éstas se convierten en partículas de fluido y evolucionan de acuerdo con las ecuaciones SPH. En el extremo posterior de la zona del fluido se encuentra una zona de salida. En esta zona, las partículas de fluido se convierten en partículas de salida donde las variables físicas se congelan en el tiempo excepto por su posición.

Este método, no arrojó los resultados esperados, tornando inestable la evolución numérica o presentando valores incorrectos. Por lo anterior en los casos que se presentan en el capítulo 4 se optó por usar fronteras periódicas, ampliando el dominio computacional para que el flujo saliente no afectara la evolución numérica.

2.7. Conclusiones del capítulo

En este capítulo se presentó al método SPH, mencionando sus orígenes, actualidad y sus diversas áreas de aplicación. Se realizó una introducción del método, sus características principales y la deducción de las ecuaciones gobernantes de la dinámica de fluidos mediante SPH. Se introdujo la noción de kernel y de longitud de suavizado, las cuales son fundamentales para la comprensión y aplicación del método. Finalmente se presentó el tratamiento para la viscosidad y las condiciones de frontera.

Con esto, se han sentado las bases necesarias para el código numérico desarrollado con SPH, con el cual se simulan ciertos modelos clásicos en dinámica de fluidos computacional, lo cual servirá como prueba de la precisión del código. Previo a ello, en el próximo capítulo se presentará el método LBM, que es la segunda

herramienta numérica con la que se ha desarrollado este trabajo doctoral.

Capítulo 3

Método de Boltzmann en en malla

En el presente capítulo se explica el método de Boltzmann en malla o Lattice Boltzmann (como se le llamará a lo largo de esta tesis) para la simulación de flujos según las ecuaciones de Navier-Stokes. Este método se basa en dos pasos, llamados colisión y propagación que se realizan sobre una malla rectangular. El concepto fundamental del LBM es construir modelos cinéticos simplificados que incorporen la física esencial del proceso microscópico o mesoscópico, de manera que las variables mesoscópicas promediadas obedezcan las ecuaciones macroscópicas deseadas. La premisa básica para usar estos modelos de tipo cinéticos simplificados es que la dinámica macroscópica de un fluido es el resultado del comportamiento colectivo de muchas partículas microscópicas en el sistema, y que la dinámica macroscópica no es sensible más que indirectamente a los detalles subyacentes de la física microscópica [12]. Esta clase de metodología de trabajo se utiliza en diversos campos de la física debido a que es imposible seguir el comportamiento de cada átomo individual de un material. Por estos motivos, es frecuente realizar cálculos promedio multiescala, sustituyendo la estructura discreta de átomos, por una distribución continua de masa y demás variables de interés, como pueden ser la temperatura y la velocidad macroscópica. Los valores de estas variables se calculan como un promedio de conjuntos de partículas en algún volumen.

La dinámica de fluidos computacional es un área activa de investigación dentro de la física computacional, y se ha encarado desde diversos enfoques. Los métodos numéricos clásicos en esta área de la física se fundamentan en discretiza-

ciones de las ecuaciones de Navier-Stokes, por ejemplo [41]. En cambio, el método LBM, se basa en autómatas celulares simples [17, 42] a nivel mesoscópico que reproducen las reglas físicas en el nivel macroscópico.

Por todo lo anterior, LBM es una técnica ideal para simular la dinámica de los fluidos, así como problemas complejos en la física de estos. Comparados con los métodos tradicionales empleados en CFD, LBM es un método fácil de implementar, y permite definir con facilidad condiciones de frontera complicadas o irregulares. A su vez, tiene una alta capacidad para realizar simulaciones computacionales en una amplia variedad de problemas físicos [15, 43, 44], principalmente aplicados en la dinámica de fluidos computacional [45, 46], lo cual ha hecho que en la actualidad tenga una creciente popularidad. Además, LBM representa un enfoque que describe el comportamiento de un fluido a nivel mesoscópico. En este nivel, el flujo se modela mediante el seguimiento de la evolución de distribuciones promedio de partículas microscópicas, este enfoque evita la complejidad de tratar en detalle con la dinámica de un fluido a nivel totalmente microscópico y aún así predecir el comportamiento macroscópico del flujo [47].

A continuación, se presenta una pequeña descripción del método, centrándonos en el caso para un flujo bidimensional (para más detalles ver [12, 13, 14, 15]). Se detallan las ecuaciones del modelo LBM, así como un modelo adicional para aplicar una fuerza de cuerpo¹. Para terminar, se explican a su vez, las diferentes condiciones de frontera que pueden ser utilizadas en las fronteras del dominio.

3.1. Ecuación de Boltzmann

Como el nombre lo sugiere, LBM tiene sus raíces en la teoría cinética de los gases, donde las funciones de distribución, como la distribución de Maxwell–Boltzmann, juegan un papel clave [47].

¹Una fuerza de cuerpo es una fuerza que actúa en todo el volumen de un cuerpo. Fuerzas debidas a la gravedad, campos eléctricos y campos magnéticos son ejemplos de fuerzas de cuerpo. Las fuerzas de cuerpo contrastan con las fuerzas de contacto o las fuerzas superficiales, las cuales, se ejercen sobre la superficie de un objeto. Las fuerzas normales y las fuerzas cortantes que se presentan en los líquidos son fuerzas superficiales que se ejercen sobre la superficie del elemento de fluido.

La ecuación de Boltzmann describe la evolución de la función de distribución $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$ de un ensamble de partículas, y define la probabilidad continua, dependiente del tiempo, de encontrar una partícula de fluido dentro de un pequeño volumen ubicado alrededor de \vec{x} con una velocidad alrededor de \vec{v} en el tiempo t , bajo condiciones de temperatura constante. Cuando no hay fuerzas externas actuando sobre el fluido, la función de distribución evoluciona de acuerdo a la ecuación cinética:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f = \vec{C}(f, f), \quad (3.1)$$

donde el término de colisión $\vec{C}(f, f)$, modela la forma en que la distribución cambia como resultado de la colisión entre pares de partículas. El término $\vec{v} \cdot \vec{\nabla} f$ modela el cambio en la función de distribución como resultado del movimiento de las partículas. Las colisiones entre partículas generan un intercambio de energía y de momento; estos cambios se describen a través de la función de distribución f . La teoría cinética de los gases trata con la evolución en el tiempo de dichas funciones de distribución y las relaciona con las cantidades macroscópicas tales como la densidad del fluido, la presión y la temperatura

El término de colisión en general tiene una forma integral compleja. En muchas aplicaciones de la teoría cinética a la dinámica de fluidos, la integral de colisión se aproxima a formas más simples. Un ejemplo de aproximación es la aproximación BGK (Bhatnagar–Gross–Krook) [48, 49, 50], en la cual se reemplaza el término $\vec{C}(f, f)$ por el término

$$\vec{C}(f, f) = -\frac{1}{\tau}[f(\vec{x}, \vec{v}, t) - f^{eq}(\vec{x}, \vec{v}, t)], \quad (3.2)$$

este operador modela el efecto de la colisión como una fluctuación de la distribución con respecto a una distribución de equilibrio de Maxwell $f^{eq}(\vec{x}, \vec{v}, t)$. El parámetro τ llamado tiempo de relajación, controla la frecuencia con que la función de distribución se relaja para alcanzar el equilibrio, es decir, este tiempo determina la tasa en que las fluctuaciones en el sistema conducen a éste a un estado de equilibrio [51]. La aproximación BGK es conocida como la aproximación de *tiempo de relajación único*, aunque existen otras aproximaciones para el término de colisión,

por ejemplo, la descripción de colisión de *tiempo de relajación múltiple*. En este trabajo doctoral solo se ha empleado la descripción BGK.

3.2. Ecuación discreta de Lattice Boltzmann

El espacio de velocidades en la ecuación de Boltzmann es continuo, esto significa que los elementos de fluido a nivel microscópico son libres de moverse con cualquier velocidad. A fin de discretizar la ecuación de Boltzmann y dar paso al método Lattice Boltzmann, lo primero es discretizar la ecuación 3.1 restringiendo el espacio de velocidades continuo a un conjunto discreto de velocidades \vec{c}_i donde $i = 0, 1, \dots, n_v - 1$ [47]; es decir, ahora la partícula localizada en \vec{x} tiene una de las n_v velocidades \vec{c}_i . La función de distribución $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$ se representa por la función $f_i(\vec{x}, t)$, y así, la ecuación discreta de Boltzmann con término de colisión BGK puede escribirse como

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla} f_i = -\frac{1}{\tau}(f_i + f_i^{eq}). \quad (3.3)$$

En LBM se discretiza la ecuación 3.3 con respecto a las coordenadas espaciales y temporales por medio del método de diferencias finitas, donde el paso de longitud Δx ² y el paso de tiempo Δt se relacionan por medio de $\vec{c}_i = \frac{\Delta x}{\Delta t} \hat{i} + \frac{\Delta y}{\Delta t} \hat{j} + \frac{\Delta z}{\Delta t} \hat{k}$ [12, 42]. Esta discretización asegura que las partículas localizadas en el nodo con posición \vec{x} se muevan en un paso de tiempo Δt a un nodo vecino localizado en $\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t$. La ecuación del Lattice Boltzmann BGK, bajo la aproximación descrita en el apéndice A, está dada por

$$\frac{f_i(\vec{x}, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t)}{\Delta t} + \frac{f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t + \Delta t)}{\Delta t} = -\frac{1}{\tau}(f_i + f_i^{eq}), \quad (3.4)$$

que se reduce a una ecuación de evolución para $f_i(\vec{x}, t)$:

²En general, el intervalo espacial Δx entre dos nodos en la malla numérica de LBM es idéntico en cualquier dirección de la misma; esto es, en tres dimensiones, $\Delta x = \Delta y = \Delta z$. Los detalles sobre cómo determinar el valor de dicho intervalo se presentan en el apéndice C.

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i + f_i^{eq}), \quad (3.5)$$

donde el índice i representa la i -ésima dirección de propagación sobre la malla discreta, \vec{c}_i es la velocidad del flujo, f_i^{eq} la función de distribución de equilibrio y τ el tiempo de relajación para f_i necesario para alcanzar f_i^{eq} ; esto es, el necesario para alcanzar el equilibrio. Este tiempo de relajación τ está vinculado a la viscosidad cinemática macroscópica ν a través de:

$$\nu = \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right) c_s^2 = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{\Delta x^2}{\Delta t}, \quad (3.6)$$

donde $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t}$ es la velocidad del sonido. Esta expresión establece la conexión entre las cantidades macroscópicas y la escala mesoscópica de LBM. Su deducción se obtiene a través de una expansión de Chapman-Enskog tal como se puede ver a detalle en [12, 52].

La ecuación 3.5 establece la discretización de la ecuación de Boltzmann y se le conoce como la ecuación de Lattice Boltzmann (LBE). Esta expresión se puede interpretar de la siguiente forma:

Colisión: A un tiempo t , las partículas en un nodo en \vec{x} colisionan entre sí, y en el proceso, la función de distribución cambia a $f_i^*(\vec{x}, t)$, donde

$$f_i^*(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i + f_i^{eq}). \quad (3.7)$$

Es fundamental señalar que este paso de colisión es totalmente local y no necesita información de los otros nodos. La ecuación 3.7, que viene del término del lado derecho de la ecuación 3.5, describe las colisiones tomando en cuenta la variación del número de partículas que se mueven en cada dirección en la malla debido a las colisiones microscópicas entre partículas.

Propagación: Después de un paso de tiempo, los valores de $f_i(\vec{x}, t)$ se propagan a sus nodos vecinos a lo largo de las velocidades \vec{c}_i ; o visto desde la perspectiva del nodo en \vec{x} , el valor de la función de distribución f_i en dicha posición para un tiempo $t + \Delta t$, se calcula como:

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x} - \vec{c}_i \Delta t, t). \quad (3.8)$$

Así, este paso actualiza la función de distribución f_i en los n nodos para el tiempo $t + \Delta t$, considerando las funciones de distribución f_i^* que se propagan a ellos tras el paso de colisión desde sus respectivos nodos vecinos ubicados en $\vec{x} - \vec{c}_i \Delta t$ en el tiempo t . En la figura 3.1 se muestra un esquema representativo del paso de propagación.

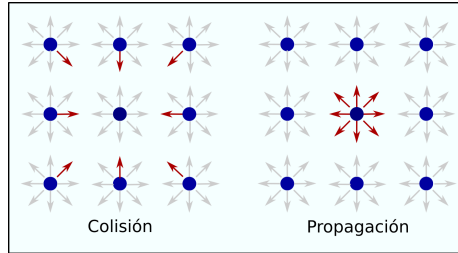


Figura 3.1: Representación de las etapas de Colisión y Propagación para LBM. Durante el proceso de colisión se establecen las funciones de distribución $f_i^*(\vec{x} - \vec{c}_i \Delta t, t)$ para los nodos vecinos al nodo ubicado en \vec{x} . A través de éstas f_i^* se construye la función de distribución f_i del nodo en \vec{x} a un tiempo $t + \Delta t$.

Los cálculos detallados para obtener 3.5 a partir de la ecuación continua de Boltzmann han sido realizados por He y Luo en Ref. [53]. La función de distribución de equilibrio $f_i^{eq}(\vec{x}, t)$ (cuya derivación se puede ver en Ref. [52] y [53]) se utiliza para determinar la velocidad local de los elementos de fluido debido a colisiones y se calcula a través de las variables macroscópicas de modo que la masa, el momento y la energía se conservan para cada nodo y se expresa como:

$$f_i^{eq}(\rho, \vec{v}) = \rho w_i \left(1 + \frac{3}{c^2} \vec{c}_i \cdot \vec{v} + \frac{9}{c^4} (\vec{c}_i \cdot \vec{v})^2 - \frac{3}{2c^2} (\vec{v} \cdot \vec{v}) \right), \quad (3.9)$$

donde ρ es la densidad, \vec{v} la velocidad, $c = \Delta x / \Delta t$, y w_i un factor de peso dado que depende del modelo de malla usado, cuyo cálculo se basa en la cuadratura de Gauss-Hermite, tal como se describe en [52]. Por ejemplo, para una malla tipo D2Q9 [54] (que es la que se empleará en todo este trabajo), se tiene:

$$w_i = \begin{cases} 4/9 & i = 0 \\ 1/9 & i = 1, 3, 5, 7 \\ 1/36 & i = 2, 4, 6, 8 \end{cases} \quad (3.10)$$

La notación $DdQn_v$ es usada frecuentemente para indicar la selección de un conjunto discreto de velocidades en cada punto de la malla, la variable d corresponde a la dimensión espacial donde la simulación ocurre y n_v es el número de velocidades discretas. El modelo D2Q9 es el más usado para problemas en dos dimensiones, no obstante, existen otros cuyos detalles quedan más allá del objetivo de esta tesis.

Las variables macroscópicas de interés en muchas aplicaciones de dinámica de fluidos, tales como la densidad ρ , la presión p y la velocidad \vec{v} se calculan a través de ensambles promedio de la función de distribución $f_i(\vec{x}, t)$. Esto es:

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_i f_i^{eq}, \quad p(\vec{x}, t) = \sum_i f_i^{eq} c_s^2, \quad \vec{v}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_i f_i^{eq} \vec{c}_i, \quad (3.11)$$

La densidad de los elementos del fluido en un nodo en \vec{x} está dada por la suma total de las funciones de distribución en el nodo, mientras que la velocidad del fluido está dada por el promedio de las velocidades \vec{c}_i de la malla pesadas mediante la función de distribución. La presión por su parte, se calcula a partir de una ecuación de estado $p = \rho c_s^2$.

Con esta discretización, los elementos del fluido son considerados como ensambles de partículas que se mueven sobre la malla de nodo a nodo a lo largo de las diferentes direcciones de propagación, con una velocidad específica de propagación \vec{c}_i . En la malla D2Q9 (Figura 3.2) estas velocidades \vec{c}_i a lo largo de las nueve únicas direcciones de propagación toman los siguientes valores:

$$c_i = \begin{cases} (0, 0) & i = 0 \\ (c, 0), (0, c), (-c, 0), (0, -c) & i = 1, 2, 3, 4 \\ (c, c), (-c, c), (-c, -c), (c, -c) & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (3.12)$$

donde $c = \Delta x / \Delta t$.

El conjunto de velocidades discretas en LBM cumple las propiedades de simetría e isotropía en el espacio. La propiedad desimetría indica que el conjunto de velocidades \vec{c}_i es igual al conjunto de velocidades $-\vec{c}_i$. La segunda propiedad, relacionada con la isotropía de la malla, asume que los pesos w_i asociados con la velocidad de la malla \vec{c}_i son los mismos para los nodos con velocidades de la malla

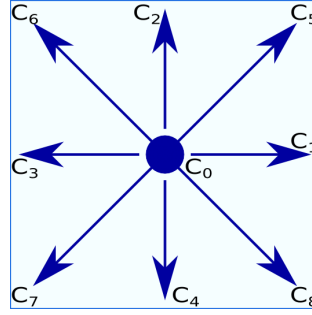


Figura 3.2: Espacio de fase discreto en dos dimensiones (Malla D2Q9).

que tienen la misma magnitud. En conjunto estas propiedades son importantes pues garantizan que no haya ninguna dirección de propagación preferente en los nodos de la malla.

Así, la idea fundamental en LBM es un fluido se puede visualizar como un gran número de pequeños elementos de fluido que se consideran como conjuntos de partículas descritas por una función de distribución f_i y que se mueven bajo ciertas reglas, en nueve distintas direcciones de propagación posibles (para el modelo de la malla D2Q9), donde dicho movimiento se ejecuta sobre los n nodos de una malla rectangular. Una de estas direcciones de propagación representa un nulo movimiento del fluido y las otras ocho representan el movimiento en el plano con ángulos de 45° entre ellas como se muestra en la figura 3.1. En cada uno de los nodos de la malla se calculan las magnitudes físicas que representan al fluido, por ejemplo, la densidad y la presión. Finalmente, el intercambio de momento y energía en el fluido que describe la evolución del sistema, ocurre a través de la propagación y la colisión de las partículas, a través de la ecuación de Lattice Boltzmann.

Es importante señalar que al comparar LBM con respecto a los métodos numéricos que trabajan directamente con la ecuación de Navier-Stokes podemos encontrar el hecho de que en general estos métodos deben resolver ecuaciones diferenciales de segundo orden, mientras que en LBM se resuelven ecuaciones de primer orden. A la par, dichos métodos tratan en general con el término convectivo $\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}$, mientras que LBM trabaja la convección a través de una advección consistente en la propagación de los elementos de fluido a través de los nodos de la malla numérica. Lo que en conjunto le da a LBM un enfoque muy distinto a lo

que usualmente suele emplearse para tratar a las ecuaciones de Navier-Stokes.

Finalmente, entre las desventajas que existen para LBM, se puede mencionar las siguientes: sin alteraciones significativas al método el cual incorpore un mayor número de velocidades y un análisis de estabilidad cuidadoso, el método LBM D2Q9 con término de colisión BGK no es apropiado para simular flujos compresibles o para flujos en los se presente transferencia de calor. Debido a su carácter mesoscópico, se requiere de un alto costo computacional al intentar realizar simulaciones con detalle sobre eventos locales que se produzcan en un flujo.

3.3. Condiciones de frontera

Un punto que falta mencionar es lo que sucede con el fluido en aquellos nodos vecinos en la frontera del dominio físico simulado. Resulta necesario definir una o más reglas de advección (propagación) para dichos nodos durante la etapa de propagación, ya que algunas poblaciones f_i no pueden ser determinadas porque los nodos vecinos correspondientes no son parte del dominio simulado debido a que corresponden a fronteras del sistema o a posibles obstáculos del mismo. Para ello se deben aplicar condiciones que determinen el comportamiento del mismo en estos extremos. Existen distintas técnicas que permiten obtener los valores de estas incógnitas [13], la elección de cuál de éstas usar se basa en la condición de frontera que se desea establecer y las propiedades de cada método para tratar la frontera. A continuación se presentan las técnicas más usuales para el tratamiento de fronteras.

3.3.1. Condiciones de rebote sin deslizamiento

Las condiciones de frontera sin deslizamiento generan un rebote de todas las partículas que llegan a ella. Se implementa siguiendo el esquema full bounce-back [12], en el cual la frontera física se encuentra exactamente sobre el borde de la malla (los nodos que representan a las paredes). La regla básica resultante es muy simple y establece que una partícula que alcanza el borde es revertida inmediatamente hacia el fluido con un momento inverso a aquél con el que fue

proyectada a la frontera sólida, volviendo al mismo en el siguiente paso de tiempo de la simulación. Se calcula posteriormente a la etapa de colisión, afectando el proceso de propagación y puede describirse como:

$$f_i^*(\vec{x}, t) = f_{\tilde{i}}(\vec{x}, t), \quad (3.13)$$

siendo $\tilde{i} = i + 2$ para $i = 1, 2, 5, 6$, e $\tilde{i} = i - 2$ para $i = 3, 4, 7, 8$. Donde la expresión 3.13 reemplaza a la ec. 3.7 para aquellos nodos de la malla en los que se requiera un tratamiento para la interacción del fluido con paredes sólidas.

De esta manera se asegura que la suma de los momentos de las partículas cercanas a la pared es cero. El esquema full bounce-back es un modelo muy simple y estable para simular una frontera sólida, sin embargo esta condición solo logra una aproximación numérica de primer orden. Esto debido a que el elemento de fluido debe propagarse desde un nodo vecino a la frontera hasta la misma en un primer paso de tiempo, y entonces invertir su momento tras la colisión en un segundo paso de tiempo, y solo entonces propagarse de vuelta al mismo nodo vecino con el momento invertido. Dicho de otro modo, el full bounce-back inicia en un paso de tiempo t_k y finaliza en el paso de tiempo $t = t_k + \Delta t$, vease la figura 3.3. Este procedimiento degrada la precisión de LBM que se considera de segundo orden, pasando a ser de primer orden, tal como se detalla en [55].

Existe también el esquema conocido como half bounce-back (HBB) [12] en el cual las partículas rebotan en el punto medio entre el nodo vecino que todavía corresponde al fluido y el nodo sólido; el cual se calcula posteriormente a la etapa de propagación. Este esquema es equivalente al full bounce-back en cuanto a los valores usados para resolver las incógnitas, pero cambia el tiempo en el que se asignan. En el esquema half bounce-back, el elemento de fluido no debe propagarse desde un nodo vecino a la frontera hasta el nodo sólido que la representa, sino que, tras el paso de propagación, el elemento de fluido que habría de propagarse invierte su momento inmediatamente sobre el nodo vecino (nodo fluido), tal como si el elemento se propagase hacia la frontera sólida para “rebotar” a mitad del camino, acabando de nuevo sobre el nodo que representa al elemento de fluido, vease la figura 3.4. Este esquema logra una aproximación de segundo orden de las

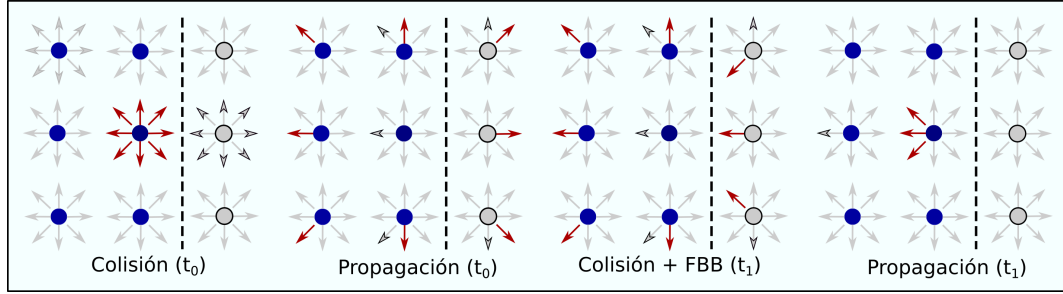


Figura 3.3: Ilustración del Full Bounce Back (FBB) para un nodo i -ésimo cercano a la frontera sólida. En la imagen, la pared sólida se encuentra a la derecha y está representada por nodos (círculos) en color gris con borde negro, mientras que los nodos en color azul representan al fluido. A su vez las flechas rodeando los nodos representan a sus direcciones de propagación. Las flechas en rojo muestran la evolución de los elementos de fluido, enfocándonos en las colisiones y propagaciones que tiene origen en un nodo fluido i -ésimo. Similarmente las flechas con borde negro hacen lo propio teniendo como origen al nodo sólido i -ésimo.

ecuaciones de N-S al evaluar el intercambio de momento con las fronteras sólidas no curvas [56]. Se calcula posteriormente a la etapa de propagación y puede describirse como:

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f_{\tilde{i}}^*(\vec{x}, t), \quad (3.14)$$

siendo \tilde{i} la dirección de propagación opuesta a i . Donde la expresión 3.14 reemplaza a la ec. 3.8 para aquellos nodos de la malla en los que se requiera un tratamiento para la interacción del fluido con paredes sólidas, y se aplica solo a las funciones de distribución faltantes, esto es, a aquellas cuya dirección de propagación i -ésima representan a los elementos de fluido que provienen de la interacción con las paredes sólidas.

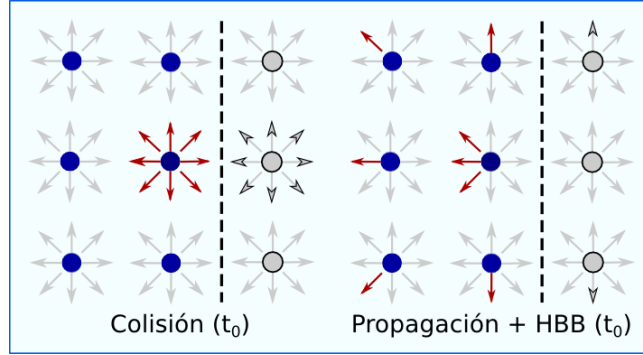


Figura 3.4: Ilustración del Half Bounce Back (HBB) para un nodo i -ésimo cercano a la frontera sólida. En la imagen, la pared sólida se encuentra a la derecha y está representada por nodos (círculos) en color gris con borde negro, mientras que los nodos en color azul representan al fluido. A su vez las flechas rodeando los nodos representan a sus direcciones de propagación. Las flechas en rojo muestran la evolución de los elementos de fluido, enfocándonos en las colisiones y propagaciones que tienen origen en un nodo fluido i -ésimo. Similarmente, las flechas con borde negro hacen lo propio teniendo como origen al nodo sólido i -ésimo.

En el caso del FBB, no es necesario realizar ningún tratamiento especial para las esquinas de los elementos sólidos, dada la naturaleza de su funcionamiento. En cuando a HBB, para el tratamiento para las esquinas, solo es necesario considerar cuales son exactamente las funciones de distribución f_i faltantes.

3.3.2. Condiciones de fronteras periódicas

Las condiciones de frontera periódicas, que son las más sencillas de implementar en LBM, representan la existencia de periodicidad en una o más direcciones del dominio físico. Las condiciones de frontera periódicas se utilizan cuando la geometría física de interés y el patrón esperado del flujo tienen una naturaleza de repetición periódica. Suponiendo un borde periódico de izquierda y derecha en la dirección x , luego de la propagación, se asignan a las poblaciones entrantes las poblaciones salientes opuestas, esto es

$$\begin{aligned}
f_i(0, y) &= f_i(N_x, y), \text{ para } i = 1, 5, 8, \\
f_i(N_x, y) &= f_i(0, y), \text{ para } i = 3, 6, 7,
\end{aligned} \tag{3.15}$$

donde 0 y N_x indican las fronteras del dominio, y la notación simplificada $f_i(x, y)$ indica la distribución de partícula i -ésima en el instante de tiempo t en el nodo de coordenadas (x, y) . En la dirección y se procede de forma análoga, resultando en

$$\begin{aligned}
f_i(x, N_y) &= f_i(x, 0), \text{ para } i = 4, 7, 8, \\
f_i(x, 0) &= f_i(x, N_y), \text{ para } i = 2, 5, 6.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

3.3.3. Condiciones de entrada y salida para la velocidad y presión

En Lattice Boltzman, cuando se desea introducir fronteras de entrada y salida de elementos del fluido, generalmente se debe especificar la velocidad y presión (densidad) del flujo en cada paso de tiempo en dichas fronteras. Para lograrlo utilizamos el método desarrollado por Zou y He en [56], aplicándolo a las fronteras de entrada y salida.

Para establecer condiciones sobre la velocidad o la presión, es necesario determinar las funciones de distribución f_i faltantes en las fronteras, de forma que satisfagan las propiedades macroscópicas deseadas en los casos en que nos encontramos ante una entrada o salida del flujo. Supongamos un caso como ejemplo en que la frontera de entrada está alineada con la dirección x-positiva. Suponiendo que v_y y v_x se especifican en la entrada con $v_y = 0$, faltaría calcular ρ y las funciones de distribución f_1, f_5 y f_8 . Del mismo modo, en el caso en que v_y y ρ se especifiquen en la frontera, con $v_y = 0$, faltaría calcular v_x y las funciones de distribución f_1, f_5 y f_8 . Usando la ecuación 3.11, se puede obtener que para la densidad, se tiene que

$$\rho = \frac{f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)}{1 - v_x}, \tag{3.17}$$

y para la velocidad

$$v_x = 1 - \frac{f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)}{\rho}. \quad (3.18)$$

Luego, usando la regla para el bounce-back para la parte en no-equilibrio de la distribución de partículas, normal a la entrada, encontramos que $f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq}$, de lo cual, fácilmente se puede obtener que

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3}\rho v_x, \quad (3.19)$$

$$f_5 = f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho v_x, \quad (3.20)$$

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}\rho v_x. \quad (3.21)$$

Se debe considerar que en muchos problemas que se deseen simular, se debe dar un tratamiento especial a las distribuciones para todas las esquinas presentes en el dominio físico, principalmente en lo referente a la morfología de los elementos sólidos que han de interactuar con el fluido. Para los casos presentados más adelante, en los que se trabajó con un flujo alrededor de un cilindro, se utilizaron las condiciones de entrada para la velocidad, con el fin de comparar con los estudios numéricos descritos en detalle en [57] y [58]. A su vez, para la frontera de salida en dichos casos, utilizamos el mismo procedimiento, pero considerando una estimación para el valor de \vec{v} sobre los nodos en la frontera mediante una extrapolación de la forma [52, 59]:

$$\vec{v} = \vec{v}(\vec{x}_b) + \frac{1}{2}[\vec{v}(\vec{x}_b) - \vec{v}(\vec{x}_{b-1})], \quad (3.22)$$

donde \vec{x}_b y \vec{x}_{b-1} representan al nodo fronterizo y al siguiente nodo interior que sigue al vector normal hacia el interior de la frontera.

3.4. Implementación computacional

Si consideramos que el objetivo del método Lattice Boltzmann es el simular computacionalmente el comportamiento de un fluido a nivel macroscópico, representando la interacción microscópica entre las partículas del mismo, entonces, podemos emplear este método para realizar las simulaciones numéricas de los

diversos procesos de interés en dinámica de fluidos que se abordan en este trabajo doctoral. Por tanto, se implementó un código numérico bidimensional utilizando el modelo D2Q9 de Lattice Boltzmann bajo la aproximación BGK. El código se escribió en lenguaje de programación fortran 90 y emplea solamente las técnicas desarrolladas para LBM expuestas en esta tesis.

Para realizar una simulación de la dinámica de un fluido, se divide el espacio que se quiere simular en una malla rectangular conformada por una cierta cantidad de nodos, dependiendo del nivel de detalle requerido en los resultados (la resolución de la simulación). Conformando con esto, la malla computacional, sobre la cual se representan las distribuciones de las partículas del fluido en ese volumen/área determinado. A su vez, se establece un algoritmo numérico conformado por una serie de etapas de procesamiento que, a partir de una densidad y una velocidad inicial definidas en cada nodo de la malla, calcula las nuevas distribuciones de partículas en el sistema tomando en cuenta la viscosidad cinemática característica del fluido.

El procedimiento computacional para desarrollar la simulación de la dinámica de un fluido mediante LBM sigue el algoritmo que se presenta a continuación [60]:

Inicio: Se establece la estructura de la malla y se presentan las características físicas del problema y sus condiciones iniciales. Se definen las condiciones iniciales para la densidad ρ y la velocidad \vec{v} .

Equilibrio: Se implementa y se calcula la función de equilibrio $f_i^{eq} = f_i^{eq}(\rho_0(x), v_0(x))$ sobre todos los nodos del fluido a partir de la densidad y la velocidad a partir de la ecuación 3.9.

Colisión: Se calcula la distribución después de la colisión mediante la ecuación 3.7 sobre todos los nodos.

Propagación: Las distribuciones de partículas son adaptadas para propagarse dando un solo paso sobre la malla (hacia los nodos vecinos inmediatos) en la dirección asignada por medio de la ecuación 3.8.

Fronteras: Se realizan todos los cálculos necesarios para actualizar los efectos de las fronteras sobre el fluido.

Variables Macroscópicas: Mediante las funciones de distribución de las partículas se calculan las variables macroscópicas para cada nodo de la malla tal como se describe en la ecuación 3.11, y se repite el procedimiento desde el paso de “equilibrio”.

Respecto a la condición de rebote sin deslizamiento, cuando se emplea el full bounce-back, éste se realiza justo después del paso de “colisión”, debido a que actúa sobre los nodos sólidos, una vez que los elementos de fluido se han propagado hacia ellos; mientras que cuando se emplea el half bounce-back, éste se realiza justo después del paso de “propagación” debido a que los elementos de fluido que se propagan, no deben llegar a los nuevos sólidos.

3.5. Conclusiones del capítulo

Se ha presentado el método numérico LBM, caracterizado por trabajar en una escala mesoscópica. Introduciendo sus orígenes y sus diversas aplicaciones. El método se ha descrito, presentando la construcción del mismo, sus características y su implementación computacional, asimismo, se han introducido las diversas condiciones de frontera aplicables al método. En el Apéndice A se presenta la forma de implementar fuerzas de cuerpo en LBM, y en el Apéndice B se detalla el procedimiento para realizar la conversión de unidades desde la escala macroscópica a la microscópica.

Capítulo 4

Modelos y pruebas

En el presente capítulo se desarrollan varios modelos físicos que usualmente se emplean en CFD para probar la estabilidad, precisión y robustez de los códigos numéricos, los cuales deben ser calibrados mediante procesos de comparación, descartando con ello errores en la implementación de los algoritmos. Llevar a cabo estas pruebas requiere de, ya sea la existencia de una solución exacta del modelo, la existencia de algún estudio experimental o numérico detallado que sirva como prueba de la precisión de los códigos, o bien un estudio de auto convergencia mediante simulaciones numéricas realizadas por el mismo código con diferentes resoluciones. Asimismo, estos modelos y su calibración, sirvieron como un puente natural hacia trabajos mas complejos presentados en capítulos posteriores o bien para futuros trabajos aún en desarrollo.

Se presentan a continuación los resultados para los modelos numéricos del flujo de Poiseuille, flujo de Couette, el flujo en una cavidad y finalmente el flujo alrededor de un disco.

4.1. Flujo de Poiseuille

En dinámica de fluidos no lineales, la ecuación de Hagen-Poiseuille, también conocida como ley o ecuación de Poiseuille, es una ley física que nos permite describir la caída de la presión en un fluido incompresible newtoniano en un flujo laminar que fluye a través de un conducto cilíndrico de sección transversal cons-

tante [61, 62]. A su vez se asume que el diámetro del conducto es despreciable en comparación con el largo del mismo, y que no existe aceleración del fluido dentro del conducto.

En la hidrodinámica clásica, la velocidad de flujo en un punto dentro de un flujo de Poiseuille puede ser obtenida resolviendo la ecuación de momento de Navier-Stokes [2]. Para el flujo de Poiseuille en dos dimensiones, Morris et al. [33] proveen una solución analítica para el comportamiento dependiente del tiempo dada por:

$$v_x(y, t) = \frac{F}{2\nu}y(y-L) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4FL^2}{\nu\pi^3(2N+1)^3} \sin\left(\frac{\pi y}{L}(2n+1)\right) \exp\left(-\frac{(2n+1)^2\pi^2\nu}{L^2}t\right), \quad (4.1)$$

donde el primer término del lado derecho representa la solución estacionaria del flujo de Poiseuille en 2D y los términos restantes están relacionados con el carácter transitorio que presenta el flujo. Como prueba para los cálculos del método SPH referentes a fluidos viscosos, se ha realizado una simulación en dos dimensiones del flujo de Poiseuille; esto es, la simulación de un flujo entre dos placas paralelas, las cuales por simplicidad se considerarán infinitas. El flujo de Poiseuille nos refiere entonces a un flujo entre dos placas estacionarias paralelas e infinitas alojadas sobre $y = 0$ y $y = l$, donde l representaría al diámetro del tubo dos dimensional. El fluido estacionario inicial es empujado por una fuerza de cuerpo \vec{F} (por ejemplo la diferencia de presiones o alguna fuerza externa), y gradualmente fluye entre las dos placas en un proceso transitorio, hasta que finalmente alcanza su estado estacionario.

Para esta simulación se tomaron los siguientes valores de referencia: $l = 1 \times 10^{-3}$ m, $\rho = 1 \times 10^3$ kg/m³, la viscosidad cinemática $\nu = 1 \times 10^{-6}$ m²/s, y la fuerza de cuerpo $\vec{F} = F\hat{i}$, con $F = 2 \times 10^{-4}$ m/s². De acuerdo a la solución estacionaria para el flujo de Poiseuille [33, 2], el máximo en la velocidad del fluido es $v_0 = 2.5 \times 10^{-5}$ m/s, lo cual corresponde a un número de Reynolds de $Re = 2.5 \times 10^{-2}$, de acuerdo a la siguiente expresión:

$$Re = \frac{v_0 l}{\nu}. \quad (4.2)$$

El número de Reynolds (Re) es una cantidad adimensional que se usa para ayudar a predecir patrones de flujo similares en diferentes situaciones de la dinámica de los fluidos. Es común expresar su significado físico como la relación entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas.

Igual a lo hecho por Liu [23], el dominio del problema está dado por una caja rectangular de 0.0005m sobre el eje x con un total de 20 partículas en SPH (que representan elementos macroscópicos) o nodos en LBM (representando elementos mesoscópicos), por 0.001m sobre el eje y con un total de 40 partículas o nodos, lo cual nos arroja un sistema de 20x40 elementos en total¹. A su vez, se ha considerado que el flujo del sistema avanza a lo largo del eje x , y que el eje y es por tanto la dirección perpendicular al flujo.

4.1.1. Implementación con SPH

En este tipo de simulaciones en SPH, donde se presentan flujos incompresibles, suele ser útil usar una herramienta numérica que se aplica al método SPH denominada “XSPH”, la cual fue propuesta por Monagan [9, 31]. Al usar XSPH, las partículas se mueven de la siguiente forma:

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i - \varepsilon \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{v}_{ij} W_{ij}, \quad (4.3)$$

donde ε es una constante en el rango de $0 \leq \varepsilon \leq 1.0$. Este término ayuda a mantener un orden en el desplazamiento de las partículas, lo que implica que mantendrán un número adecuado de partículas dentro del dominio de soporte de kernel.

Para trabajar las condiciones de frontera con las paredes sólidas se empleó el método implementado por Crespo et al. [36], el cual se describe brevemente en la sección 2.6.1, y que a su vez, guarda grandes similitudes con el método implementado por Morris en [33]. Cabe señalar que inicialmente en el desarrollo de este trabajo doctoral, se probaron distintos métodos para tratar con las paredes sólidas y que se probaron justamente con la solución exacta del flujo de Poiseuille,

¹Para ésta simulación se han estudiado otros casos con distintas configuraciones de partículas o nodos, encontrando siempre resultados similares.

obteniendo resultados que permitieron elegir de forma adecuada que modelo era el que más se adaptaba a los requerimientos de cada problema.

La evolución temporal del sistema se ha realizado empleando como integrador al método de Runge-Kutta de cuarto orden, donde el paso de tiempo se ha fijado como 1×10^{-4} s; a fin de comparar con los resultados mostrados en [23], con lo cual, después de un aproximado de al menos 6000 iteraciones ($t = 0.6$), el sistema alcanza el estado estacionario.

4.1.2. Implementación con LBM

Para implementar el flujo de Poiseuille con LBM se usaron condiciones de frontera periódicas en la entrada y salida del flujo (vease la sección 3.3.2), así mismo, se usó el modelo full bounce-back para el tratamiento de la interacción sólido-fluido que se presenta en las fronteras sólidas del dominio computacional, y que se describe en la sección 3.3.1. A su vez, se empleó una fuerza de cuerpo para simular la diferencia de presiones, que es el factor que genera el movimiento en el fluido, la cual se describe en el apéndice B. Finalmente, siguiendo el apéndice C, se estableció un paso de tiempo adecuado usando un tiempo de relajación $\tau = 1.0$ para la evolución numérica, la cual se completó tras realizar al menos 6000 iteraciones ($t = 0.6$), momento en el que, ya se ha alcanzado el estado estacionario. El valor del tiempo de relajación se impuso a fin de mantener la estabilidad al usar FBB en conjunto con una fuerza de cuerpo.

4.1.3. Simulaciones y resultados

Para probar las capacidades de los códigos tanto LBM como SPH al simular un flujo de Poiseuille en 2D con diferentes valores del número de Reynolds, se estudiaron los casos a $Re = 0.025, 1, 100, 500$ y 1000 . Con ello se buscó probar sus capacidades para manejar tanto flujos a muy bajos Re , como a valores considerablemente altos.

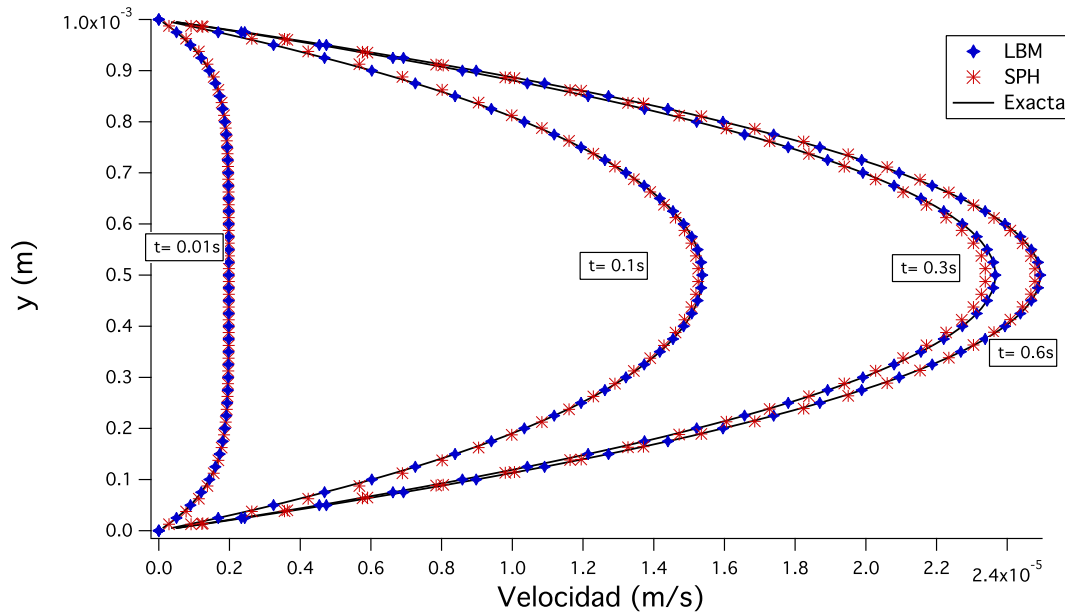


Figura 4.1: Perfil de velocidades para el flujo de Poiseuille para un $Re = 0.025$. Se presentan y comparan los resultados para la solución transitoria y la solución estacionaria ($t = \infty$) para LBM y SPH, con respecto a la solución exacta. Para este valor del Re , la solución estacionaria se alcanza aproximadamente a partir de 0.6s.

La figura 4.1 muestra el perfil resultante para la componente x del campo de velocidades, obtenido de las simulaciones numéricas del flujo de Poiseuille a $Re = 0.025$ para diferentes tiempos, incluyendo la solución para el estado estacionario que en este caso se alcanza a $t = 0.6$ s. En la figura se observa cómo el sistema inicialmente sólo se ve afectado por la viscosidad en aquellos elementos del fluido que son cercanos a las fronteras sólidas, reduciendo con ello considerable su velocidad con respecto a los elementos más alejados de las fronteras.

Una vez que el sistema va evolucionando en el tiempo, la fricción entre las capas de fluido va acrecentando el efecto de frenado, que es producido por el principio de no deslizamiento que se ejerce sobre aquellos elementos del fluido que están en contacto con un sólido; con ello, el estado transitorio va dando paso al estado estacionario del sistema; lo cual se observa en la figura 4.1 al comparar el comportamiento del perfil de velocidades.

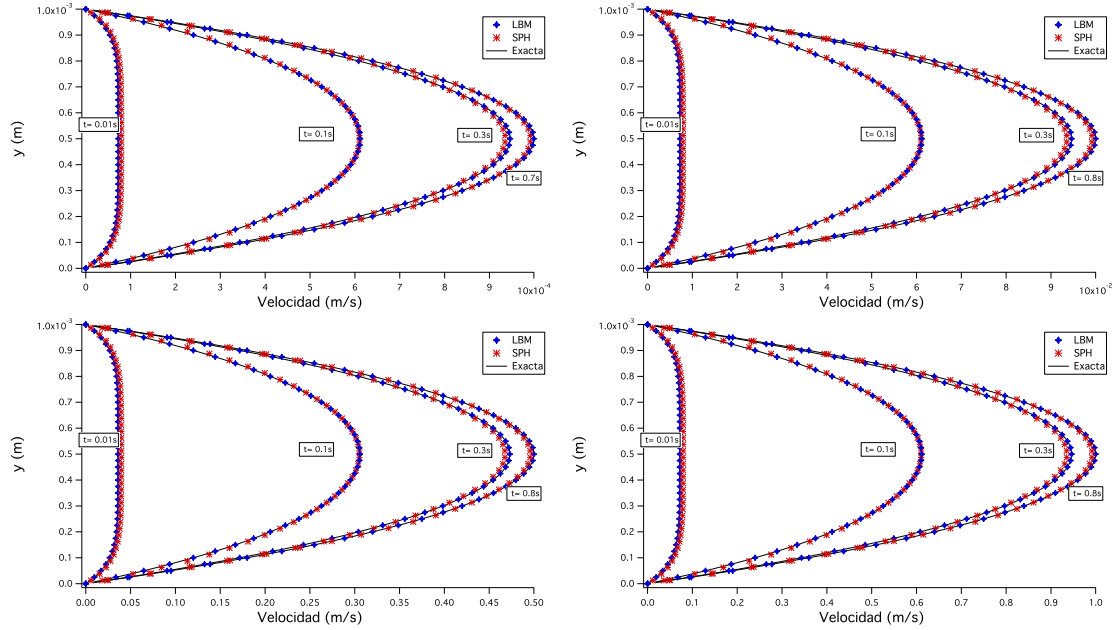


Figura 4.2: Perfiles de velocidad para el flujo de Poiseuille para un $Re = 1$ (arriba izquierda), 100 (arriba derecha), 500 (abajo izquierda) y 1000 (abajo derecha). Se presentan y comparan los resultados para la solución transitoria y la solución estacionaria ($t = \infty$) para LBM y SPH, con respecto a la solución exacta. El tiempo aproximado en el que el estado estacionario se alcanza varía según el valor del Re .

En la figura 4.2 se observan los resultados obtenidos para las simulaciones del flujo de Poiseuille a valores del número de Reynolds de 1, 100, 500 y 1000; tanto para sus soluciones transitorias como para el régimen estacionario. Al analizar estos resultados y comparar lo obtenido para los métodos SPH y LBM, se puede observar un comportamiento similar en ambos casos, con resultados que están en estrecha concordancia con la solución analítica, mostrando tal como se espera, que el fluido se encuentra en un régimen laminar; esto es, aunque se incrementen las magnitudes del campo de velocidades para valores mayores del número de Reynolds, el perfil parabólico característico de un flujo de Poiseuille se observa en todas las simulaciones. Para SPH, la mayor discrepancia obtenida para el error entre la solución numérica y la solución exacta en el estado estacionario está por debajo del 0.6% a $Re = 0.025$, incrementándose hasta un valor que se ubicó por debajo del 0.8% para $Re = 1000$. Para LBM, el error más alto con respecto a la solución

exacta fue de apenas 0.024 % para valores de $Re = 0.025$, y de aproximadamente un 0.02 % para el resto de los casos; lo cual se presenta a detalle en la tabla 4.1. Dichos resultados se deben a que la fortaleza de LBM está en la interacción sólido-fluido, y por ello muestra gran precisión al tratar la interacción con las fronteras sólidas; por su parte, SPH tiene grandes dificultades en dicho tratamiento. Ha de notarse que en ambos casos se está considerando respectivamente, modelos muy comunes para el tratamiento de las fronteras sólidas.

Error porcentual para v_x		
Re	SPH	LBM
2.5×10^{-2}	0.57 %	0.024 %
1	0.61 %	0.020 %
100	0.63 %	0.020 %
500	0.66 %	0.020 %
1000	0.76 %	0.021 %

Tabla 4.1: Máximo valor obtenido para el error porcentual de la componente x del campo de velocidades del flujo, medido para el caso en el que el flujo ha alcanzado el estado estacionario. Se observa que para LBM el error porcentual fue en general muy pequeño, manteniéndose aproximadamente en 0.02 %. Para SPH el error aumenta conforme aumenta el Re , llegando a valores por arriba de 0.75 %.

Los casos presentados demuestran la capacidad de ambos métodos para simular un flujo de Poiseuille en un intervalo del número de Reynolds de 0.025 hasta 1000; lo cual implica que los códigos pueden trabajar bien con flujos incompresibles newtonianos que están confinados en tubos dos dimensionales y que fluyen a bajos Re . A su vez, se probó que ambos códigos trabajan bien cuando el fluido se desplaza debido al efecto de una fuerza de cuerpo que se ejerce uniformemente. A valores mayores el código con LBM se mantiene estable y sigue mostrando una alta precisión en sus resultados, mientras que para SPH las simulaciones pierden precisión conforme incrementamos el Re debido a que las condiciones de frontera no logran capturar de forma correcta la interacción sólido-fluido que se presenta en las paredes del tubo, motivo por el cual la comparación ya no es viable por arriba

de $Re=1000$.

4.2. Flujo de Couette

En dinámica de fluidos, el flujo de Couette se refiere al flujo laminar confinado que es caracterizado por un fluido viscoso el cual fluye a través del espacio entre dos planos paralelos (paredes sólidas). Uno de estos planos se encuentra en movimiento relativo con respecto al otro. El flujo es entonces conducido por la fuerza de arrastre que actúa sobre éste y al gradiente de presión aplicado entre las dos placas [63, 64].

La configuración más simple para el flujo de Couette implica considerar dos planos infinitos, paralelos y separados por una distancia h . Uno de estos planos, el superior por ejemplo, se traslada a una velocidad constante v_0 sobre su mismo plano coordenado.

En la hidrodinámica clásica, la velocidad del fluido en un punto dentro de un flujo de Couette puede ser obtenida resolviendo la ecuación de momento de Navier-Stokes [2]. Para el flujo de Couette en 2d, Morris et al. [33] proveen una solución analítica para el comportamiento dependiente del tiempo dada por:

$$v_x(y, t) = \frac{V_0}{L}y + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2V_0}{n\pi} (-1)^n \sin\left(\frac{n\pi}{L}y\right) \exp\left(-\nu \frac{n^2\pi^2}{L^2}t\right), \quad (4.4)$$

donde el primer término del lado derecho representa la solución estacionaria en 2D y los términos restantes están relacionados con el carácter transitorio que presenta el flujo.

4.2.1. Implementación numérica

Como prueba para los cálculos del método SPH referentes a fluidos viscosos y fuerzas de arrastre, se ha realizado una simulación en dos dimensiones del flujo de Couette. Las ecuaciones gobernantes del sistema, la configuración inicial, las condiciones de frontera y las herramientas necesarias para el desarrollo de la simulación, son las mismas que se emplearon para el caso del flujo de Poiseuille. Para esta simulación se tomaron los siguientes valores de referencia: $l = 1 \times 10^{-3}$

m, $\rho = 1 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, la viscosidad cinemática $\nu = 1 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, y la velocidad de la placa superior en un rango de $V_0 = 2.5 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ hasta $V_0 = 1.0 \text{ m/s}$. De acuerdo a la solución estacionaria para el flujo de Couette [33, 65], si el máximo en la velocidad del fluido es $v_0 = 2.5 \times 10^{-5} \text{ m/s}$, corresponde a un número de Reynolds de $Re = 2.5 \times 10^{-2}$.

Igual al caso anterior, el dominio del problema está dado por una caja rectangular de 0.0005 m sobre el eje x con un total de 20 elementos (nodos o partículas) \times 0.001 m sobre el eje y con un total de 40 elementos. Considerando de nuevo que el flujo del sistema avanza a lo largo del eje x , y que el eje y es por tanto la dirección perpendicular al flujo.

4.2.2. Simulaciones y resultados

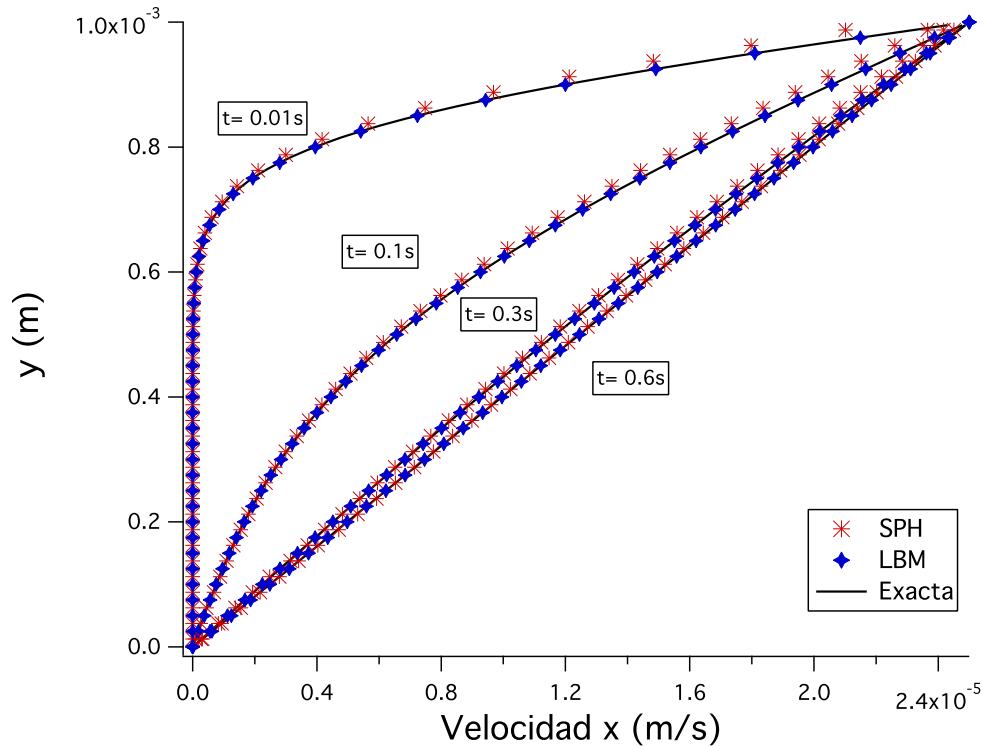


Figura 4.3: Perfil de velocidades para el flujo de Couette para un $Re = 0.025$. Se presentan y comparan los resultados para la solución transitoria y la solución estacionaria ($t = \infty$) para LBM y SPH, con respecto a la solución exacta. Para este valor del Re , la solución estacionaria se alcanza aproximadamente a partir de los 0.6s.

Al igual que para el modelo para el flujo de Poiseuille, a fin de probar las capacidades de los códigos (LBM y SPH), para realizar las simulaciones de un flujo de Couette en 2D con diferentes valores del Re , se estudiaron los casos con $Re = 0.025, 1, 100, 500$ y 1000 . Con ello se buscó probar sus capacidades para manejar tanto flujos a muy bajos Re , como a valores considerablemente altos.

La figura 4.3 muestra el perfil de soluciones para la componente x del campo de velocidades en el flujo de Couette a $Re = 0.025$, obtenidas usando SPH y LBM para diferentes tiempos, incluyendo la solución para el estado estacionario que en este caso se alcanza a $t = 0.6s$. Similar al flujo de Poiseuille, en la misma figura se puede ver cómo el fluido inicialmente sólo se ve afectado por la viscosidad en su desplazamiento en los elementos que están mas cercanos a las fronteras sólidas; esto es, los elementos de fluido más cercanos a la pared superior (la cual está en movimiento) se ven afectados por su movimiento debido al esfuerzo cortante que se ejerce sobre las capas de fluido fronterizas, generando con ello un desplazamiento en la misma dirección del desplazamiento de la pared. A su vez, los elementos de fluido más cercanos a la pared sólida inferior se mantienen relativamente en su posición debido al principio de no deslizamiento. De este modo, el sistema va pasando del estado transitorio en el que cada vez más elementos del fluido se ven afectados por el movimiento de la pared superior, hasta alcanzar el estado estacionario del sistema, lo cual se da aproximadamente a partir de $t = 0.6s$.

En la figura 4.4 se observan los resultados obtenidos para las simulaciones del flujo de Couette para valores de $1, 100, 500$ y 1000 en el Re ; tanto para sus soluciones transitorias como para el régimen estacionario, el cual se alcanza en los primeros dos casos alrededor de $t = 0.6s$, mientras que en los otros casos se alcanza a partir de 0.7 y $0.8s$. Al analizar estos resultados y comparar lo obtenido para los métodos SPH y LBM, se puede observar un comportamiento similar en ambos casos, con resultados que están en estrecha concordancia con la solución analítica. Para SPH, la mayor discrepancia obtenida para el error entre la solución numérica y la solución exacta en el estado estacionario está por debajo del 0.75% a $Re = 0.025$, incrementándose hasta un valor que se ubicó por debajo del 1% para $Re = 1000$. Por otro lado, para LBM, el error más alto con respecto a la

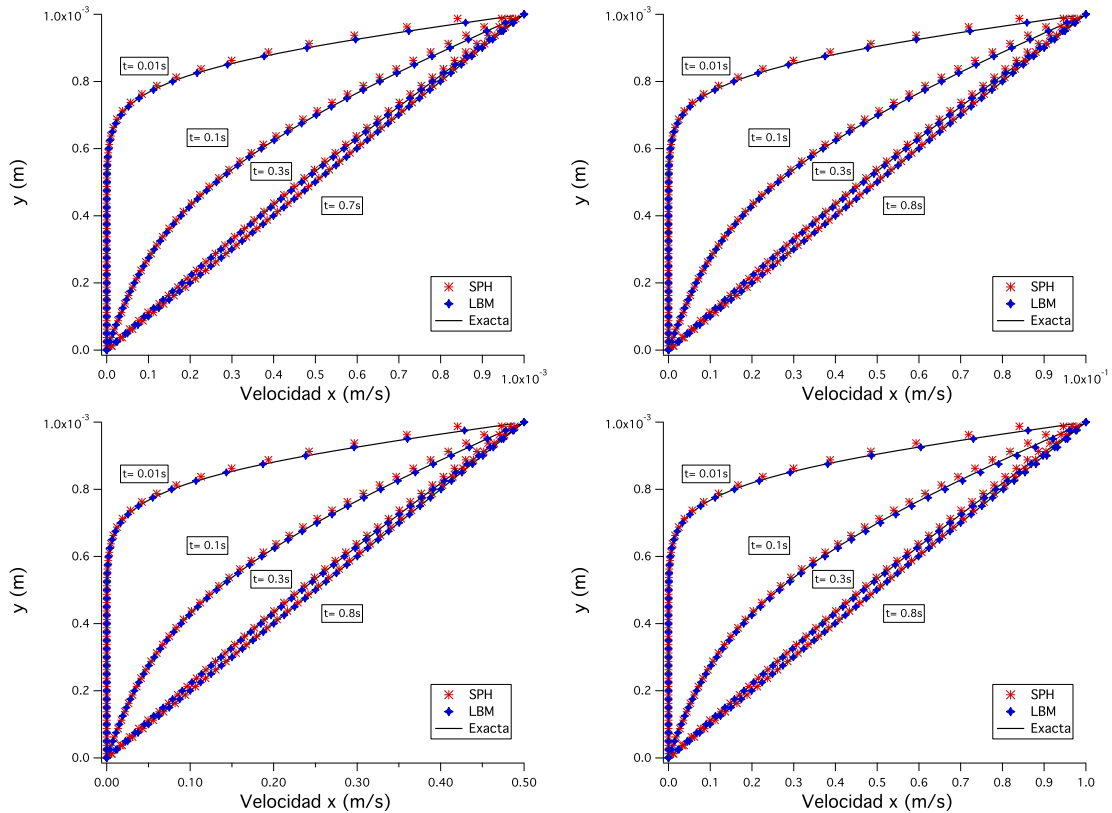


Figura 4.4: Perfiles de velocidad para el flujo de Couette para un $Re = 1$ (arriba izquierda), 100 (arriba derecha), 500 (abajo izquierda) y 1000 (abajo derecha). Se presentan y comparan los resultados para la solución transitoria y la solución estacionaria ($t = \infty$) para LBM y SPH, con respecto a la solución exacta. El tiempo aproximado en el que el estado estacionario se alcanza varía según el valor del Re .

solución exacta es de apenas 0.019% para valores de $Re = 0.025$, valor que se fue incrementando ligeramente conforme se incrementaba el valor del Re , alcanzando un error del 0.04% para Re 500; aunque, para Re 1000, se obtuvo un considerable incremento en el error alcanzando hasta un 0.29%, lo cual se debe a que ante el incremento en la velocidad, es necesario incrementar la resolución en el espacio o el tiempo a fin de capturar mejor la interacción de los elementos de fluido y las paredes sólidas, lo cual no fue posible de realizar debido a la falta de poder de cómputo y a que el código no está paralelizado, y por tanto realizarlas implicaría un tiempo de cómputo demasiado extenso. todos estos resultados se presentan a detalle en la tabla 4.2.

Error porcentual para v_x		
Re	SPH	LBM
2.5×10^{-2}	0.71 %	0.019 %
1	0.75 %	0.019 %
100	0.81 %	0.032 %
500	0.89 %	0.039 %
1000	1.01 %	0.290 %

Tabla 4.2: Máximo valor obtenido para el error porcentual de la componente x del campo de velocidades del flujo, medido para el caso en el que el flujo ha alcanzado el estado estacionario. Se observa que para LBM el error porcentual fue en general muy pequeño, manteniéndose aproximadamente en 0.02 %, salvo para Re 1000 donde se obtuvo un error considerablemente mayor. Para SPH el error aumenta conforme aumenta el Re , llegando a valores por arriba de 1 %.

En este caso de nuevo se observa una alta precisión para LBM, sobre todo cuando se trata de los valores calculados sobre los elementos más cercanos a las paredes sólidas. No obstante, para los elementos centrales, al no estar ya en presencia de una fuerza de cuerpo, como es el caso del flujo de Poiseuille, fue claro que el método pierde precisión al tener que propagar el efecto de la fuerza de arrastre a través del flujo interno; esto es, el error se incrementa lejos de las fronteras sólidas, lo cual se observa en las figuras 4.3 y 4.4 notando que el perfil de velocidades para LBM muestra su mayor diferencia con respecto a la solución exacta en torno a $y=0.5m$. De nuevo, SPH muestra grandes dificultades en el tratamiento de las paredes sólidas y es por ello que el error es más alto en dichas zonas.

Los casos presentados demuestran la capacidad de ambos métodos para simular un flujo de Couette en un intervalo del número de Reynolds de 0.025 hasta 1000; lo cual implica que los códigos pueden trabajar bien con flujos incompresibles newtonianos que están confinados en tubos dos dimensionales y que fluyen a bajos Re . A su vez, se probó que ambos códigos trabajan bien cuando el flujo es impulsado por una pared móvil mediante el cizallamiento que se produce entre las capas de fluido. A valores mayores del Re , el código con LBM se mantiene estable

y sigue mostrando una alta precisión en sus resultados, mientras que para SPH las simulaciones se tornan inestables conforme incrementamos el Re , motivo por el cual la comparación ya no es viable por arriba de $Re = 1000$.

4.3. Flujo en una cavidad impulsado por una pared en movimiento

El problema clásico del flujo impulsado dentro de una cavidad [66, 67, 68] consiste en un cierto fluido, el cual fluye dentro de una cavidad cuadrada cerrada, y que es impulsado por el movimiento de la tapa superior de la cavidad a una velocidad constante V_{top} , mientras las otras tapas permanecen estacionarias. Este problema es un caso particular de flujo interno en el cual todas las fronteras son sólidas, y el sistema está representado por un fluido incomprensible viscoso newtoniano; el cual a su vez es impulsado por una sección de la frontera que lo contiene (véase la figura 4.5).

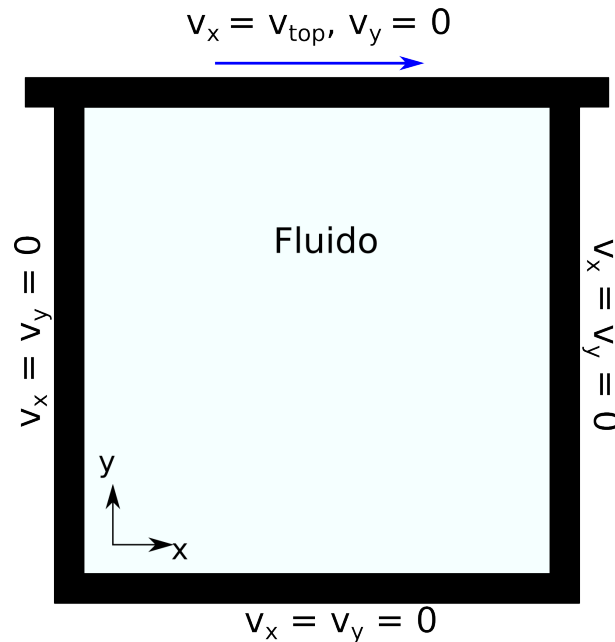


Figura 4.5: Esquema del flujo en una cavidad cuadrangular impulsado por una pared en movimiento. Se ha considerado a las tapas inferior izquierda y derecha estáticas, mientras que la tapa superior se desplaza a una velocidad v_{top} en la dirección x positiva.

Para este estudio la aceleración gravitacional se descarta, dado que se desea comparar los resultados contra la solución exacta para el caso en el que la única fuerza de arrastre que se ejerce sobre el fluido se debe al desplazamiento de la pared superior. En cierto momento, tras iniciar el movimiento de la tapa superior de la cavidad, el flujo alcanzará un estado estacionario, y formará un patrón de recirculación.

Este problema es muy recurrido para poner a prueba códigos numéricos para la simulación de fenómenos de la dinámica de fluidos. Su importancia radica en que el sistema dos dimensional representa a un flujo impulsado por una fuerza de arrastre debida al movimiento constante de la tapa superior. En consecuencia, el flujo se ve sometido al esfuerzo cortante entre las capas del fluido, generando que su desplazamiento sea dos dimensional y provocando con ello la presencia de vorticidad (rotación de los elementos de fluido).

4.3.1. Implementación numérica

Como prueba para los cálculos del método SPH y LBM, referentes a fluidos viscosos y esfuerzos cortantes, se ha realizado una simulación numérica en dos dimensiones del flujo en una cavidad impulsado por una pared en movimiento. Para esta simulación se tomaron los siguientes valores de referencia: el largo de las caras de la cavidad es de $l = 1.0\text{m}$, la densidad $\rho = 1.0\text{kg/m}^3$ y la velocidad de la tapa superior $V_{top} = 1.0 \text{ m/s}$. Aunado a ello, para variar el umbral de valores del Re a analizar, fijadas la V_{top} y l , se varió solo la viscosidad cinemática del fluido ν con un rango de valores de $1 \times 10^{-1} \text{ m}^2/\text{s}$ a $1 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$. Con ello, para este estudio, se realizaron simulaciones tanto en SPH como en LBM para valores del Re de 10, 100 y 400; a su vez para LBM se realizó un último estudio para un Re 1000. Para todas estas simulaciones se empleó una malla inicial de 160x160 elementos, salvo en el caso con LBM para Re 1000, en la cual se usó una malla de 320x320 elementos.

Para ambos métodos, al inicio de las simulaciones, las velocidades de todos los elementos del fluido son inicializadas a cero, salvo en la tapa superior, tal como se muestra en la figura 4.5. El tiempo físico necesario para que las simulaciones

alcancen el estado estacionario depende del Re , y para las simulaciones realizadas varía entre 3s y 300s considerando que los valores de los parámetros relevantes del flujo medidos sobre las rectas ubicadas en $x = 0.5\text{m}$ y $y = 0.5\text{m}$ (como son el campo de velocidades y la densidad del flujo) no varíen en más de 1×10^{-12} en el intervalo comprendido entre un tiempo t a un tiempo $t + \Delta t$.

En la implementación con el método SPH se usó el tratamiento para las fronteras sólidas propuesto por [36], considerando una ligera modificación a fin de tratar el hecho de que la pared sólida se esté desplazando. A su vez, esto no impide que las partículas libres se escapen del dominio computacional por lo que es necesario incluir una mayor densidad de partículas para representar a las paredes sólidas; por tanto las paredes de partículas sólidas están conformadas por 320 elementos de la malla en vez de solo 160. Para tratar la viscosidad se empleó el tratamiento descrito por Morris en [33], y que se presenta en la sección 2.5.

Para la implementación con LBM, se aplicó la condición de frontera HBB para el tratamiento de las paredes sólidas (véase la sección 3.3.1); a su vez, a fin de tratar con la pared móvil, se empleó el tratamiento descrito en la sección 3.3.3 para el caso en el que la velocidad de los elementos fronterizos es perpendicular a la dirección de entrada. Esto es, incorporando y acoplando ambos tratamientos, se puede tener un conjunto de elementos de entrada sobre la tapa superior del dominio computacional, que se mueven en la dirección x-positiva y que son tratados como elementos sólidos. Para todas las simulaciones se aplicó un tiempo de relajación $\tau = 0.65$, el cual se elige considerando tener una alta resolución temporal en la simulación numérica, en base a lo descrito en el apéndice C, y asumiendo que al usar HBB para valores del parámetro $\tau < 0.65$, la simulación se tornaría inestable o bien arrojaría un comportamiento no esperado.

4.3.2. Simulaciones y resultados

Para probar las capacidades de los códigos tanto LBM como SPH al simular un flujo dentro de una cavidad debido a una pared móvil a diferentes valores del número de Reynolds, se estudiaron los casos a $Re = 10, 100, 400$ y 1000 ; todos ellos contrastados con los estudios de Ghia [69] y Marchi [70], los cuales son considerados

como una prueba de la precisión para los códigos que intentan emular este tipo de flujos. Con ello se busca probar las capacidades de los códigos desarrollados para manejar tanto flujos a muy bajos Re , como a valores considerablemente altos. Resaltando que estas pruebas contra las que se busca comparar, fueron realizadas con mallas más finas (1024 x1024 nodos en el caso de Marchi) y con un tiempo de evolución considerablemente más largo; de hasta 5000s en el caso para Re 1000, contra sólo 300s en el presente estudio. Las simulaciones desarrolladas en esta tesis se vieron limitadas por la falta de un proceso de paralelización de los códigos, motivo por el cual, no fue posible llevar a cabo este estudio con el mismo nivel de resolución que los realizados en los trabajos de Ghia y Marchi, dado que implicaría un tiempo de cómputo demasiado extenso. No obstante, tal como se verá más adelante, al menos para LBM, esto no es un impedimento para la obtención de resultados aceptables.

En la figura 4.6 se observan los resultados obtenidos para las simulaciones a valores de la magnitud y líneas de contorno de la componente z de la vorticidad² para números de Reynolds de 10, 100 y 400; tanto para SPH como para LBM. Se observa la presencia de un vórtice dentro de la cavidad, el cual se va haciendo más claro y se localiza más al centro de la cavidad conforme el Re es mayor. Similarmente, en la figura 4.7 se observan las líneas de corriente resultantes de las simulaciones realizadas para números de Reynolds de 10, 100 y 400; tanto para SPH como para LBM. Se puede observar de nuevo la presencia de al menos un vórtice dentro de la cavidad. A su vez, se pueden observar otros vórtices en las esquinas de la cavidad.

Al analizar estos resultados y comparar lo obtenido con ambos métodos, se puede observar un comportamiento similar en ambos casos a bajos Re , mostrando tal como se espera, que las capas del fluido dentro de la cavidad son arrastradas por el movimiento de la tapa superior, provocando que los elementos de fluido más cercanos a la pared superior empiecen a desplazarse hasta “chocar” con la tapa

²La vorticidad de un flujo se define mediante la expresión $\vec{\omega} = \vec{\nabla} \times \vec{v}$. En la mecánica del continuo, se le define como un campo vectorial que describe el movimiento local de rotación de un medio continuo (como es el caso de un fluido) cerca de algún punto, como sería visto por un observador ubicado en ese punto y que esté viajando junto con el flujo; lo cual indica la tendencia de ese flujo a rotar.

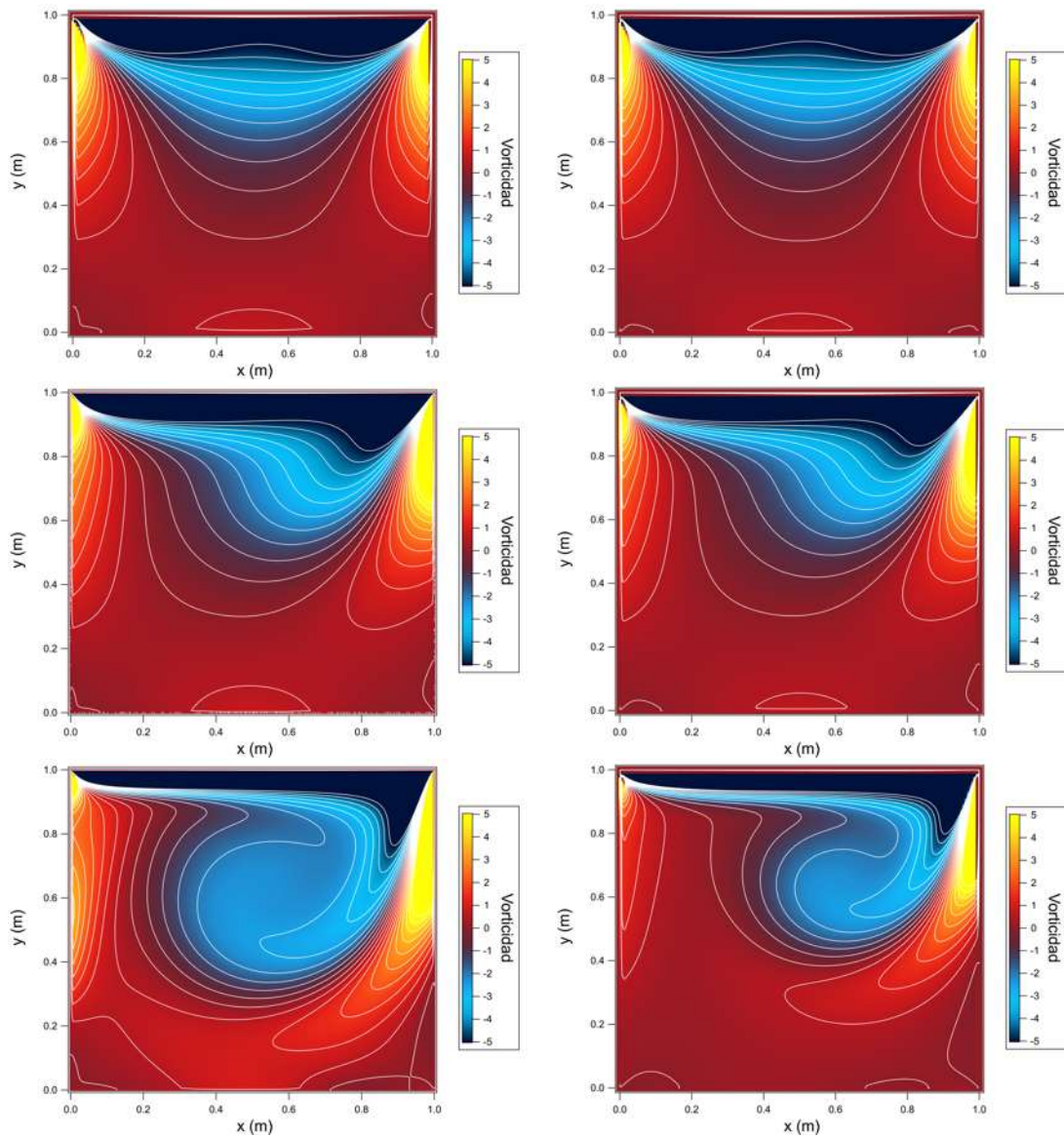


Figura 4.6: Magnitud y líneas de contorno de la componente z de la vorticidad para el flujo en una cavidad con valores entre -5 y 5 una vez alcanzado el estado estacionario. A la izquierda se presentan los resultados para LBM y a la derecha para SPH; a su vez en la parte superior se presentan los resultados para $Re = 10$, en el centro para $Re = 100$, y abajo para $Re = 1000$. Se puede observar cómo el centro del vórtice generado dentro de la cavidad cambia su localización conforme el valor del Re es mayor.

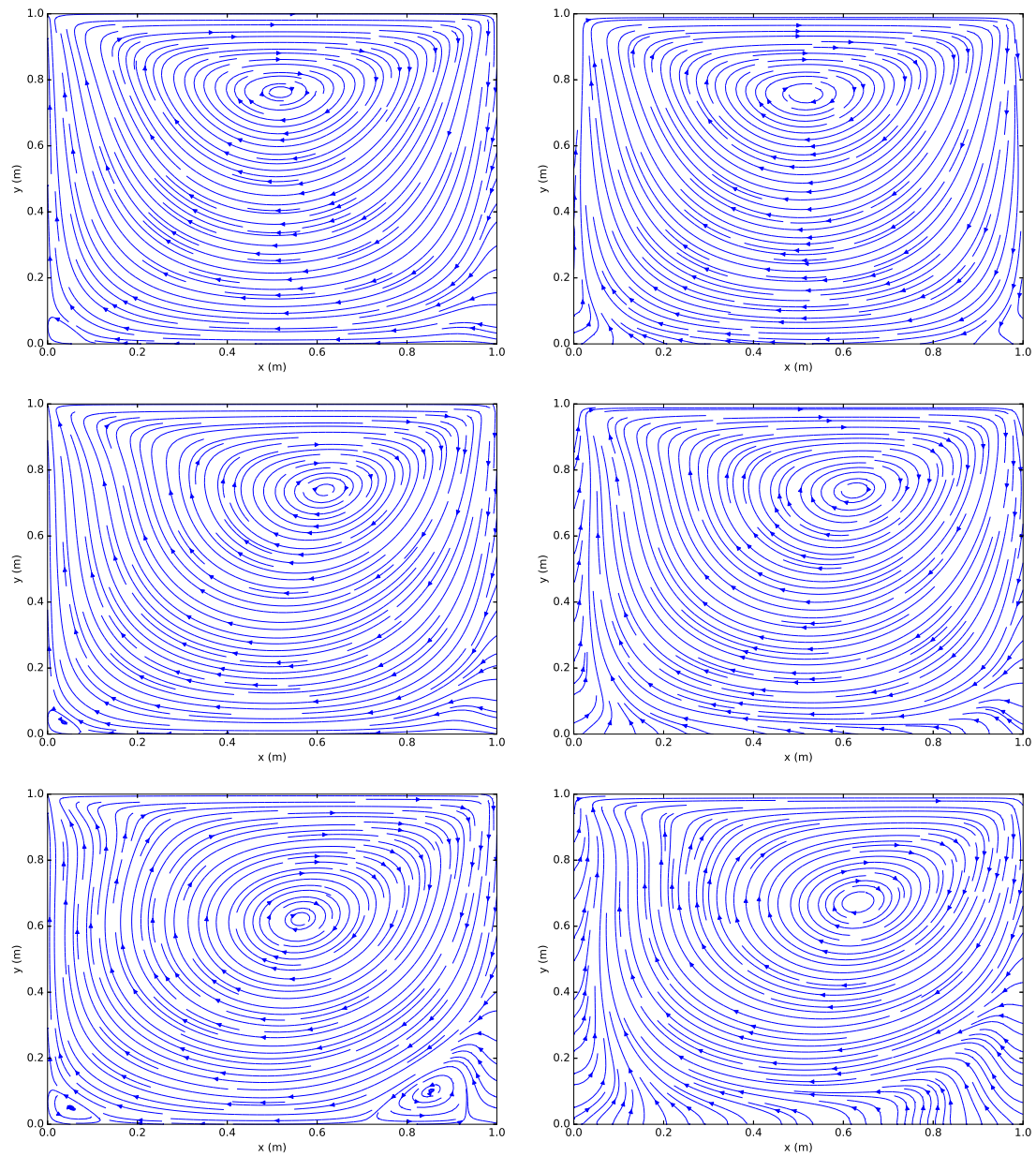


Figura 4.7: Líneas de corriente resultantes para las simulaciones del flujo en una cavidad una vez alcanzado el estado estacionario. A la izquierda se presentan los resultados para LBM y a la derecha para SPH; a su vez en la parte superior se presentan los resultados para $Re = 10$, en el centro para $Re = 100$, y abajo para $Re = 1000$. Se puede observar cómo el centro del vórtice generado dentro de la cavidad cambia su localización conforme el valor del Re es mayor. Se observan también los característicos vórtices secundarios en las esquinas de la cavidad

lateral derecha, momento en el cual dichos elementos se ven obligados a fluir en dirección y -negativa. Este proceso se sigue desarrollando sobre todo el dominio hasta dar paso a la generación de un vórtice cerca de la pared superior de la cavidad y que se va desplazando hacia el centro de la misma, deteniéndose en el momento en el que se alcanza el estado estacionario correspondiente al Re , a un tiempo aproximado de 15s. Tal como se puede observar, al alcanzar el flujo su estado estacionario, el centro del vórtice va cambiando su localización conforme el Re es mayor. Para los resultados con $Re = 400$, es claro que ambos métodos difieren mucho en el comportamiento final mostrado.

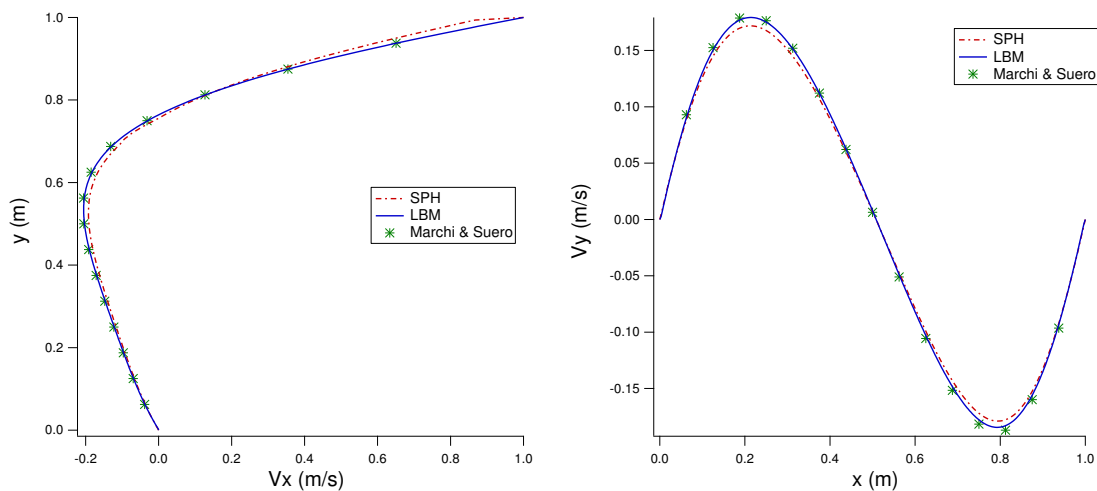


Figura 4.8: Comparación de la componente x de la velocidad a lo largo de $x = 0.5\text{m}$ (Izquierda) y la componente y de la velocidad a lo largo de $y = 0.5\text{m}$ para $Re = 10$ en el régimen estacionario, con respecto a los resultados obtenidos por Marchi.

Aunque los resultados anteriores muestran un comportamiento similar a lo encontrado por Ghia [69] y Marchi [70] y a su vez entre ambos métodos, es necesario compararlos cuantitativamente, con el objetivo de corroborar el correcto comportamiento de los mismos. Para esto se analizaron los resultados obtenidos para la componente x y y de la velocidad medidos sobre las rectas $x = 0.5\text{m}$ y $y = 0.5\text{m}$ respectivamente, con respecto a lo presentado en los trabajos de Ghia [69] y Marchi [70]. En la figura 4.8 se presentan los resultados para las componentes x y y de la velocidad para $Re = 10$. En este caso ambos códigos presentan un buen desempeño, siendo el máximo error para LBM inferior al 1% al comparar solo v_x

y menor al 2 % al comparar v_y ; a su vez, para SPH el máximo error se presenta en v_x con un valor aproximado del 10 %. Los resultados obtenidos para $Re = 100$ se presentan en la figura 4.9 para el tiempo en que el sistema alcanza el estado estacionario en torno a los 75s, y muestran de nuevo un buen desempeño para LBM, el cual solo no ajusta bien los valores esperados cuando se le compara con los resultados de Marchi para los valores máximos y mínimos de v_y , concretamente en $x = 0.25\text{m}$ y $x = 0.8\text{m}$. Por su parte, SPH presenta una considerable caída en la precisión, sobre todo para v_y , donde el error llega alcanzar valores por arriba del 15 %.

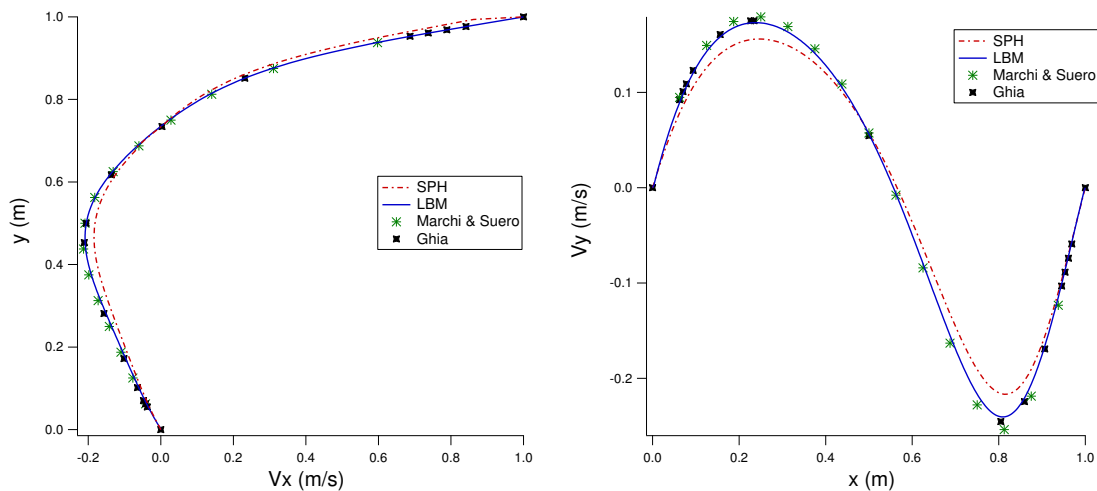


Figura 4.9: Comparación de la componente x de la velocidad a lo largo de $x = 0.5\text{m}$ (izquierda) y la componente y de la velocidad a lo largo de $y = 0.5\text{m}$ (derecha) para $Re = 100$ en el régimen estacionario, con respecto a los resultados obtenidos por Ghia y Marchi respectivamente.

Los resultados para $Re = 400$ se presentan en la figura 4.10 para el momento en que el flujo ha alcanzado el estado estacionario, lo cual ocurre a un tiempo aproximado de 150s, muestran una mayor pérdida en la precisión con LBM respecto a los resultados anteriores con el mismo método, alcanzando errores superiores al 5 %, los cuales se presentan al no poder capturar fielmente el comportamiento de los valores máximos de v_y . En este caso SPH muestra un pésimo rendimiento, debido nuevamente a los problemas que presenta el método en el tratamiento de las fronteras, siendo capaz de capturar el comportamiento físico del flujo, pero no

las magnitudes del mismo, lo cual se observa sobre todo para v_y .

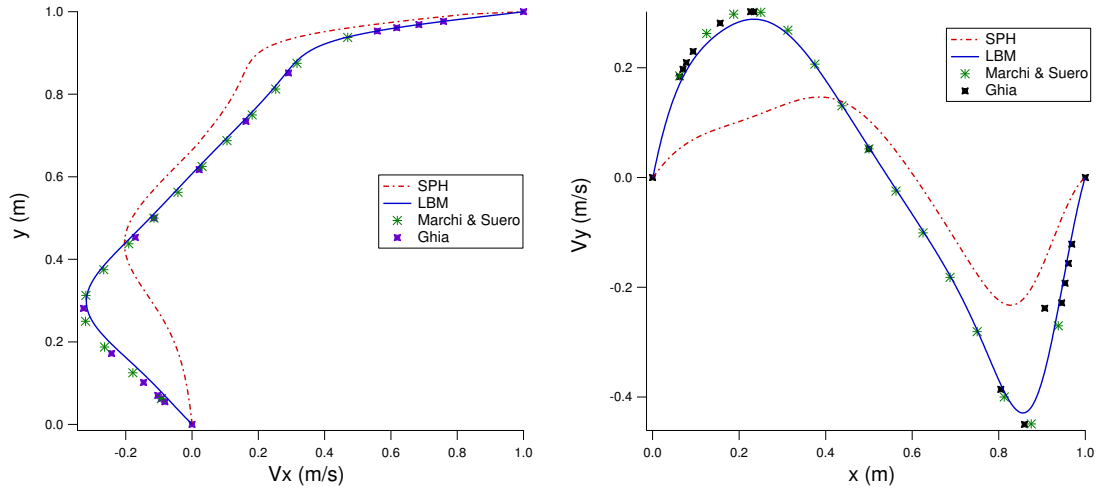


Figura 4.10: Comparación de la componente x de la velocidad a lo largo de $x = 0.5\text{m}$ (izquierda) y la componente y de la velocidad a lo largo de $y = 0.5\text{m}$ (derecha) para $Re = 400$ en el régimen estacionario, con respecto a los resultados obtenidos por Ghia y Marchi respectivamente.

Para valores de Re por arriba de 400, el código desarrollado en este trabajo doctoral con SPH, ya no permite obtener resultados confiables debido a la pérdida de partículas que escapan del dominio computacional, lo que a su vez lleva a un fallo subsecuente en la ejecución del algoritmo numérico. Es por ello que para $Re = 1000$, solo se presentan los resultados para LBM.

En la figura 4.11 se presentan los resultados para la magnitud y líneas de contorno de la vorticidad así como las líneas de corriente del flujo, mostrando un comportamiento similar a lo mostrado en la literatura. A su vez, al comparar, los valores de v_x y v_y en las rectas $x = 0.5$ y $y = 0.5$ respectivamente, los errores más altos se mantienen en valores de alrededor del 10%, tal como se ve en la figura 4.12. Los errores más grandes se dan en los puntos en los que la velocidad del flujo cambia de dirección. Esto es, para v_x aproximadamente en $y = 0.2\text{m}$, y para v_y aproximadamente en $x = 0.2\text{m}$ y 0.9m (ver figura 4.12).

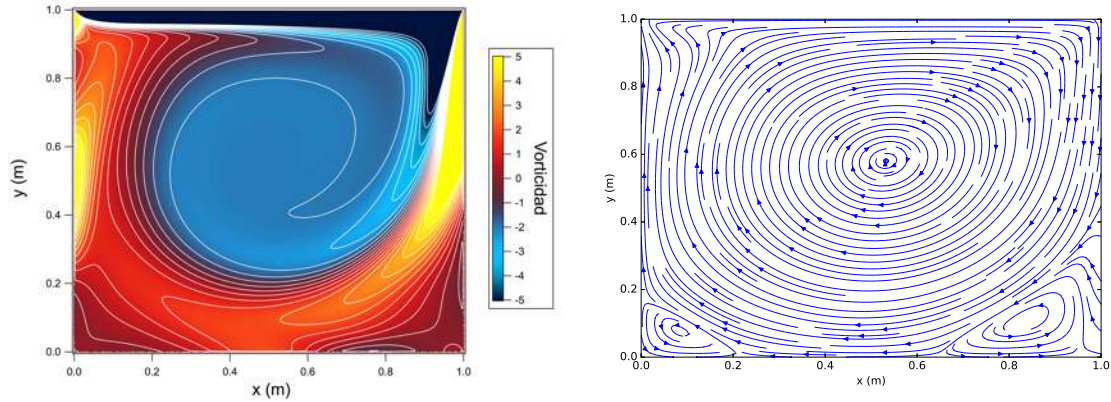


Figura 4.11: Magnitud y líneas de contorno de la componente z de la vorticidad (izquierda) con valores entre -5 y 5 y líneas de corriente resultantes (derecha), para las simulaciones del flujo en una cavidad con $Re = 1000$, una vez alcanzado el estado estacionario en torno a los 300s.

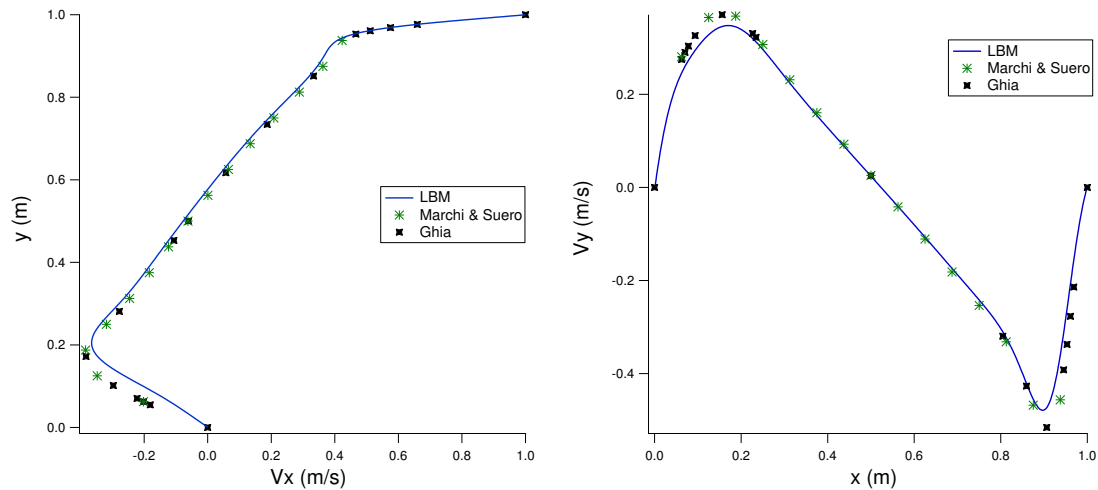


Figura 4.12: Comparación de la componente x de la velocidad a lo largo de $x = 0.5\text{m}$ (izquierda) y la componente y de la velocidad a lo largo de $y = 0.5\text{m}$ (derecha) para $Re = 1000$ en el régimen estacionario, con respecto a los resultados obtenidos por Ghia y Marchi respectivamente.

Para el código desarrollado con SPH en este trabajo doctoral, los resultados obtenidos muestran la necesidad de mejorar el tratamiento con las fronteras sólidas a fin de poder simular los flujos con Re superiores a 100. Para LBM los resultados son sumamente satisfactorios, pues a pesar de tener errores de hasta el 10% cuando

se intenta capturar los valores máximos de la velocidad del flujo, si se consideran las limitaciones antes mencionadas, como el hecho de comparar contra una malla de 1024×1024 , los códigos mostraron un buen comportamiento, incluso para $Re = 1000$. Es posible a su vez realizar simulaciones para valores de Re más altos, siempre y cuando se aumente considerablemente la resolución de la malla y se prolongue el tiempo de la simulación a fin de poder emular el comportamiento del flujo, esperando con ello, tener una precisión similar a la obtenida en los casos aquí presentados.

Los casos presentados demuestran la capacidad de LBM para simular un flujo en 2D sujeto a cizallamiento y fuerzas de arrastre, con un intervalo del número de Reynolds de 10 hasta 1000. A su vez el código muestra la capacidad para tratar vórtices, logrando capturar incluso los vórtices formados en las esquinas de la cavidad.

4.4. Flujo alrededor de un disco

Los flujos alrededor de un obstáculo representan un fenómeno muy complicado que ha sido objeto de interés en numerosos estudios de la mecánica de los fluidos, tanto numéricos como experimentales. Sus aplicaciones a muchos problemas físicos relevantes, incluyendo el estudio de las propiedades mecánicas de las espumas [71], aerodinámica de puentes [72], patrones de ondas generados en el flujo atmosférico [73], entre otros, demuestran una trascendental importancia en la ciencia y la ingeniería. Aunado a ello, estos flujos están presentes en una gran variedad de campos que van desde la ingeniería química e industrial, hasta procesos ambientales, físicos y biológicos.

A título de ejemplo, puede mencionarse el flujo de viento sobre postes de luz, líneas de energía, cables de suspensión de puentes, chimeneas, etc., el flujo de agua alrededor de las columnas de los puentes viales y el flujo de líquidos o gases alrededor de bancos de tubos en un intercambiador de calor industrial. El estudio de estos escenarios puede ser difícil debido a los efectos físicos que en ellos se presentan, como son la capa límite y las zonas de recirculación, para los cuales

las fuerzas viscosas son dominantes o comparables con las fuerzas inerciales. Por lo anterior, las predicciones de las propiedades fundamentales de estos flujos conllevan una difícil tarea, especialmente en el caso de aplicaciones industriales que requieran de una alta precisión al trabajar con sistemas sumamente complejos. Es por todo esto, que la simulación de flujos alrededor de un obstáculo es uno de los problemas más comunes en el estudio de la dinámica de fluidos computacional.

En general, para simplificar la complejidad en el estudio de los flujos alrededor de obstáculos, a menudo se apela a un caso particular de mayor simplicidad como lo es el flujo alrededor de un cilindro. El análisis numérico de este fenómeno físico se basa en un cuerpo cilíndrico que está sumergido en el fluido, el cual es de sección transversal circular y se asume fijo. Considerando que la longitud de dicho cilindro es mucho mayor que el diámetro del mismo, se puede suponer simetría cilíndrica para la sección transversal del sólido a la cual se referirá de ahora en adelante como disco, la cual es paralela al flujo. Para simplicidad del problema, el flujo asintótico inicial entrante se asume unidireccional, actuando sobre el eje x -positivo, tal como se muestra en la figura 4.13.

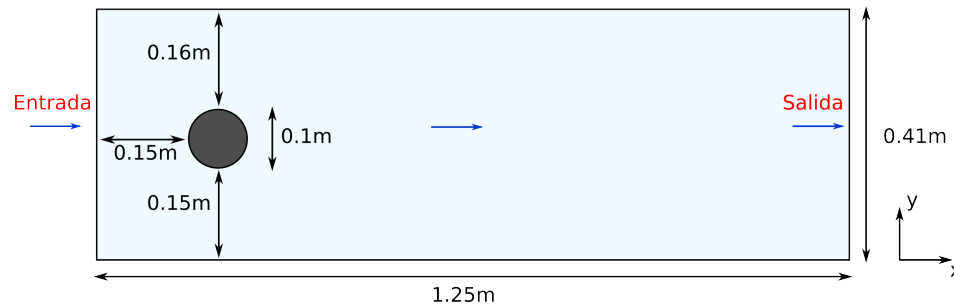


Figura 4.13: Esquema del dominio físico para el flujo alrededor de un disco.

En el caso de un fluido viscoso incompresible, el patrón del flujo generado tras el obstáculo varía dependiendo del número de Reynolds, lo cual se corroborará en los resultados obtenidos más adelante en esta misma sección. Para números Reynolds muy pequeños ($Re < 1$) el patrón de flujo es simétrico a lo largo del recorrido del mismo, tanto delante como detrás del obstáculo. Aquí, cuando el flujo se aproxima a la parte delantera del cilindro con respecto a la dirección en que se desplaza, la presión del fluido se eleva desde el valor del flujo entrante hasta

el punto de estancamiento. A medida que el valor del Re aumenta, la simetría delantera y trasera desaparecen.

A medida que el Re alcanza valores cercanos a 10, la alta presión en la parte frontal del cilindro restringe el fluido a moverse a lo largo de su superficie, generando capas límite que se generan a ambos lados del mismo (parte superior y parte inferior). En consecuencia, la fuerza de presión se opone a las fuerzas viscosas y, por lo tanto, el fluido ya no puede desplazarse sobre la superficie del obstáculo en su parte posterior, por lo que se separa en ambos lados del cilindro y forma dos capas de cizallamiento. La parte más interna de las capas de cizallamiento está en contacto con la superficie del cilindro y se mueve más lentamente que las partes externas, por lo que las capas de cizallamiento se enrollan sobre sí mismas, provocando que el fluido en la mitad superior de esta región gire en sentido horario, y el fluido en la mitad inferior gira en sentido contrario a las agujas del reloj. Esto representa el fenómeno de la generación de vórtices para el flujo alrededor de un cilindro.

Una vez que el número de Reynolds alcanza valores cercanos a 50, los vórtices se vuelven inestables y uno de éstos comienza a oscilar de arriba hacia abajo; es entonces cuando comienza la proyección de vórtices en el flujo alrededor de un cilindro. Éstos se emiten de forma alternada desde las partes superior e inferior del cilindro con una frecuencia definida. Inicialmente, uno de los dos vórtices se separa del cilindro desprendiéndose de la capa de cizallamiento que lo mantenía unido a él; y en consecuencia, el segundo de estos, se separa también proyectándose en la dirección del flujo debido a la presión asimétrica producida por las capas de cizallamiento. El vórtice proyectado es entonces arrastrado por la corriente circundante, mientras el segundo vórtice le sigue y un nuevo vórtice comienza a ser generado detrás de cada uno. Estos vórtices se disipan a medida que se alejan del cilindro. Así, cada par de vórtices generados tras la cara posterior del cilindro, pasan por este proceso en forma alternada, generando filas gemelas de vórtices, las cuales se conocen como la calle de los vórtices de Von Kármán, la cual queda representada en la figura 4.14.

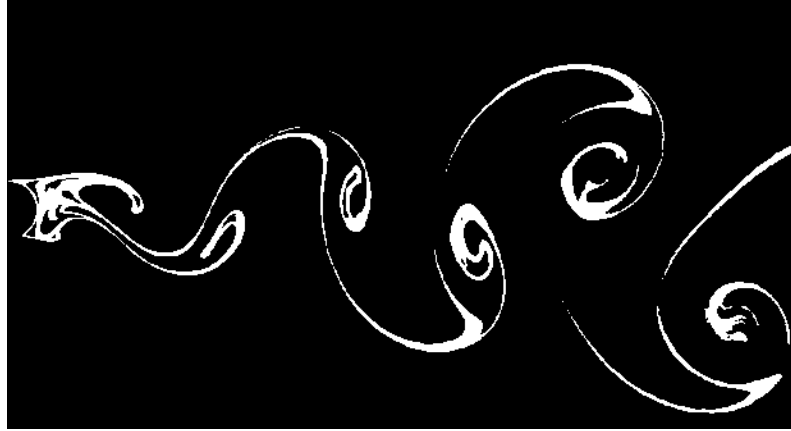


Figura 4.14: En la fotografía se muestra una calle de vórtices de von Kármán, la cual esta representada por un patrón repetitivo de vórtices en remolino causados por la separación no estacionaria de la capa de fluido al pasar sobre cuerpos sumergidos. Van Dyke, M.(1982). Album of fluid motion.

La simulación numérica de este tipo de flujos mediante la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos no estacionarios e incompresibles ha sido ampliamente investigada en numerosos trabajos [74, 75, 76, 77, 78, 79, 80], en los cuales se considera el obstáculo inmerso en un medio infinito. Desde el punto de vista computacional, las condiciones de contorno externas deben imponerse a una distancia finita aunque lo suficientemente lejos como para que no influyan en el cálculo de los parámetros más característicos del flujo.

En las últimas décadas, para simular estos flujos se han usado comúnmente métodos numéricos que emplean una malla para realizar los cálculos, como son el método de elementos finitos [81] y el método de volúmenes finitos [82]. En este sentido, SPH [83] y LBM [84], también se han popularizado debido a los buenos resultados que han demostrado al realizar simulaciones de este tipo de flujos.

4.4.1. Implementación numérica

Como prueba para los cálculos del método SPH y LBM, referentes a un flujo viscoso dos dimensional, interacción de un fluido con un obstáculo, proyección de vórtices en un flujo, así como flujos laminares y turbulentos, se ha realizado una simulación numérica en dos dimensiones del flujo en torno a un obstáculo

circular, impulsado por un flujo entrante y confinado a desplazarse en un tubo dos dimensional dos dimensional. Para este estudio en 2D, se consideró un flujo moviéndose en una dirección orientada hacia el eje x , con un obstáculo con sección transversal circular de diámetro $l_c = 0.1\text{m}$ fijado cerca de la frontera izquierda del dominio (concretamente en $x = 0.2\text{m}$ y $y = 0.2\text{m}$), e impulsado por un flujo entrante de Poiseuille caracterizado por una velocidad máxima v_{max} , cuyos valores se ubicaron en un rango de 0.015m/s hasta 3.75m/s , y fueron elegidos con base en los valores de Re que se habrán de usar. El dominio computacional de las simulaciones tiene una longitud total de $L_y = 0.41\text{m}$ en la dirección vertical y $L_x = 2\text{m}$ a lo largo de la horizontal. La densidad y la viscosidad cinemática se eligen como $\rho = 1.0\text{kg/m}^3$ y $\nu = 1 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ respectivamente. En la figura 4.13 se presentan las especificaciones importantes de la geometría del sistema.

En consecuencia, dada una cierta velocidad característica v_c , podemos calcular el valor de Re mediante la expresión:

$$Re = \frac{v_c l_c}{\nu}, \quad (4.5)$$

donde l_c es la longitud característica del sistema representado en este caso por el diámetro del disco. El perfil de velocidad inicial en la frontera izquierda (entrada) del dominio del sistema se utiliza como el perfil de velocidades entrantes del flujo durante la simulación, y se conforma empleando un flujo de Poiseuille determinado por

$$v_x(y) = 6v_c \frac{y(l_c - y)}{l_c^2}, \quad (4.6)$$

donde v_c es la velocidad característica del flujo que es igual a $2/3$ de la velocidad máxima v_{max} de una solución estacionaria para el campo de velocidades de un flujo de Poiseuille, tal como se señala en [57]. Por ejemplo, para $Re = 100$ se requiere de un perfil de velocidades entrante, caracterizado por una $v_{max} = 1.5\text{m/s}$.

Para este estudio, se realizaron simulaciones para valores del Re de 1, 10, 30, 60, 100, 140, 250 y 500; esto, en un intento por emular todos los comportamientos del flujo que se llegan a dar para este fenómeno físico a medida que Re aumenta. Para todas estas simulaciones se empleó una malla inicial de 164×500 elementos, salvo en el caso con LBM para $Re = 250$ y 500 , en la cual se usó una malla de 328×1000 elementos.

Para ambos métodos, al inicio de las simulaciones, las velocidades de todos los elementos del fluido son inicializadas a cero, salvo en la frontera izquierda donde se imponen velocidades según lo expresado en la ecuación 4.6. Las simulaciones finalizan en un momento posterior a que el sistema alcanza su estado estacionario; considerando tanto los casos en los que las variables físicas del sistema no varían en el tiempo o bien cuando las variaciones el tiempo son periódicas y se repiten de manera similar a cada periodo. En base a ello, se eligió terminar todas las simulaciones a un $t = 12s$, a fin de comparar todos los valores finales a un mismo tiempo en el cual, todas las simulaciones ya hubiesen alcanzado el estado estacionario.

En la implementación con LBM, se aplicó tanto la herramienta FBB como HBB para el tratamiento de las paredes sólidas (véase la sección 3.3.1) y para el obstáculo sólido inmerso en el flujo. Usar el HBB tiene una alta complejidad de implementación al aplicarlo a superficies curvas; lo cual implica aceptar una pérdida de precisión en el tratamiento obstáculo-fluido si se emplea en su lugar FBB. En general los resultados que se presentan en esta sección fueron hechos con FBB dado que es la condición de frontera que se empleó durante el desarrollo de los artículos arbitrados que se presentan en los capítulos 5 y 6. A su vez, a fin de tratar con el flujo entrante, se empleó el tratamiento descrito en la sección 3.3.3 para el caso en el que la velocidad de los elementos fronterizos es paralela a la dirección de entrada del flujo. En el caso de la frontera de salida, se hace uso del tratamiento detallado en la sección 3.3. Para todas las simulaciones se aplico un tiempo de relajación $\tau = 0.60$.

En la implementación con el método SPH se usó el tratamiento para las fronteras sólidas propuesto por Crespo en [36]. Para tratar las fronteras de entrada y salida, importantes para mantener una consistencia en la dinámica del flujo y para permitir a las partículas fronterizas tener suficientes vecinos con los cuales realizar los promedios requeridos, se usó el tratamiento desarrollado por Federico et al.[39]. No obstante, su implementación es compleja y los resultados de la misma fueron incorrectos por lo que, se optó por usar fronteras periódicas como las presentadas en la sección 2.6.2, considerando que habría que ampliar el dominio computacional para que el flujo saliente no afectara la interacción con el obstáculo

sólido. Finalmente, para la viscosidad, se empleó el tratamiento descrito por Morris en [33], y que se presenta en la sección 2.5.

4.4.2. Simulaciones y resultados

Con el fin de probar la precisión de los códigos desarrollados con LBM y SPH al simular un flujo alrededor de un obstáculo cilíndrico a diferentes valores del número de Reynolds, se estudiaron los casos a $Re = 1, 10, 100, 140, 250$ y 500 ; cubriendo una amplia variedad de comportamientos para el flujo, desde un flujo laminar, hasta el caso en el que la estela vórtices es completamente turbulenta.

En las figuras 4.15 y 4.16 se muestran los resultados obtenidos con LBM para la magnitud de la vorticidad del flujo. Se observa el comportamiento laminar del flujo presente en la mayoría de los casos y se obtiene el comportamiento esperado para cada uno de los casos estudiados. Así, se puede ver cómo el flujo pasa a través del disco generando las capas límite³ ($Re = 1$) en la parte superior e inferior del disco, las cuales van separándose y generando una par de vórtices ($Re = 10$ y 30). A $Re = 60$, los vórtices ya se han desprendido y son proyectados a lo largo del flujo conformando la calle de vórtices de Kármán; donde a medida que aumentamos la velocidad del flujo entrante ($Re = 100$ y 140), la frecuencia de la proyección de vórtices aumenta también.

En la figura 4.17 se presentan resultados similares para el método SPH solo para valores del $Re = 1, 10$ y 30 . Todas éstas emplearon un $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$, con un número de iteraciones totales ajustado a cada caso para alcanzar el estado estacionario y evitar que el flujo saliente afectase la interacción con el obstáculo, considerando que para estos valores del Re no se presenta aún formación de vórtices, y por tanto, se alcanza el estado estacionario en no más de 3 segundos. El hecho de que no se realizaran simulaciones a mas altos Re , se debe a que computacionalmente se requeriría de mucho tiempo para poder realizarlas pues conforme se aumenta el Re , aumenta tanto la velocidad del flujo entrante como el tiempo en el que el fluido alcanza su estado estacionario; por tanto, dichas simulaciones

³En física de fluidos, una capa límite es un concepto importante que se refiere a la capa de fluido en las inmediaciones de una superficie sólida límite donde los efectos de la viscosidad generados por la interacción entre el fluido y la superficie sólida son significativos.

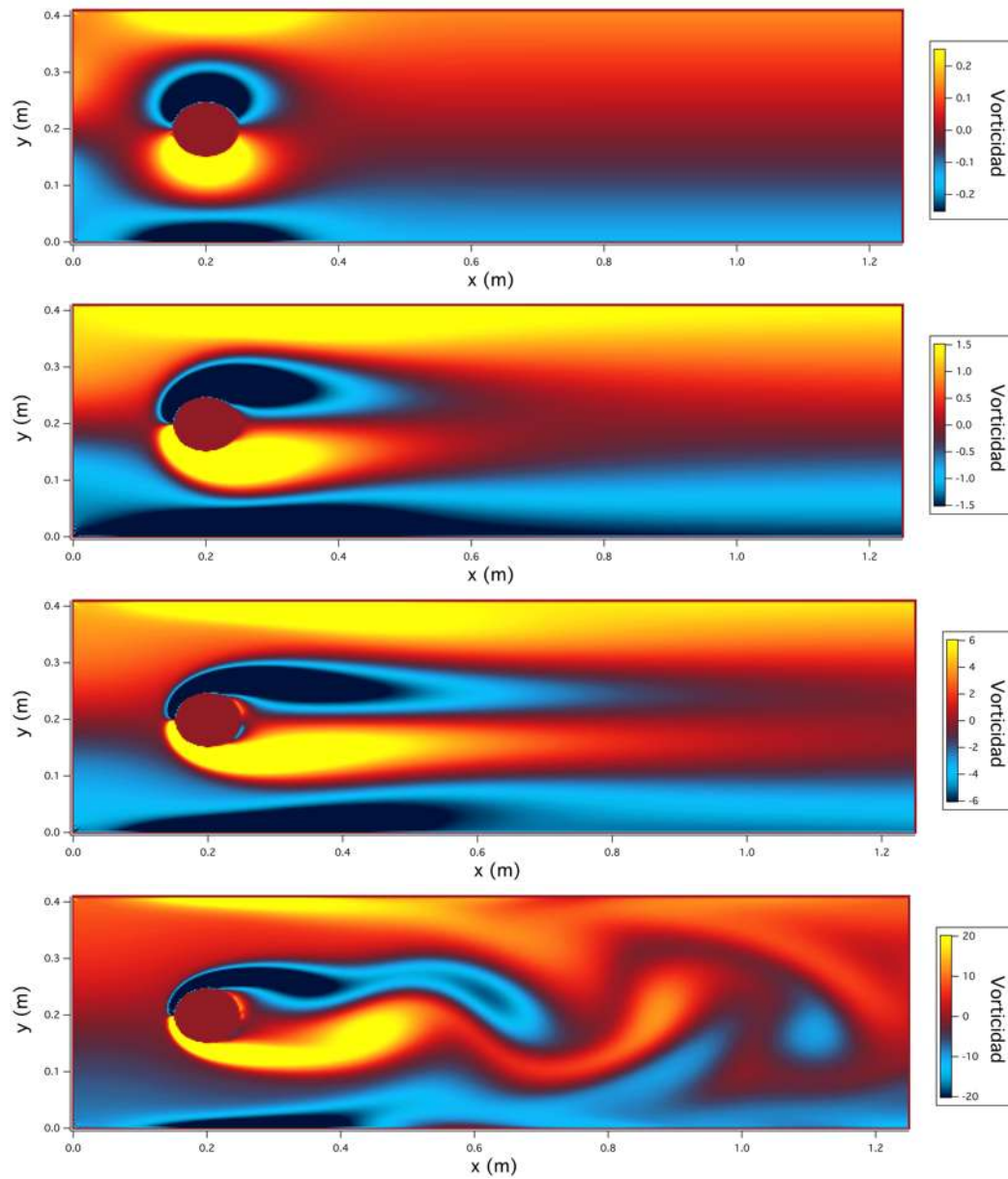


Figura 4.15: Magnitud de la vorticidad para la simulación con LBM del flujo alrededor de un disco. Se presentan los resultados para valores del $Re = 1, 10, 30$ y 60 (presentados de arriba abajo respectivamente). Se puede ver como el patrón que caracteriza al flujo va cambiando con el número de Reynolds, desde el régimen en que el flujo aún no se separa debido a la formación de las estelas que contienen a los vórtices, hasta la proyección de los mismos, lo cual se da a partir de $Re=60$. Para Re superiores la frecuencia de proyección de vórtices se incrementa.

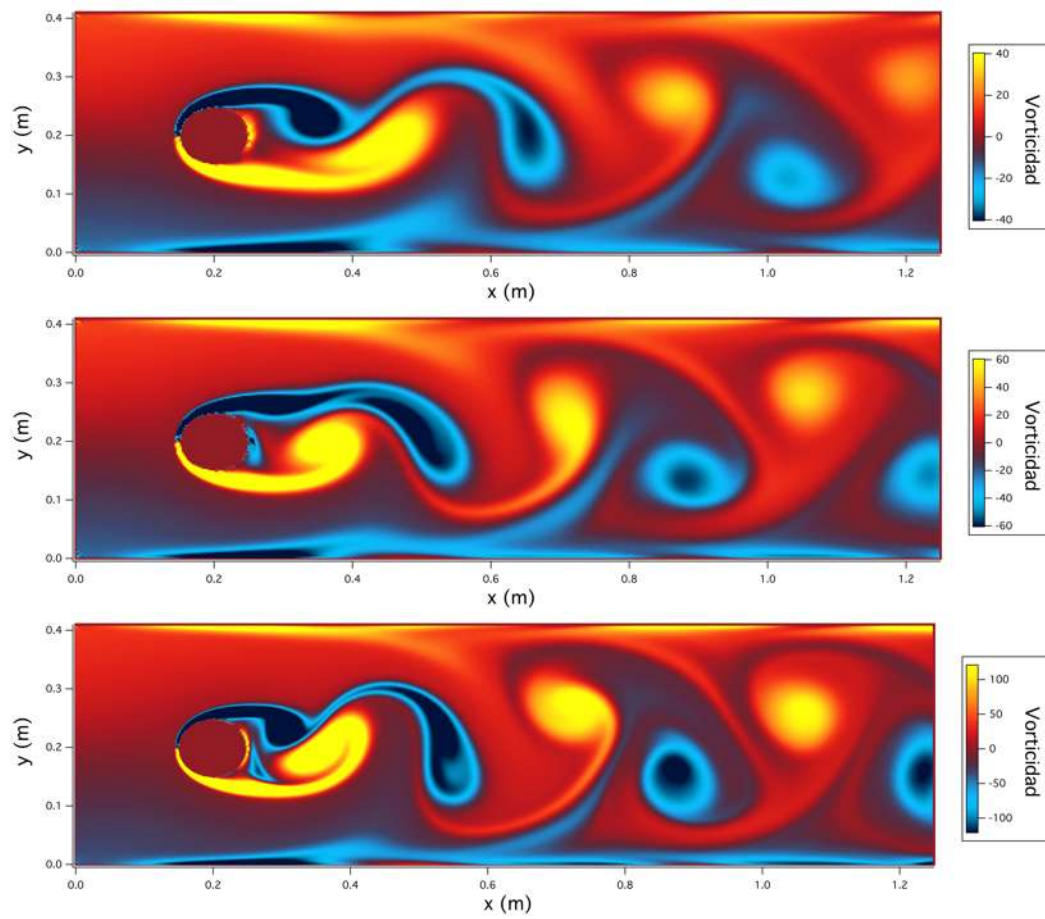


Figura 4.16: Magnitud de la vorticidad para la simulación con LBM del flujo alrededor de un disco. Se presentan los resultados para valores del $Re = 100$, 140 y 250 (presentados de arriba abajo respectivamente).

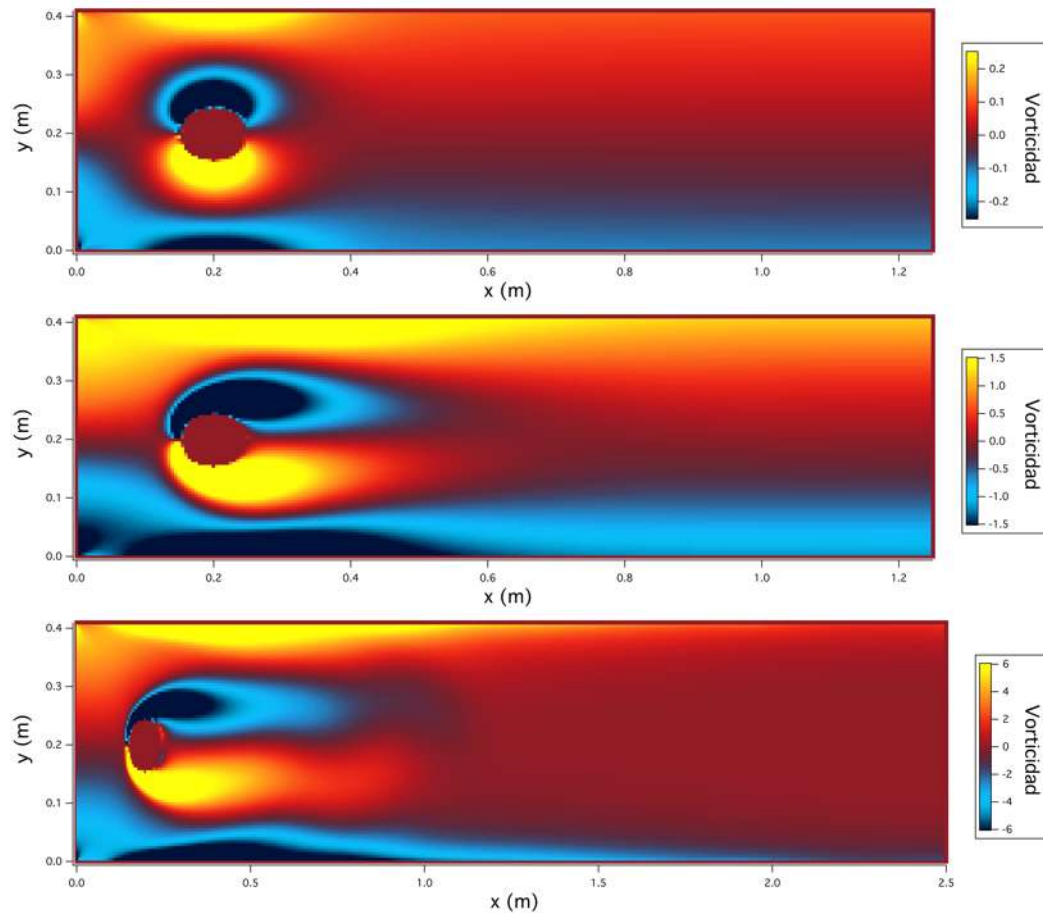


Figura 4.17: Magnitud de la vorticidad para la simulación con SPH del flujo alrededor de un disco. Se presentan los resultados para valores del $Re = 1, 10$ y 30 (presentados de arriba abajo respectivamente). Se puede ver una similitud en los resultados obtenidos con LBM.

requieren que se extienda mucho más el largo del tubo dos dimensional para evitar que los vórtices generados tras el disco ingresen de nuevo por la frontera de entrada. Los resultados obtenidos son visualmente similares a los obtenidos por LBM, salvo en el caso de $Re = 30$, en el que pareciera que la estela de vórtices se está tornando inestable, efecto que debería ocurrir a mas altos Re .

De los resultados de las simulaciones realizadas, se extrajo información respectiva a los valores medidos en el tiempo físico para la componente x de la velocidad, tal como se ve en la figura 4.18. La medición fue tomada a lo largo de toda la evolución del sistema y se extrajo en un punto ubicado en $x = 0.35\text{m}$ y $y =$

0.3075m; todo esto con el fin capturar lo mejor posible la información referente a la calle de vórtices de Von Kármán. De estos resultados se puede observar cómo el estado estacionario de la solución va pasando de ser uno en el que las variables del sistema se conservan en el tiempo, al caso en el que las variaciones de las variables físicas son periódicas.

4.4.3. Precisión y auto convergencia

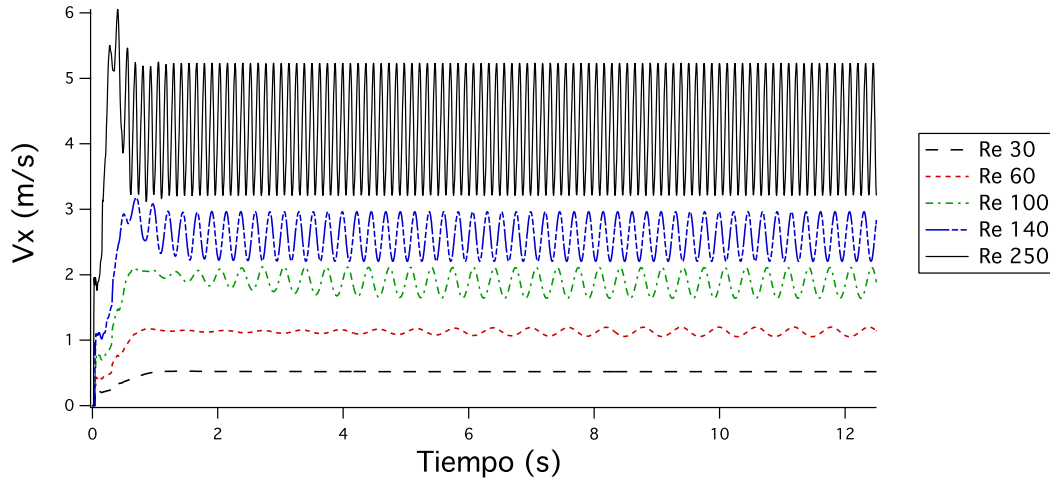


Figura 4.18: Series de tiempo de la componente x de la velocidad del flujo para diferentes valores del Re tomadas durante todo el dominio temporal de la simulación, obtenidas con LBM.

Para probar la precisión y auto convergencia del código desarrollado con LBM, se extrajo la frecuencia de proyección de vórtices de los resultados para $Re = 100$, mediante un ajuste de curvas, a fin de calcular el número de Strouhal (St) correspondiente. En la figura 4.18 se muestran las series de tiempo para v_x a diferentes valores del Re ; a partir de estos conjuntos de datos se puede extraer la frecuencia de proyección de vórtices. El número de Strouhal es un número adimensional que describe el comportamiento oscilatorio de un flujo, y está determinado por la expresión:

$$St = \frac{f_p l_c}{v_c}, \quad (4.7)$$

donde f_p es la frecuencia de oscilación del flujo, o concretamente para este estudio, la frecuencia de proyección de los vórtices que se generan tras el obstáculo.

Así, para $Re = 100$, se obtiene un valor de 0.2994150 para el St con una malla numérica de 164x500 elementos cuando se emplea FBB para el tratamiento de las paredes sólidas; mientras que al usar HBB, se obtiene que $St = 0.2940387$. Este resultado se puede comparar con los presentados por Schäfer en [57], mostrando una gran similitud en los valores obtenidos en dicho trabajo para distintas resoluciones espaciales y temporales, los cuales se encuentran en un rango de 0.290 a 0.305.

Considerando la dificultad de comparar para otros valores del Re , pues no existen estudios detallados al respecto, se ha hecho también un estudio de auto-convergencia tomando en un principio un caso distinto al del flujo alrededor de un disco, a fin de probar la auto-convergencia del código cuando éste trabaja sin ningún artificio numérico externo (como pueden ser el FBB y HBB). Para ello se ha elegido al problema físico del vórtice en decaimiento de Taylor-Green, el cual se describe a detalle en el apéndice D. El estudio de la auto-convergencia para este caso se realizó midiendo la componente v_x de la velocidad del flujo sobre un mismo punto ubicado en $x = 0.5m$ y $y = 0.75m$ (en un dominio de $1x1m$) para un periodo de tiempo desde $t = 0s$, hasta $t = 0.2s$. Se emplearon cuatro distintas resoluciones de la malla numérica, a saber, $R1 = 100x100$, $R2 = 200x200$, $R3 = 400x400$ y $R4 = 800x800$, calculando con ello el factor de convergencia FC para $R1$, $R2$ y $R3$ dado por la expresión

$$FC = \frac{v_x(R1) - v_x(R2)}{v_x(R2) - v_x(R3)}, \quad (4.8)$$

así como para $R2$, $R3$ y $R4$, tal como se muestra en la figura 4.19. En ambos casos se obtiene una factor de convergencia FC que oscila en torno al valor esperado de 4 (dado que en cada caso se han duplicado las resoluciones), lo cual indica que el código presenta un esperado segundo orden de precisión. Aunque lo anterior, solo es valido para un flujo newtoniano de comportamiento laminar, y en el caso en que no se emplean algoritmos numéricos externos para la simulación con LBM.

Para la simulación del flujo alrededor de un disco, a fin de calcular el factor

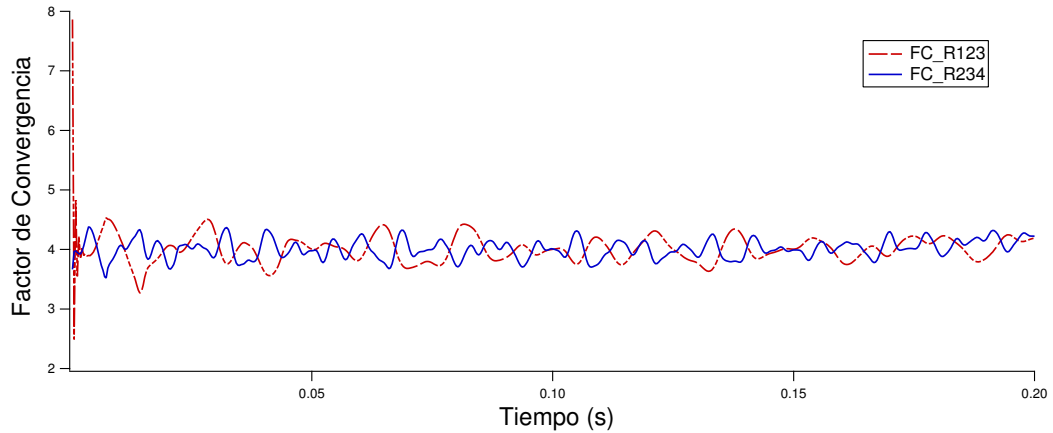


Figura 4.19: Valor del factor de convergencia para la simulación numérica del vórtice en decaimiento de Taylor-Green. En rojo se presenta el FC calculado con las resoluciones R1, R2 y R3, mientras que en azul se presenta el FC calculado para las resoluciones R2, R3, R4. En ambos casos los valores obtenidos se calcularon midiendo v_x en $x = 0.5$ y $y = 0.75$, para un periodo de tiempo comprendido desde $t = 0s$ hasta $t = 0.2s$. Se observan que en ambos casos FC oscila en torno a 4, tal como se espera.

de convergencia respectivo, se consideró el estudio de dicho flujo a $Re = 100$ con mallas de 164×500 , 328×1000 y 492×1500 elementos; a las que llamaremos R1, R2 y R3 respectivamente. Dado que LBM es de segundo orden de precisión, se sabe que las simulaciones con fronteras y obstáculos sólidos mantienen ese orden de precisión cuando se emplea el tratamiento HBB para dichas fronteras sólidas, siempre que las paredes sólidas sean rectas [56, 55]. Del mismo modo, para el tratamiento FBB, se espera que la precisión sea de primer orden; de nuevo, siempre y cuando las paredes sean rectas [55].

En el caso de la presencia de obstáculos con fronteras curvas, como es el caso del presente estudio, es conocido que ambos tratamientos para las fronteras no permiten preservar la integridad geométrica, propiciando con ello una caída en el orden de precisión [44, 52, 85]. Incluso, se sabe que para flujos a altos Re , la integridad geométrica del sistema físico es importante dado que la generación de vórtices es sensible a la resolución geométrica. Por ello, es de esperarse que el factor de convergencia, que habría de ser de 3 para FBB y de $27/5 = 5.4$ para HBB en el caso de presentarse solo fronteras rectas, quede por debajo de dichos valores

respectivamente.

Considerando lo anterior, se evalúa la auto-convergencia calculando el factor de convergencia del código usando tanto el tratamiento FBB como HBB, comparando las diferencias entre los resultados de acuerdo a su resolución. Usando FBB, para la malla R1 se obtuvo, tal como se mencionó antes, un valor de $St = 0.2994150$, para la malla R2 un $St = 0.2995566$ y para R3 un $St = 0.3002505$. El factor de convergencia está dado por la expresión:

$$FC = \frac{St(R1) - St(R2)}{St(R2) - St(R3)}. \quad (4.9)$$

Sustituyendo los resultados y aplicando la expresión, se tiene un factor de convergencia de 0.204 para $Re = 100$. Del mismo modo, para HBB se obtuvieron valores del St de 0.2940387, 0.2964849 y 0.2979858 para las mallas R1, R2 y R3 respectivamente, obteniendo un factor de convergencia de 1.629. Donde ambos valores se encuentran muy lejos del valor deseado, resaltando que FBB y HBB están diseñados para usarse en superficies no curvas, teniendo que ser adaptados para superficies curvas al simular el flujo en torno a un disco. Más aun, no existen estudios del comportamiento de la precisión del método LBM cuando se simulan flujos no estacionarios a altos valores del Re y que a su vez presentan proyección de vórtices.

Al igual que en el estudio anterior, las simulaciones desarrolladas en esta sección se vieron limitadas por la falta de un proceso de paralelización de los códigos, motivo por el cual, no se presentan resultados a mayores valores del Re , pues estos, dadas las velocidades que alcanzan, requieren forzosamente de una alta resolución espacial y temporal.

Los casos presentados demuestran la capacidad de LBM para simular un flujo en 2D sujeto a cizallamiento, fuerzas de arrastre, interacción con obstáculos y turbulencias, con un intervalo del número de Reynolds de 1 hasta 500. A su vez el código muestra la capacidad para tratar vórtices y la proyección de estos dentro de un flujo confinado. Para SPH no se realizó un estudio similar debido a que no se consiguió realizar simulaciones para flujos por arriba de $Re = 30$, esto es, flujos para los cuales se presentará la proyección periódica de vórtices; esto debido a los

motivos mencionados anteriormente en esta sección.

4.5. Conclusiones del capítulo

Se han presentado distintos estudios que prueban el desempeño particular de los códigos desarrollados con LBM y SPH. Se han probado los casos ya ampliamente conocidos de los flujos de Poiseuille y Couette, la cavidad con una pared móvil, el flujo alrededor de un disco y el flujo en un medio poroso. Con ellos, ha quedado probada la capacidad del código en 2D desarrollado con LBM para tratar flujos viscosos incomprensibles bajo un amplio rango del número de Reynolds. Se ha probado su capacidad para tratar flujos impulsados tanto por una fuerza de cuerpo como por una fuerza de arrastre. Finalmente, el código ha mostrado ser capaz de emular el comportamiento del flujo en torno a obstáculos y la proyección de vórtices dentro de un flujo.

Respecto al código desarrollado con SPH, se ha probado su capacidad para trabajar con flujos a bajos números de Reynolds. No obstante ha quedado de manifiesto que se requiere hacer mejoras en el tratamiento con las fronteras para poder tratar flujos a más altos Re , sobre todo en lo que respecta a la interacción sólido-líquido y las fronteras abiertas. Esto es de esperarse ya que SPH está pensado originalmente para trabajar sin fronteras físicas en procesos astrofísicos.

Dados los resultados presentados a lo largo de este capítulo, en los cuales se ha obtenido una mayor precisión del código desarrollado con LBM sobre el respectivo con SPH; y dado que el llevar a cabo las correcciones y mejoras necesarias para que el código con SPH alcance una aceptable precisión, son más complejas e implican una amplia inversión de tiempo en desarrollo de código, de aquí en adelante, las investigaciones desarrolladas en esta tesis doctoral (que se presentan en las siguientes secciones) emplearán siempre al método LBM.

Capítulo 5

Estimación del número de Reynolds en el flujo alrededor de un disco

Este capítulo está basado en el artículo titulado *Estimation of Reynolds number for flows around cylinders with Lattice Boltzmann methods and artificial neural networks* [86] el cual fué publicado en la revista *Physical Review E*. El artículo presenta un trabajo de investigación en el área de dinámica de fluidos e inteligencia artificial, cuyo objetivo es la caracterización precisa de los distintos patrones de flujo que se presentan en un flujo, en torno a un disco.

En este trabajo se desarrolló un código numérico empleando LBM, que introduce las propiedades físicas del problema, tales como el diámetro y la ubicación del obstáculo, la densidad, la viscosidad y la velocidad inicial del fluido, para simular el flujo alrededor de un disco, obteniendo propiedades físicas del flujo tales como la velocidad, vorticidad, o densidad del fluido a lo largo del dominio. Después de realizar las simulaciones, se extrajo la componente x del campo de velocidades (v_x) y la componente z de la vorticidad para fluidos con un número de Reynolds (Re) entre 1 y 120. Conformando con la información extraída de los resultados numéricos, una base de datos para el flujo alrededor de un disco.

A su vez, se implementó un método de aprendizaje automatizado (ML por su acrónimo en Inglés) con un algoritmo de entrenamiento supervisado [87], el cual utiliza el campo de velocidades o la vorticidad, como información de entrada para realizar su entrenamiento, y como objetivo de éste, estimar una propiedad física

que caracterice al flujo, eligiendo en este caso un Re correspondiente a los datos de entrada utilizados en cada simulación. Con ello, tras el entrenamiento, la única información necesaria para predecir el Re son los perfiles de velocidad o vortici-
dad, dependiendo de cual de estas variables físicas se emplea como información de entrada.

El método de ML empleado para caracterizar los flujos, es el de las redes neuronales artificiales (RNAs) presentadas en el apéndice E. Existen arquitecturas de RNAs más sofisticadas con respecto a las usadas aquí, que podrían mejorar los resultados o ser adecuadas en escenarios más complejos, por ejemplo, considerando la evolución temporal de los patrones de flujo. No obstante, los resultados mostrados más adelante sugieren que, al menos para este caso, no es necesario emplear RNAs más complejas.

Como primer paso hacia la resolución de este problema, inspeccionamos las predicciones de la RNA para patrones de flujo en diferentes momentos, como se describirá más adelante. Además, dado que los resultados de una sola RNA pueden ser diferentes de otra RNA, ya sea porque los pesos se inicializan al azar, o la tasa de aprendizaje seleccionada y/o los valores de impulso podrían mejorar o disminuir la precisión de predicción (incluso con el mismo número de iteraciones o la selección de conjuntos de entrenamiento, validación y prueba), las predicciones presentadas en las siguientes secciones son el promedio de diez resultados de RNAs diferentes y son representativas para el uso de RNAs con valores de parámetros particulares definidos en la sección 5.3.

5.1. Simulación con LBM del flujo alrededor de un disco en 2D

Con el fin de realizar la predicción numérica de Re asociado a un cierto flujo, mediante el método de aprendizaje automatizado, se construyó un código numérico basado en el método LBM (descrito en el capítulo 3) para el caso bidimensional del flujo alrededor de un obstáculo con simetría cilíndrica, cuyas bases se presentan en la sección 4.4.

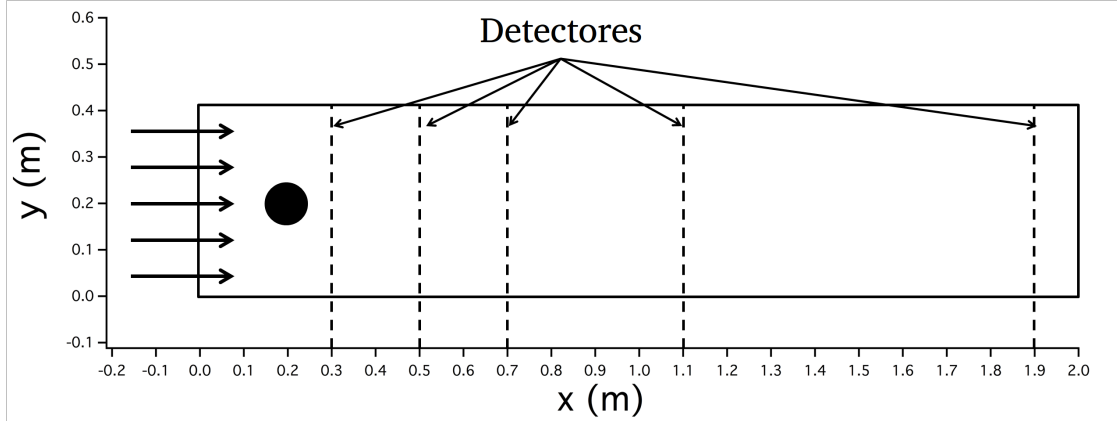


Figura 5.1: Una representación esquemática del flujo alrededor del disco y de las ubicaciones de los detectores donde se extrajeron 1,4,6,11,21,41 y 82 valores de v_x y la componente z de la vorticidad. El fluido se mueve de izquierda a derecha y la medición se realiza cuando se alcanza el estado estacionario.

Así, se consideró un flujo moviéndose en una dirección orientada hacia eje x positivo, con un obstáculo cilíndrico de diámetro $l_c = 0.1$ m fijado cerca de la frontera izquierda del dominio en $x = 0.2$ m y $y = 0.2$ m, tal como se ve en la figura 5.1. El dominio de la simulación tiene una longitud total de $L_y = 0.41$ m en la dirección vertical y $L_x = 2$ m a lo largo de la horizontal. La densidad y la viscosidad cinemática se eligen como $\rho = 10^3$ kg/m³ y $\nu = 10^{-6}$ m²/s respectivamente. Donde estos valores se toman considerando que se esté trabajando con agua líquida destilada a una presión de 1 atm y a una temperatura de entre 4°C y 20°C, valores que son comúnmente usados en gran variedad de trabajos numéricos como puede ser [23]. En consecuencia, dada una cierta velocidad característica v_c , podemos calcular Re , tal como se describe en la sección 4.4.1.

Para construir la base de datos necesaria para entrenar la RNA, se realizaron 120 simulaciones con valores diferentes del número de Reynolds asociados a un mismo obstáculo, desde $Re = 1$ hasta $Re = 120$ en incrementos de 1, utilizando como base una malla numérica de 165×821 nodos. El único parámetro de entrada que se varió para obtener el Re correspondiente a cada una de las simulaciones, fue el perfil de velocidades entrantes parametrizado por v_c , cuyas magnitudes se ubicaron entre 0.01 m/s y 1.2 m/s.

Para implementar la frontera que representa al fluido entrante (a la izquierda del dominio numérico), se utilizó el modelo desarrollado por Zou y He [56], utilizando un perfil de velocidad dado, como entrada para el modelado numérico. A su vez, para la frontera en la cual el fluido es expulsado (a la derecha del dominio), utilizamos el método presentado en la sección 3.3.

Las funciones v_x y la componente z de la vorticidad se midieron en un momento considerablemente posterior a que el sistema alcanzara su estado estacionario, caracterizado a altos valores del Re , por la periodicidad en las variaciones de las propiedades físicas a lo largo del tiempo. Los resultados obtenidos se muestran en la figura 5.2 para v_x y en la figura 5.3 para la vorticidad. Se puede ver que el fenómeno de la calle vórtices de von Karman se ve claramente en los resultados para altos valores de Re (ver sección 4.4 para más detalles). La forma en que esta información extraída de los resultados de las simulaciones numéricas se introduce en las RNAs, se explica en la sección 5.2; y los detalles respecto a las RNAs y su implementación, se presentan en el apéndice E.

5.2. Procesamiento de datos

Con el fin de estimar el número de Reynolds asociado al flujo alrededor de un obstáculo, la información física necesaria contenida en los resultados de las simulaciones, se extrajo en cinco ubicaciones distintas a lo largo del eje x en la región posterior al disco, esto es, a 0.3m, 0.5m, 0.7m, 1.1m and 1.9m, tal como se muestra en la figura 5.1. El primer detector se localiza inmediatamente detrás del disco con el fin de evaluar la capacidad predictiva de la RNA en el área donde se inicia la generación de vórtices y se separan las capas límites del fluido del obstáculo sólido que ha propiciado su formación. Las tres ubicaciones intermedias representan mediciones en regiones donde se está observando el proceso de la generación de vórtices; en esta zona se presenta la proyección inicial de los vórtices hacia el flujo, debido a la inestabilidad de las estelas que los contienen, la inversión en la posición inicial de los vórtices y a su vez el inicio y parte central de la calle de vórtices. Finalmente, el último detector mide la precisión de la RNA cuando se desea extraer

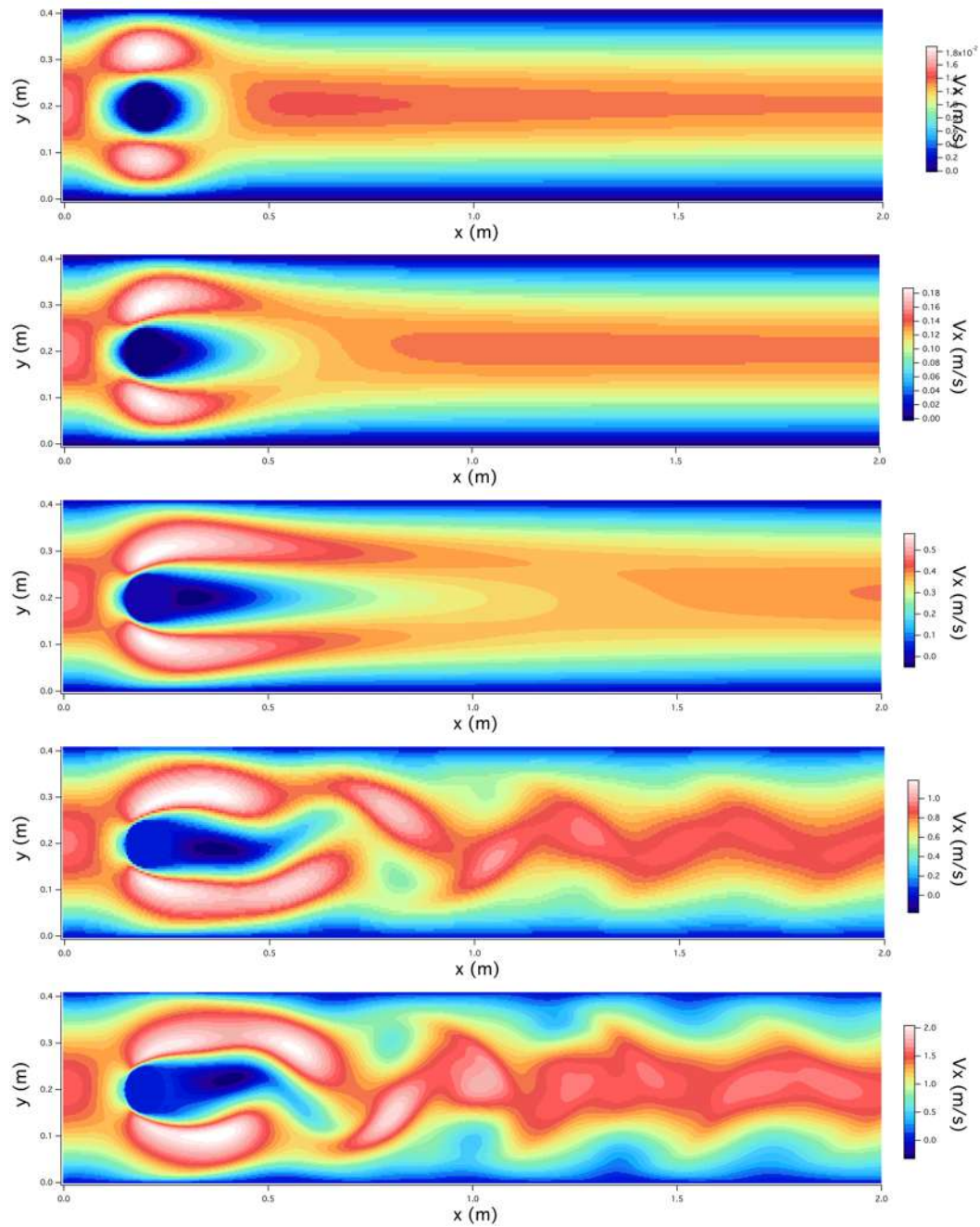


Figura 5.2: Magnitud de v_x para el flujo alrededor de un disco con valores del Re de 1, 10, 30, 60 y 100. Se puede observar cómo la velocidad mantiene aproximadamente su magnitud con respecto al perfil de velocidades entrantes, sobre todo a medida que el flujo se aleja de las proximidades del obstáculo.

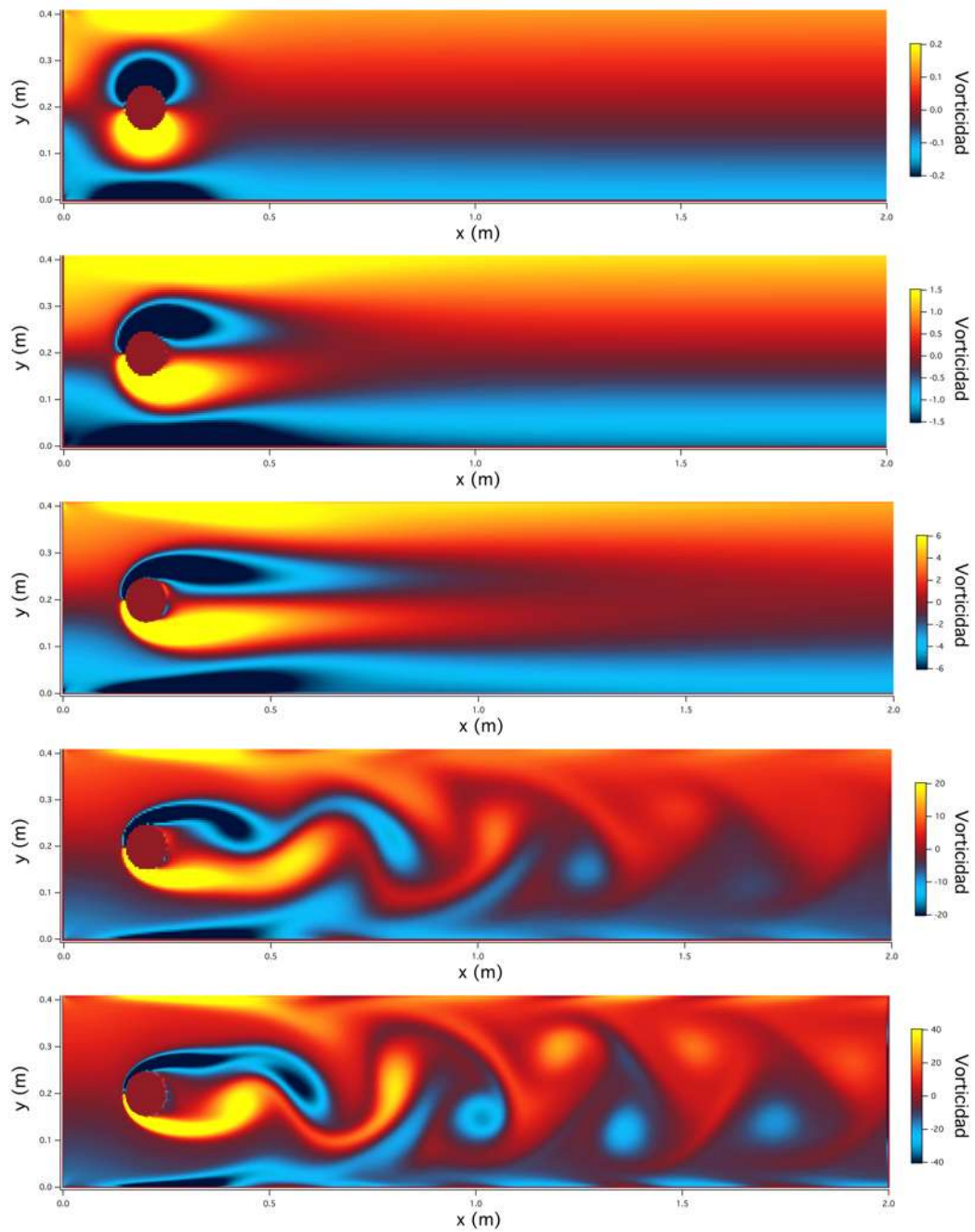


Figura 5.3: Magnitud de la componente z de la vorticidad para el flujo alrededor de un disco con valores del Re de 1, 10, 30, 60 y 100. Se observa cómo la vorticidad aumenta al incrementarse el número de Reynolds y por tanto, la calle de vórtices generada tras el obstáculo se disipa mas lentamente a mas altos Re . Se observa también como el par de vórtices generados se invierten entre si al ser arrastrados por el flujo.

la información lejos del obstáculo. En la figura 5.4 se muestran ejemplos del perfil de velocidades v_x y la vorticidad $(\vec{\nabla} \times \vec{v})_z$ para diferentes posiciones de los detectores y con un $Re = 100$, mientras que en la figura 5.5 los perfiles se muestran para un detector ubicado en $x = 0.3\text{m}$ y diferentes valores de Re .

Los patrones de flujo para los Re más altos generados en las simulaciones, están cambiando de forma recurrente en el tiempo, como se explica en la sección 5.1. Para simplificar este hecho a la hora de extraer la información en todos los casos, los datos se toman a un mismo tiempo fijo, después de que el flujo ha dejado atrás el tiempo físico en que alcanza su estado estacionario. Este tiempo fijo se establece para el número de Reynolds más alto ($Re = 120$), de modo que podemos extraer los datos siempre en el mismo tiempo físico para todo los valores de Re estudiados, y es aproximadamente igual a 36.5s, para una malla de 165 x 201 nodos. En la sección 4.4.2 se puede apreciar el tiempo que le toma al flujo, alcanzar el estado estacionario a diferentes Re . Para estudiar la dependencia de los resultados en el tiempo de extracción, en la siguiente sección se analizarán también las predicciones de las RNA en 20 instantes distintos (separados por intervalos de 2.6s) para números de Reynolds bajos ($Re = 30$) y altos ($Re = 99$).

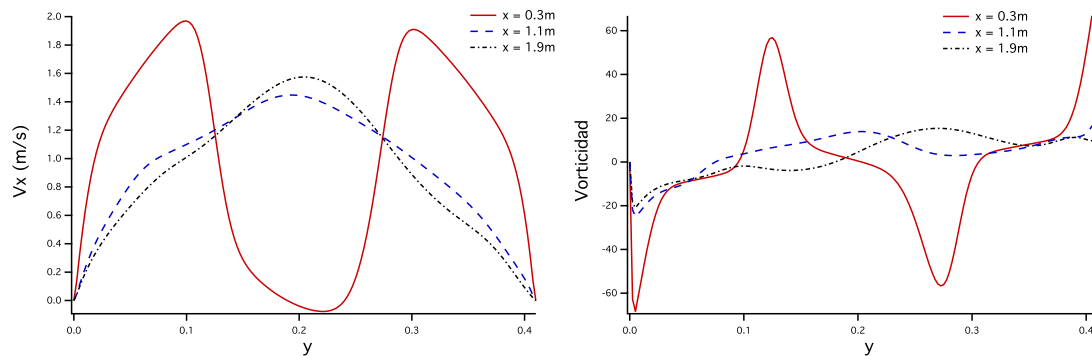


Figura 5.4: Ejemplo de las mediciones obtenidas para diferentes ubicaciones de los detectores para un $Re = 100$. Graficamos la componente x del campo de velocidades (izquierda) y la componente z de la vorticidad (derecha) contra la posición en y , para detectores a 0.3m, 1.1m y 1.9m sobre el eje x .

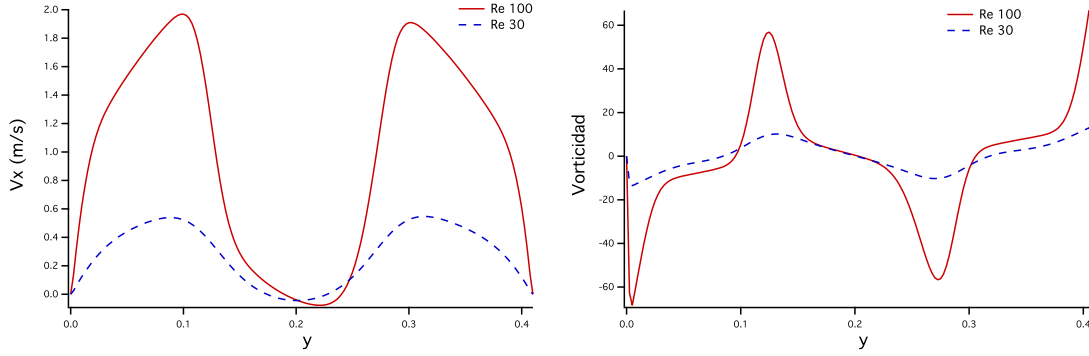


Figura 5.5: Igual que la Figura 5.4 pero en este caso fijamos el detector en $x = 0.3\text{m}$ y cambiamos el valor del número de Reynolds. A la izquierda, se presenta la componente x del campo de velocidades y a la derecha, la componente z de la vorticidad.

En cada uno de estos detectores ubicados a lo largo del dominio computacional, se ha realizado una reducción del número de nodos espaciales, seleccionando sólo la mitad de ellos sobre el eje y de la malla numérica (eligiendo los nodos impares), reduciendo el número de puntos donde se miden los campos vectoriales de 165 a 83. En adición, también se estudió cómo el aprendizaje de las RNAs se ve afectado si este número disminuye aún más, reduciendo el número de nodos de la malla numérica seleccionados para extraer la información, a un total de 1, 4, 6, 11, 21 y 41. En cada caso, los puntos de medición son equidistantes desde los bordes, excepto en el caso de un solo punto situado en el centro del detector.

Las RNAs construidas para cada caso tienen el mismo número de entradas que los valores del campo vectorial extraídos en cada detector, i.e., de 1 a 83 entradas (nodos seleccionados). A su vez están formadas por diez neuronas ocultas con una tangente hiperbólica como función de activación y una única salida con una función lineal restringida únicamente a valores positivos, dado que podríamos no conocer un límite superior para el Re . Por ejemplo, la predicción del Re de una RNA, siguiendo lo desarrollado en el apéndice (E) y utilizando 83 entradas de la v_x , se definirá como

$$Re = \tilde{w}_{0k} + \sum_{j=1}^{10} \tilde{w}_{jk} * \tanh \left(\sum_{i=1}^{83} w_{ij} * v_{x_i} + w_{0j} \right). \quad (5.1)$$

Además, como es habitual en los métodos de aprendizaje automatizado, los

datos se dividen en tres conjuntos diferentes, a saber, entrenamiento, validación y el conjunto de predicción; donde los últimos, son desconocidos para la RNA. En este trabajo, las simulaciones se dividieron para el entrenamiento, la validación y la predicción como:

1. Entrenamiento: 80 simulaciones con valores del Re entre 1 y 116.
2. Validación: 20 simulaciones, diferentes del conjunto de entrenamiento, a partir de $Re = 6$ hasta $Re = 117$.
3. Predicción: 20 simulaciones, diferentes de los conjuntos de entrenamiento y validación, con $Re = 12, 17, 22, 27, 32, 37, 52, 64, 70, 76, 92, 99, 102, 107, 112, 116, 117, 118, 119$ y 120 . Los primeros 15 están en la zona de interpolación mientras que los últimos 5 están en el rango externo de entrenamiento y validación; para probar su rendimiento de extrapolación, se espera que el rendimiento de predicción disminuya lejos de la zona interpolación.

5.3. Resultados del capítulo

Se construyó una base de datos para el flujo alrededor de un disco, conformado por las magnitudes de las propiedades físicas que caracterizan a este fenómeno físico, extrayéndolas en distintas ubicaciones a lo largo del eje x . Información con la cual, se ha realizado una estimación del Re asociado a cada una de estas simulaciones.

Dado que la base de datos fue confeccionada para el caso en el que el diámetro del obstáculo circular es de un cuarto con respecto al ancho del tubo dos dimensional, el análisis que se presenta en esta sección, solo tiene validez bajo dicha relación entre el obstáculo y del tubo. A su vez, el análisis está limitado a un rango de valores del Re comprendido de 1 a 120; considerando que, flujos relacionados con el mismo evento físico (como es el caso del flujo alrededor de un disco), cuyo valor de Re sea idéntico pero cuyas propiedades tengan magnitudes distintas, siempre tendrán el mismo comportamiento físico.

RMSE usando v_x					
	0.3m	0.5m	0.7m	1.1m	1.9m
1	36.652	43.596	9.5976	3.931	3.446
4	1.950	2.077	3.786	1.880	0.904
6	0.421	0.921	1.252	0.528	0.575
11	0.366	0.443	0.597	0.370	0.304
21	0.141	0.479	0.525	0.228	0.302
41	0.133	0.494	0.488	0.227	0.268
82	0.132	0.486	0.486	0.220	0.294

Tabla 5.1: RMSE de la predicción promedio en los puntos de medición a lo largo del eje x a 0.3m, 0.5m, 0.7m, 1.1m y 1.9m; usando v_x , obtenido con 1, 4, 6, 11, 21, 41 y 82 puntos de muestreo. Observe cómo el RMSE aumenta dramáticamente tomando menos de 6 puntos de muestra.

RMSE usando la vorticidad					
	0.3m	0.5	0.7m	1.1m	1.9m
1	42.625	26.614	30.177	21.029	22.663
4	2.135	4.593	3.447	3.748	2.016
6	0.897	1.282	2.634	4.120	1.474
11	0.731	1.850	3.439	1.340	1.267
21	0.298	0.983	2.271	1.333	1.159
41	0.271	0.883	1.671	2.930	1.200
82	0.236	0.928	1.503	1.012	1.026

Tabla 5.2: Igual que en la Tabla 5.1 pero usando la componente z de la vorticidad en lugar de v_x .

Los valores de la tasa de aprendizaje $\gamma = 0.05$ y del momento de impulso $\alpha = 0.5$ definidos en el apéndice E, fueron utilizados, respectivamente, en cada RNA, entrenándolos hasta que el error de validación comenzó a aumentar. En las tablas 5.1 y 5.2, se muestran los valores del error cuadrático medio (RMSE por

sus siglas en inglés) del promedio de las predicciones para diez RNAs entrenadas en cada localización considerada y a su vez, para todos los casos en el conjunto de predicción. Por un lado, al considerar los valores de $v_x(y)$ como información de entrada, se observa cómo el error aumenta a medida que el número de puntos de muestreo disminuye por debajo de 11 puntos, lo cual se muestra en el gráfico izquierdo de la figura 5.6. Por otra parte, considerando la componente z de los valores de vorticidad, los errores fueron mayores que usando v_x . Con más de 41 puntos de muestreo, los valores del RMSE son más parecidos a lo que se muestra en el gráfico derecho de la figura 5.6. De hecho, se realizaron estudios utilizando un mayor número de nodos adyacentes sobre el eje x sin obtener un aumento significativo en la precisión.

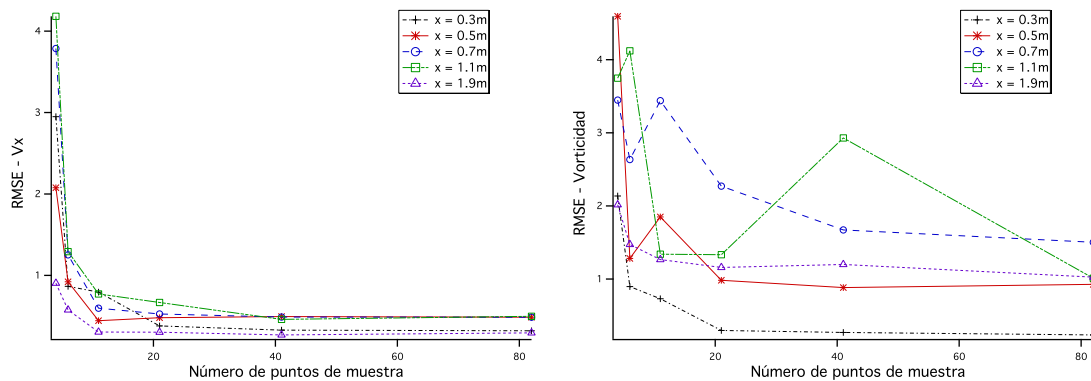


Figura 5.6: RMSE para el promedio del conjunto de predicciones, medido en 0.3m, 0.5m, 0.7m, 1.1m y 1.9m usando 4,6,11,21,41 y 83 puntos de muestreo usando v_x (izquierda) y la componente z de la vorticidad (derecha). En las gráficas, el RMSE utilizando un solo punto como entrada en las RNA no se considera ya que ese caso está fuera de escala, véanse las Tablas 5.1 y 5.2.

Las RNAs que utilizaron 83 puntos de muestreo tuvieron un error relativo inferior al 4% en todas las ubicaciones de los detectores, lo que puede verse en la figura 5.7, donde los errores relativos se trazan como una función del Re utilizando v_x como entrada para la RNA en la gráfica de la parte superior, y la componente z de la vorticidad en la gráfica en la parte inferior. Los resultados son más precisos considerando v_x como información entrante para los detectores lejanos al obstáculo y altos valores del Re . Por el contrario, el uso de la vorticidad como información

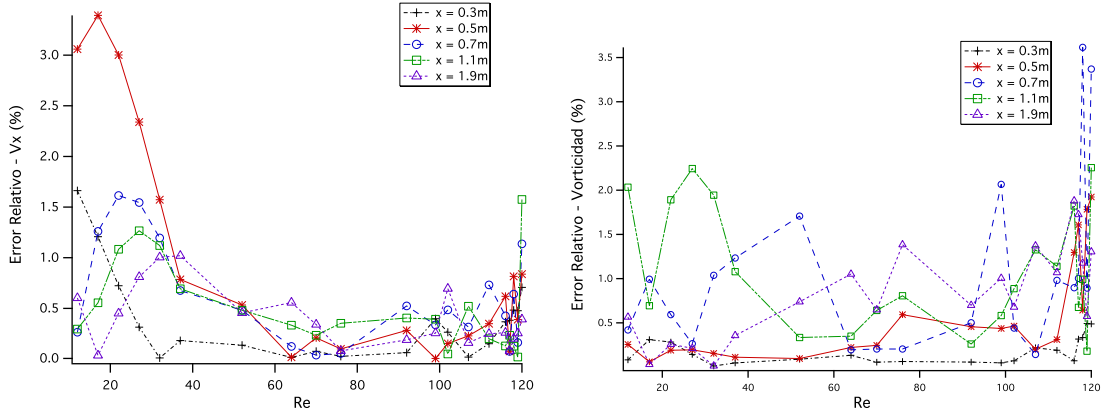


Figura 5.7: Errores relativos en las predicciones utilizando 83 valores de v_x y de la componente z de la vorticidad del fluido como entradas. En la gráfica izquierda las predicciones usando v_x son mejores para fluidos con un moderado Re independientemente del lugar de medición. Sin embargo, usando la vorticidad como entrada, para la RNA la precisión es mejor para bajos Re y para las distancias mas cercanas al obstáculo, tal como se ve en la gráfica derecha. En ambas situaciones, el error aumenta en el régimen de extrapolación (Re 115-120).

de entrada da mejores resultados para valores bajos del Re y distancias cercanas al disco, perdiendo precisión en ubicaciones a 0.7m y 1.1m. Para los casos extrapolados ($Re = 115, 116, 117, 118, 119$ y 120), la precisión también disminuye, pero el error de los mismos no supera el 2% y 4% utilizando v_x y la vorticidad, respectivamente. Este régimen de extrapolación se encuentra fuera del rango de valores para el Re con el que se entrenó a las RNAs, por lo cual, es de esperarse que el error en la predicción aumente.

Con el fin de cuantificar la precisión de las predicciones promediadas de las RNAs, se recurrió a la prueba χ^2 , la cual se considera una prueba que mide la discrepancia entre la distribución de valores de predicción y otra correspondiente a los valores objetivo.

$$\chi^2 = \sum_{i=1} \frac{(Prediccion_i - Objetivo_i)^2}{Objetivo_i} \quad (5.2)$$

cuanto mayor sea el valor de χ^2 , menos verosímil es que las predicciones sean correctas. De la misma forma, cuanto más se aproxima a cero, más ajustadas están

ambas distribuciones entres si, y por tanto, habrá más precisión en las predicciones.

<i>Re</i> predicho usando v_x					
<i>Re</i>	0.3m	0.5m	0.7m	1.1m	1.9m
12	11.801	11.633	11.968	12.035	12.072
17	16.795	16.433	16.786	16.906	17.006
22	21.841	21.340	21.645	21.762	21.901
27	26.915	26.368	26.583	26.658	26.781
32	31.997	31.497	31.617	31.641	31.679
37	37.067	36.709	36.750	36.743	36.623
52	52.071	52.277	52.250	52.250	52.237
64	63.990	63.988	64.080	64.214	64.357
70	69.947	69.853	70.027	70.164	70.238
76	76.020	76.076	75.959	76.268	76.061
92	92.057	92.260	91.518	91.627	91.826
99	99.393	98.994	99.333	98.611	98.747
102	102.269	102.156	102.495	101.950	101.291
107	107.020	106.755	106.662	106.443	107.171
112	111.831	111.609	111.180	111.776	112.279
116	115.574	115.2822	115.506	116.150	116.302
117	116.553	116.912	116.912	116.726	117.095
118	117.430	117.037	117.244	118.149	118.238
119	118.432	118.536	119.193	119.024	119.303
120	119.152	118.996	118.636	118.109	120.471
χ^2	0.025	0.103	0.058	0.054	0.024

Tabla 5.3: Se predijeron *Re* para los diferentes detectores tomando muestras de v_x en 83 puntos y su correspondiente prueba χ^2 , donde las peores predicciones se hicieron a 0.5m del origen.

<i>Re</i> predicho usando la vorticidad					
<i>Re</i>	0.3m	0.5m	0.7m	1.1m	1.9m
12	11.990	12.031	12.050	12.244	12.068
17	17.053	16.990	17.169	16.882	16.995
22	22.062	21.958	22.130	21.584	21.943
27	27.039	26.947	26.929	26.394	26.943
32	32.004	31.951	31.668	31.378	32.004
37	36.983	36.959	36.544	36.601	37.132
52	51.954	51.950	52.887	51.826	52.384
64	63.915	63.858	64.125	63.777	64.673
70	69.961	70.172	70.143	69.552	70.454
76	75.952	75.549	75.845	75.387	77.051
92	92.051	92.420	92.461	91.760	92.642
99	99.047	99.432	101.045	99.576	99.995
102	101.928	102.472	101.551	101.096	101.308
107	107.234	107.215	106.848	105.582	108.467
112	112.212	111.651	110.902	110.724	113.197
116	115.917	114.496	114.959	118.113	113.819
117	116.630	115.119	115.826	117.790	119.018
118	117.607	117.241	113.734	116.829	116.612
119	118.414	116.878	117.937	119.214	119.683
120	119.415	117.692	115.957	117.295	118.436
χ^2	0.001	0.148	0.406	0.214	0.197

Tabla 5.4: Igual que en la Tabla 5.3 pero en lugar de v_x usando la componente z de la vorticidad como entrada para la RNA. La caída en la precisión de las predicciones para el detector ubicado a $x=0.7m$, se debe a que la medición se realiza en la zona en que los vórtices empiezan a ser proyectados y arrastrados por el flujo.

En las Tablas 5.3 y 5.4, se presentan las predicciones promediadas por las RNA considerando 83 puntos, para todos los diferentes valores del Re en todas las

ubicaciones de medición con su correspondiente prueba χ^2 . En estas tablas se puede ver que considerando v_x como entrada, el peor ajuste se hace a 0.5m, mientras que utilizando la componente z de la vorticidad, los peores ajustes se sitúan en 0.7m y 1.1m. Ambos resultados son esperados debido a la complejidad de los vórtices en estas regiones. Los mejores resultados se obtienen para los detectores ubicados a 0.3m y 1.9m, que son, respectivamente, la zona donde se forman las estelas que contienen a los vórtices y la zona donde la calle de vórtices de Von Kármán ya está bien definida.

Estos resultados se obtienen considerando un único tiempo de extracción, el cual se elige en un instante posterior a que el flujo ha alcanzado un estado estacionario; por lo que, en lo que se presentará de aquí en adelante inspeccionaremos la dependencia de las predicciones de las RNAs en diferentes tiempos de extracción a lo largo de la evolución de la simulación numérica. Los resultados se presentan en las figuras 5.8 y 5.9 para dos números diferentes de Reynolds, $Re = 30$ y 99 usando los mismos conjuntos de entrenamiento y validación. En las gráficas solo se representan los resultados para los tres primeros detectores ubicados en $x = 0.3m$, $0.5m$ y $0.7m$. A pesar de que las RNA fueron entrenadas utilizando patrones de tiempo único, fueron capaces de predecir con menos del 5% de error en casi todos los casos. Para $Re=30$, en las primeras 10000 iteraciones el fluido no ha alcanzado el estado estacionario, por lo que el error supera el 5%, después de esto, las predicciones de las RNAs convergen dentro de los resultados esperados, como se muestra en la figura 5.8. En el caso de $Re = 99$, las predicciones oscilan debido a que los patrones de flujo también fluctúan en el tiempo, tal como se esperaba, manteniendo las predicciones en un rango aceptable, lo que puede verse en la figura 5.9.

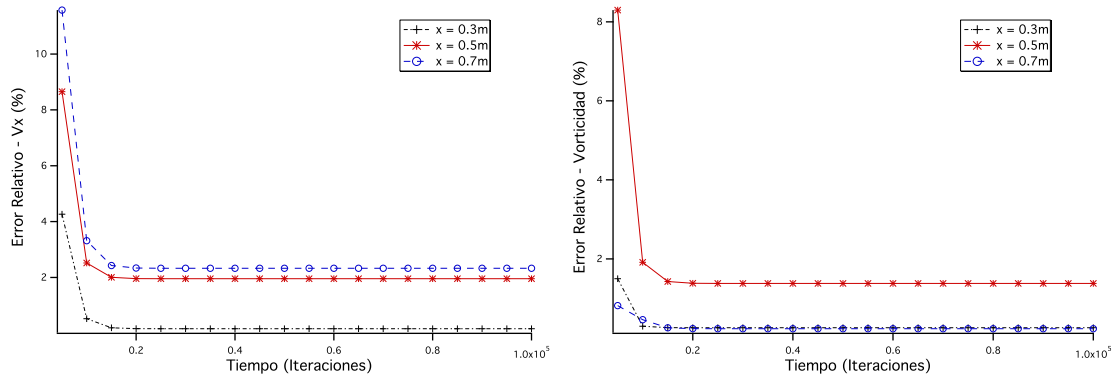


Figura 5.8: Errores relativos en las predicciones utilizando 83 valores de v_x (izquierda) y la componente z de la vorticidad (derecha) del fluido como parámetros de entrada para $Re = 30$ a lo largo del tiempo de simulación. Observamos las fluctuaciones en el error porcentual, como se esperaba ya que los patrones de flujo cambian en el tiempo.

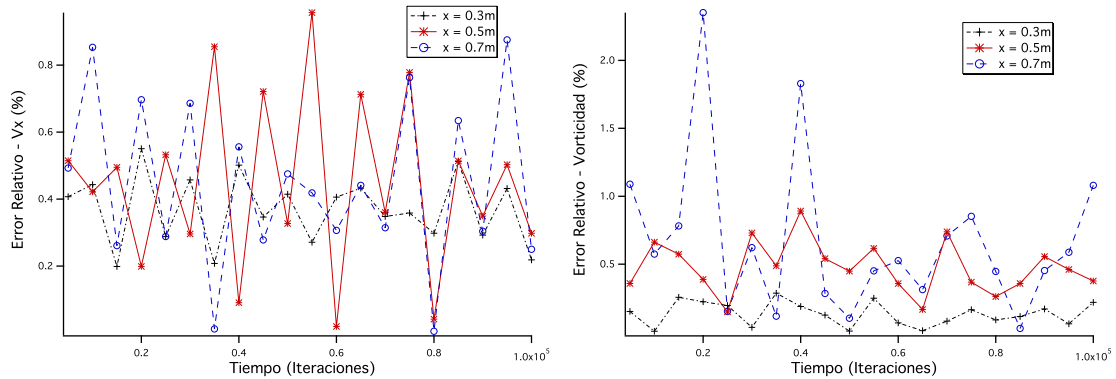


Figura 5.9: Errores relativos en las predicciones utilizando 83 valores de v_x (izquierda) y la componente z de la vorticidad (derecha) del fluido como entradas para $Re = 99$ a lo largo del tiempo de simulación. Observamos algunas fluctuaciones en el error porcentual, como se esperaba ya que los patrones de flujo cambian con el tiempo. Para v_x , los valores mínimos en el error relativo se dan sobre el detector ubicado en $x = 0.3m$, estando por debajo del 0.5 %, mientras que para los otros detectores el error se mantuvo por debajo del 1 %. Para la componente z de la vorticidad, los valores mínimos en el error relativo se dan de nuevo sobre el detector ubicado en $x = 0.3m$, estando por debajo del 0.4 %, mientras que para el detector en $x = 0.7m$ se obtienen los valores más altos, manteniéndose por debajo del 2.5 %.

5.4. Conclusiones del capítulo

A partir de los resultados obtenidos, se observa que usando v_x como datos de entrada, la predicción del Re es más precisa que cuando se usa la componente z de la vorticidad en casi todos los casos, excepto para Re bajos cuando se mide cerca del obstáculo. En los casos de extrapolación, el error aumenta ligeramente a medida que el Re correspondiente se aleja del conjunto para el cual las RNA fueron entrenadas. Las zonas más complicadas de predecir parecen estar en las regiones medias, esto es, en 0.5m, 0.7m y 1.1m, esto podría ser debido a la complejidad del comportamiento del fluido. Es lógico e importante considerar que a medida que se incrementa cada vez más la magnitud del perfil de las velocidades iniciales, la magnitud del campo de velocidades resultante también tendrá que aumentar. Por lo tanto, se puede establecer que las RNAs logran encontrar un patrón claro que relaciona el aumento en la magnitud del campo de velocidad con el respectivo número de Reynolds. Recalcando el hecho de que a pesar de ello, emplear la vorticidad permite mejores resultados en la zona inmediatamente posterior al obstáculo, debido a que allí se encuentran las estelas donde se forman los vórtices con una magnitud también creciente respecto al Re . Por lo que, tal como se ve en la figura 5.6, las RNAs encuentran también un patrón característico relacionado con la vorticidad y el Re .

Otro resultado que vale la pena notar es el número mínimo de puntos sobre los detectores necesarios para obtener resultados confiables. En nuestros experimentos ese número fue de al menos 11. Esto implica que, al realizar una única medición en el tiempo de las magnitudes físicas que caracterizan al sistema en el flujo alrededor de un disco, es necesario medir al menos en once ubicaciones distintas a lo largo del eje y, para tener un resultado confiable.

Se puede concluir que el código desarrollado con LBM permite construir una base de datos confiable y amplia, tal que permite el estudio del flujo alrededor de un disco para un rango de valores del Re de 1 a 120, a la vez que las RNAs presentadas en este trabajo son lo suficientemente robustas para estimar los valores del número de Reynolds midiendo el perfil de velocidades o la vorticidad del fluido. Este enfoque puede utilizarse para obtener los parámetros iniciales utilizados en la simulación, como son, el diámetro del obstáculo, la velocidad inicial del flujo

u otras propiedades físicas que caracterizan al problema, tal como se puede ver similarmente en [88, 89]. Con esto en mente, se busca una mejor implementación de un algoritmo de aprendizaje automatizado capaz de caracterizar, entre otros temas interesantes, los bloqueos de flujos en una tubo dos dimensional.

Capítulo 6

Reconocimiento de un obstáculo en un flujo en un tubo dos dimensional

La presente sección está basada en el artículo titulado *Recognition of an obstacle in a flow using artificial neural networks* [89], publicado en la revista *Physical Review E*. El cual tiene como enfoque principal, el estudio de las obstrucciones que se presentan en tuberías sólidas rectas. Las obstrucciones en los tubos que transportan fluidos son un problema de importancia en la sociedad moderna, ya que están presentes en la vida cotidiana de las personas, así como en las redes urbanas de tuberías [90], la salud pública [91] o la ingeniería industrial [92].

Por un lado, el acelerado crecimiento urbano e industrial en las ciudades modernas, implica que las obstrucciones en las redes de tuberías son un problema muy común, requiriendo una reacción rápida para resolverlo. Estos bloqueos pueden ser causados por residuos químicos o físicos, así como por defectos estructurales de diferentes fuentes. Las tuberías son una de las formas más usuales de transportar fluidos en las industrias energética [93], química [94], manufacturera [95, 96] y del agua [97]; así como en casas, edificios y el alcantarillado urbano [98, 99, 100]. Evidentemente, en todos estos casos, los requerimientos de un pronto suministro de líquido obstruido son cruciales.

Por otro lado, en el sector sanitario, la atención de problemas médicos por obstrucciones y/o bloqueos en los innumerables conductos que transportan flujos biológicos alrededor del cuerpo humano son muy frecuentes, y en muchos casos

pueden ser fatales para el paciente. Para los conductos biológicos, las obstrucciones pueden ser causadas por cirugías previas, cuerpos extraños, infecciones y deformaciones, entre muchas otras. Así, los casos como las obstrucciones en el aparato digestivo [101, 102] o en el sistema cardiovascular [103, 104], se relacionan con emergencias médicas que en muchos casos pueden implicar el uso de procedimientos clínicos invasivos, lo que requiere de una atención inmediata.

Todos estos escenarios motivan el interés científico en la detección y comprensión de la forma y localización de objetos que bloquean u obstruyen los flujos [105, 106, 107]. Al igual que en el capítulo anterior, utilizamos el método LBM como en [86], para la construcción de un conjunto de bases de datos representativas del problema de las obstrucciones que impiden el correcto flujo de un fluido en un conducto bidimensional, y las redes neuronales artificiales, como una herramienta de categorización del flujo para reconocer estas obstrucciones. En este contexto, investigaciones como [108, 109, 110, 111, 112, 113], han propuesto diferentes metodologías para identificar obstáculos, fugas o defectos dentro de tuberías industriales o urbanas. En particular, las RNAs se han aplicado en problemas de dinámica de fluidos, principalmente en la identificación de patrones de fases de flujo, tal como se desarrolla en [114, 115]. También se han utilizado como herramienta para simulaciones de fluidos computacionales más rápidas y predicción de turbulencias [116, 117, 88] o para la clasificación de defectos en estructuras tubulares mediante imágenes [118].

Con esta motivación, el objetivo de este capítulo es reconocer la forma y ubicación de un obstáculo que obstruye un tubo dos dimensional, cuyas dimensiones fueron escogidas teniendo en cuenta tuberías y redes que transportan fluidos para su uso en sistemas industriales y urbanos. Para ello, se ha entrenado RNAs usando información física del flujo. Nuestro problema tiene en cuenta diferentes escenarios: cambiar el diámetro y la ubicación del obstáculo, viscosidad y velocidad de flujo inicial, obteniendo información física relevante como velocidad, vorticidad o presión dinámica del fluido a lo largo del dominio numérico. En particular, se ha considerado la componente x del campo de velocidades del flujo (v_x) o la presión dinámica (q) como la información fundamental a analizar por la RNA. Se eligió

una relación entre el ancho del tubo y el diámetro del obstáculo sumergido desde $1/80$ hasta casi un valor de 1, esto es relevante en escenarios físicos donde el flujo se ve interrumpido por obstrucciones que pueden ser desde pequeños obstáculos hasta tuberías completamente bloqueadas.

6.1. Simulaciones numéricas

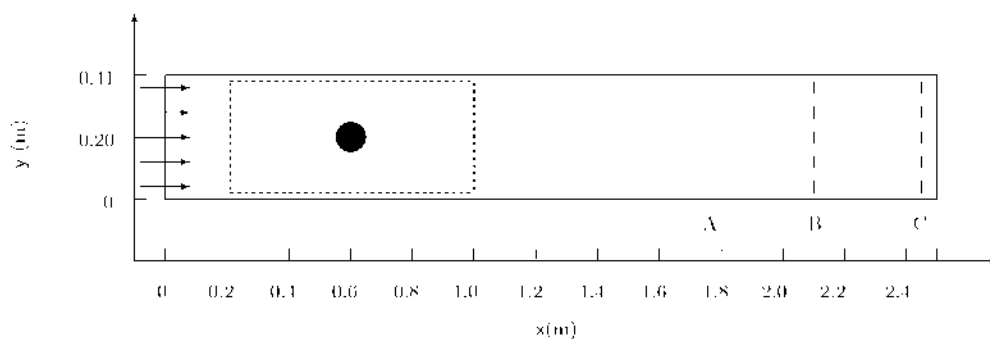


Figura 6.1: Una representación esquemática del tubo dos dimensional, el obstáculo representado con un disco y los diferentes sitios de medición a través del tubo ubicados en $A = 1.75$ m, $B = 2.10$ m, y $C = 2.45$ m, marcados con líneas discontinuas. La región del rectángulo punteado ilustra el área utilizada como objetivo para la RNA.

La simulación del flujo bidimensional alrededor de un obstáculo, se realizó considerando todos los detalles presentados en la sección 4.4. Para los casos de estudio, se consideró un obstáculo cilíndrico sumergido en un medio infinito (flujo libre), con un flujo moviéndose en la dirección x positiva. El obstáculo, que en dos dimensiones es representado por un disco, se fija perpendicular al plano $x - y$, por lo tanto, está representado por un disco en la simulación bidimensional, tal como se muestra en la figura 6.1. Imponemos condiciones de frontera a la salida del flujo lo suficientemente lejanas como para que los parámetros característicos del flujo no se vean afectados por los cálculos internos realizados por el algoritmo numérico [59]. Para las paredes sólidas que representan al tubo dos dimensional y al obstáculo, empleamos una condición de frontera del tipo *full bounceback* [12]. La

condición de frontera que representa al fluido entrante fue configurada con un perfil de velocidades dado como flujo entrante para el modelado numérico, de manera que el flujo después del obstáculo presenta un patrón relacionado con el perfil de velocidades de entrada, el diámetro del obstáculo y su ubicación.

Se define β como el valor de la razón entre el diámetro del obstáculo y la anchura del tubo. El diámetro del obstáculo se cambia para valores de β que van desde $\beta = 0.0122$, representando pequeños elementos de bloqueo, hasta valores cercanos a $\beta = 1$, representando obstrucciones de casi el tamaño total del diámetro del tubo. Para el dominio de la simulación se utilizó una malla de $165 \times 1,000$ nodos. Aunque el código LBM tiene unidades adimensionales, el sistema se ha adaptado a las dimensiones físicas siguiendo la referencia [57]. Se han escogido las unidades físicas de tal manera que el dominio numérico corresponde a una longitud total de $L_y = 0.41\text{m}$ en la dirección vertical y $L_x = 2.5\text{m}$ a lo largo de la horizontal. Se consideró un flujo de Poiseuille en un régimen estacionario con una densidad de $\rho = 10^3\text{kg/m}^3$, una viscosidad cinemática de $\nu = 10^{-3}\text{m}^2/\text{s}$, como se utiliza en [86]. La ubicación de todos los obstáculos estudiados se encuentra en $x = 0.6\text{m}$ con respecto a la longitud del tubo, y su posición sobre el eje y se describirá en la siguiente sección.

Se realizaron una gran cantidad de simulaciones numéricas diferentes, tal como se presenta en los casos descritos en la próxima sección, considerando el perfil de velocidades entrante, el diámetro del obstáculo (cambiando los valores de β), y la posición del obstáculo con respecto al eje y , como los únicos parámetros de entrada que se habrán de modificar a fin de construir las bases de datos deseadas para la RNAs. Todas estas simulaciones numéricas se detuvieron hasta que el sistema alcanzó una estabilidad neutral, lo que se produce antes de completar 30,000 iteraciones, o un tiempo físico de aproximadamente 16 segundos.

6.2. Metodología

A fin de realizar la estimación del tamaño y la ubicación del obstáculo a partir de las bases de datos construidas mediante LBM, hemos definido una región

Caso	Obstáculos	Posiciones en y	Velocidades del flujo	Espacio	Tiempo
1a	80	1	1	83	1
1b	80	1	1	1	300
1c	80	1	1	3	300
2a	4	43	1	83	1
2b	4	43	1	1	300
2c	4	43	1	3	300
3	11	1	12	10	1

Tabla 6.1: Parámetros utilizados en las simulaciones para los diferentes casos estudiados. La columna llamada “Obstáculos” representa el número de diferentes diámetros de los obstáculos. La columna “Posiciones en y ”, da el número de diferentes ubicaciones del centro de los obstáculos a lo largo del eje y . La columna definida como “Velocidades del flujo” se refiere al número de diferentes velocidades de entrada del flujo utilizadas en el escenario 3. Mientras tanto, la columna “Espacio” está relacionada con el número de sensores equidistantes implementados a lo largo de un sitio de medición. Finalmente, la columna “Tiempo” corresponde al número de pasos de tiempo extraídos en la evolución numérica realizada sobre cada uno de los sensores numéricos considerados.

objetivo en torno a la que se encuentra inmerso el obstáculo. En esta región, el tamaño y la posición del obstáculo se estiman en términos de la proporción del obstáculo sólido y el fluido que lo rodea, esto se explicará con más detalle mas adelante.

También se han colocado diferentes sensores numéricos a través del tubo en distintos puntos de medición a lo largo del eje x de la malla numérica, una representación esquemática de esto se muestra en la figura 6.1. Los sitios de medición están situados en $x = 1.75\text{m}$, 2.10m , 2.45m , a los que llamaremos A, B y C, respectivamente. Con esto en mente, las RNAs fueron seleccionadas porque son flexibles en términos de los datos de entrada que pueden admitir, por que son de fácil implementación, superando a las regresiones lineales; considerando que no se contaba con alguna otra alternativa ya implementada a la par de las mencionadas..

En las siguientes subsecciones se describen los casos de estudio, la estruc-

tura de las RNAs, la metodología utilizada para la información de entrada y los datos objetivo de las RNAs, así como la selección de los conjuntos de formación y validación, que se utilizan para ajustar los parámetros de las RNAs, y el conjunto de predicciones para los que se muestran los resultados.

6.2.1. Construcciones de las bases de datos y casos de estudio

La capacidad de las RNAs, para predecir el tamaño y la ubicación de los obstáculos a partir de las bases de datos obtenidas usando LBM, se prueba en tres casos principales diferentes, los cuales se describen a continuación:

1. Se realizó un total de 80 diferentes simulaciones numéricas para un mismo obstáculo bidimensional con simetría cilíndrica sumergido en el flujo y situado en el centro del eje y , es decir, en la mitad del diámetro de un tubo dos dimensional. Para éstas, se emplearon distintos tamaños para los obstáculos con diámetros que van de $d = 0.005\text{m}$ hasta $d = 0.395\text{m}$ en pasos de 0.005m , es decir, valores de β que van de $\beta = 0.012$ hasta $\beta = 0.964$ en pasos de 0.0122 , más un obstáculo minúsculo de 0.001m equivalente a $\beta = 0.0024$. En la figura 6.2 se presentan resultados de las simulaciones realizadas en este caso para algunos valores de β característicos; en ella pueden observarse los distintos comportamientos que presenta el flujo respecto al tamaño del obstáculo; pasando desde una pequeña perturbación en el flujo hasta prácticamente una completa obstrucción del mismo.

De estos casos, seleccionando como predicción los obstáculos con diámetros que van de $d = 0.02\text{m}$ hasta $d = 0.395\text{m}$ en intervalos de $\Delta d = 0.025\text{m}$. Por otra parte, el grupo de validación consta de los obstáculos con $d = 0.025\text{m}$ a $d = 0.375\text{m}$ con $\Delta d = 0.025\text{m}$ también. El resto de los 49 obstáculos se utilizan como conjunto de entrenamiento. Este caso se divide en tres subcasos diferentes:

- a) Se consideran como vectores de entrada para la RNA a los perfiles de v_x o q , a $t = 16$ segundos al final de la evolución numérica. Para simplificar

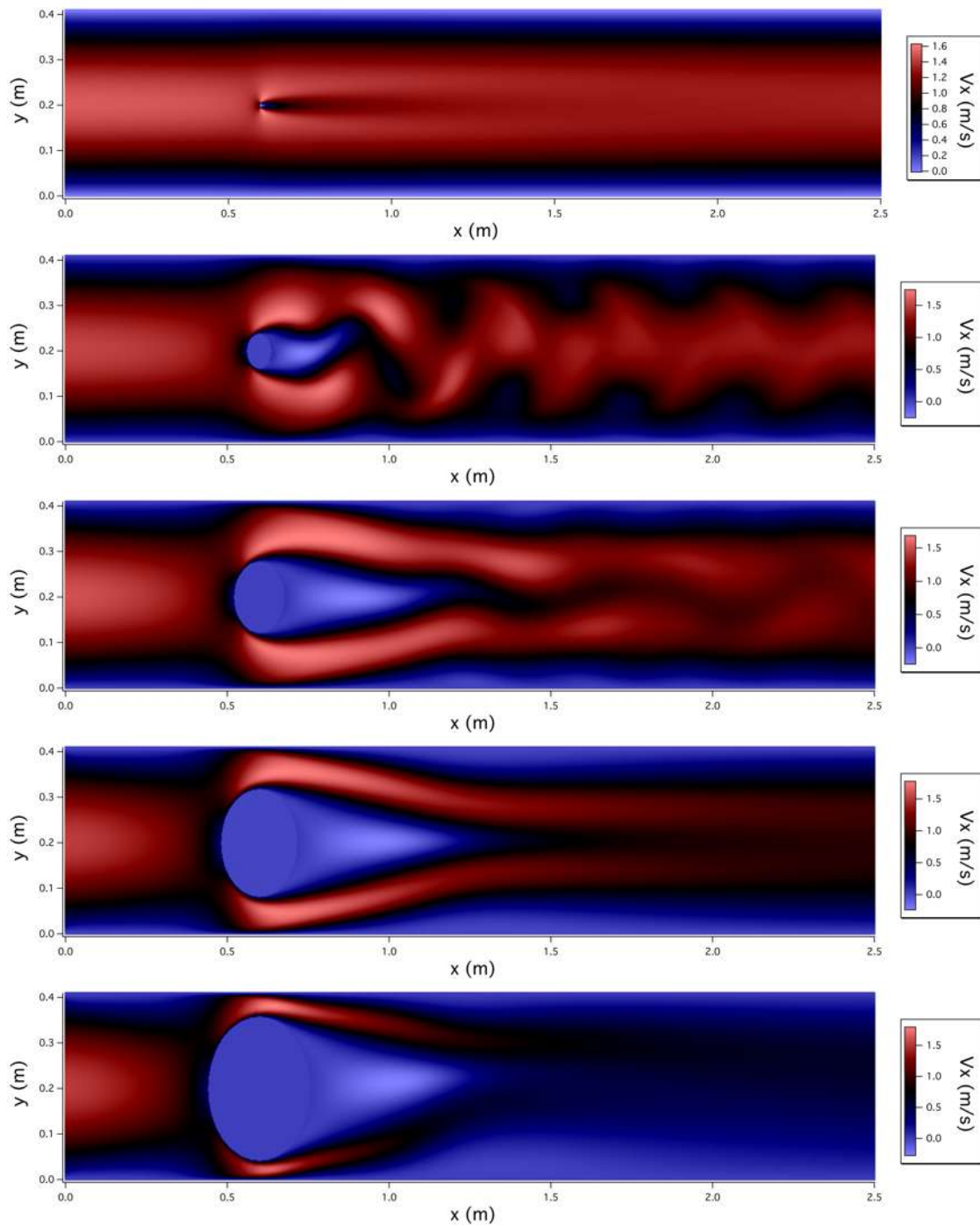


Figura 6.2: Magnitud de v_x para el flujo alrededor de un disco con un flujo de Poiseuille de entrada con una magnitud de $v_c = 1,5$ m/s. Notese que los vórtices formados después del obstáculo son conducidos en la dirección del flujo, generando la característica calle de vórtices de Karman. Se presentan en orden descendente los resultados para valores de $\beta = 0.012, 0.183, 0.378, 0.573$ y 0.768 .

la estructura de la RNA, la información es extraída en sólo 83 de los 165 nodos de la malla numérica. Este enfoque se examina para estudiar si la extracción de los datos físicos, tales como v_x o q , disponibles en un tiempo y distancia fijos es suficiente para dar una estimación adecuada del tamaño del obstáculo. En la figura 6.3 se presenta un ejemplo de la base de datos para el perfil de v_x construido para este subcaso.

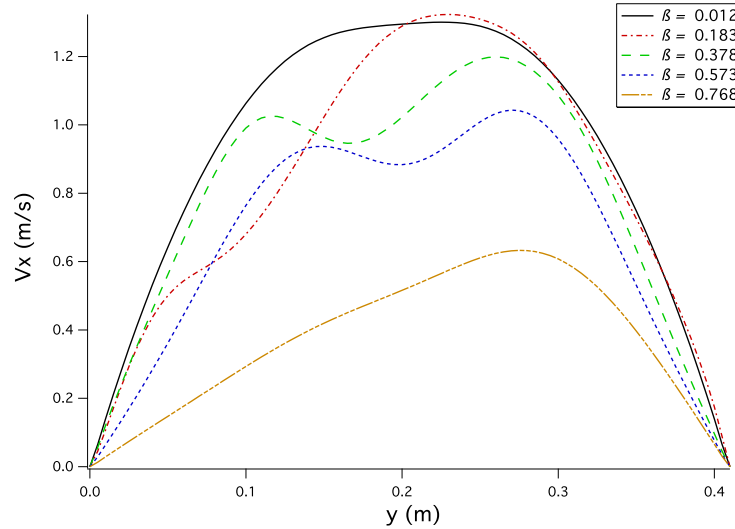


Figura 6.3: Ejemplo de las mediciones obtenidas para diferentes diámetros del obstáculo considerando $v_c = 1.5\text{m/s}$ en el sitio de medición B. Se dibuja v_x contra la posición en y , para obstáculos con $\beta = 0.012, 0.183, 0.378, 0.573$ y 0.768 .

- b) Se considera como información de entrada para la RNA, la evolución de v_x o q a lo largo de 300 pasos de tiempo, de $t = 0\text{s}$ a $t = 16\text{s}$ medidos en un solo nodo al que denotaremos como sensor, situado en el centro del tubo dos dimensional, es decir, $y = 0.210\text{m}$, utilizando la simetría del conducto. Con esto, se inspeccionan los límites de las predicciones considerando el menor número de sensores posible, con la ventaja de que puede tomar medidas sobre un lapso de tiempo fijo. En la figura 6.4 se presenta un ejemplo de la base de datos construida para este subcaso.

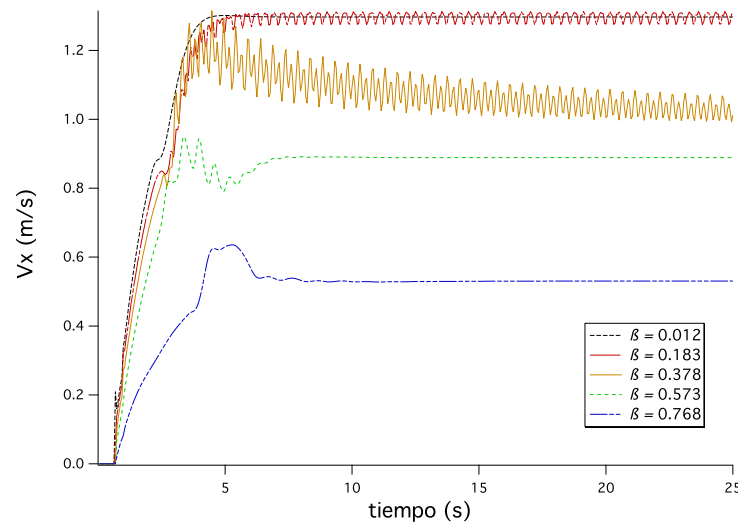


Figura 6.4: Series de tiempo de la componente x del campo de velocidades medida en $y = 0.210\text{m}$ en el sitio de medición B. Se presentan los resultados obtenidos para valores de $\beta = 0.012, 0.183, 0.378, 0.573$ y 0.768 .

c) El mismo procedimiento que en el caso 1b, pero además añadimos otros 2 sensores equidistantes, es decir, tenemos tres sensores localizados en $y = 0.105\text{m}, 0.210\text{m}$ y 0.315m , de nuevo sobre los sitios de medición A, B y C. En este caso, se estudia si el aumento del número de sensores, en comparación con el caso anterior, aumenta la precisión de las predicciones. En la figura 6.5 se presenta un ejemplo de la base de datos construida para este subcaso

2. En contraste con el caso 1, se consideraron sólo tres tamaños diferentes de obstáculos con valores de $\beta = 0.122, 0.244$ y 0.488 , esto es, $d = 0.05\text{m}, 0.1\text{m}$ y 0.2m respectivamente. En cada simulación, se cambió la posición del obstáculo entre 43 posiciones diferentes sobre el eje y , de tal manera que el obstáculo podría estar cerca del centro del tubo dos dimensional a lo largo del eje y , o cerca de sus paredes; proporcionando un total de 139 simulaciones.

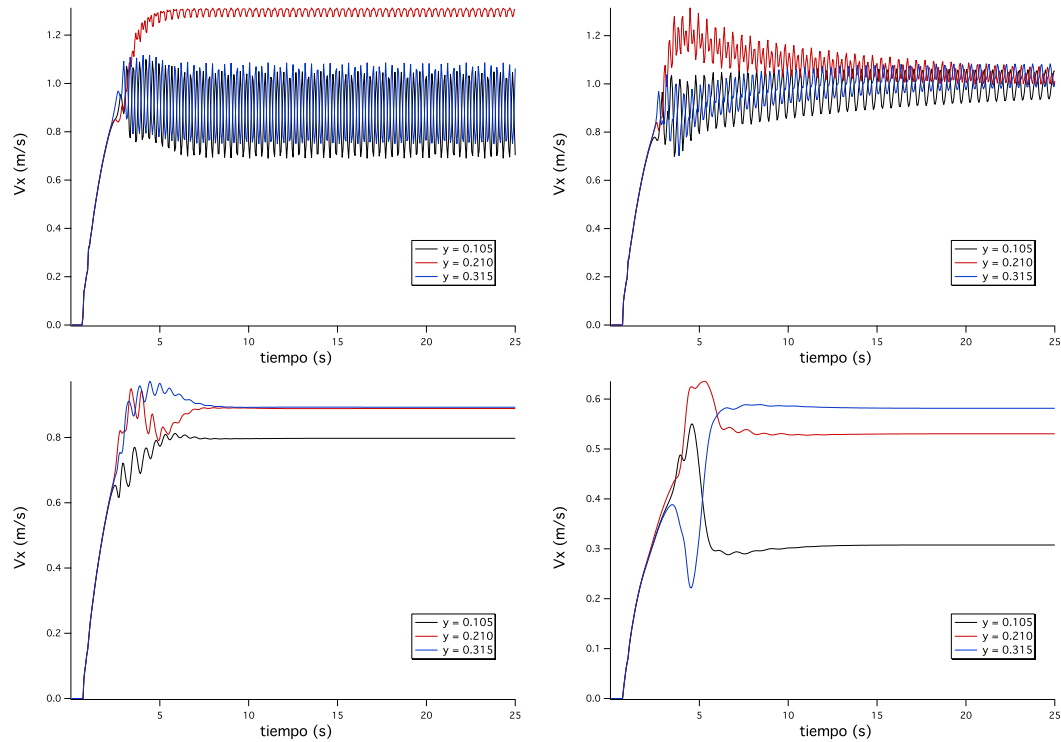


Figura 6.5: Series de tiempo de la componente x del campo de velocidades medidas en $y = 0.105\text{m}$, 0.210m y 0.315m en el sitio de medición B. Se presentan los resultados obtenidos para valores de β de 0.183 (arriba izquierda), 0.378 (arriba derecha), 0.573 (abajo izquierda) y 0.768 (abajo derecha).

En la figura 6.6 se presentan resultados de las simulaciones realizadas para este caso, considerando solo algunos tamaños característicos del obstáculo; en ella puede observarse los distintos comportamientos que presenta el flujo respecto al tamaño del obstáculo cuando éste tiene su centro muy cerca de una de las paredes del tubo. Para cada tamaño del obstáculo se seleccionaron 22 simulaciones para los conjuntos de entrenamiento y validación, y las 21 simulaciones restantes, que están espaciadas a partes iguales sobre el eje y , se utilizaron para el conjunto de predicción.

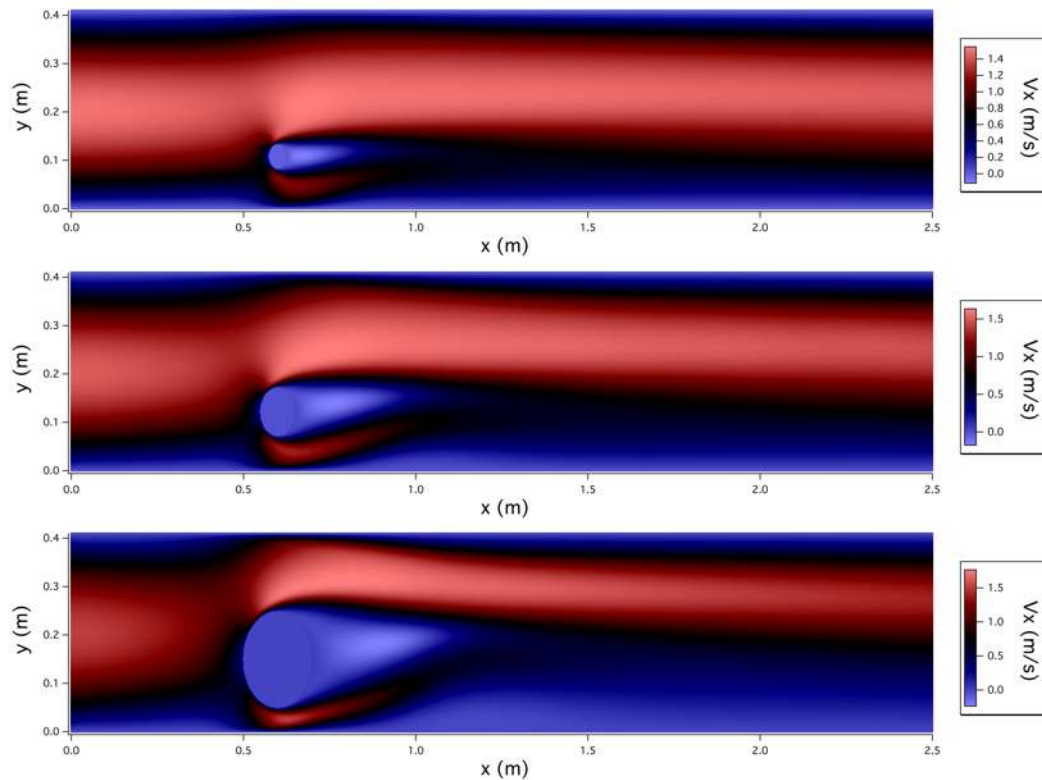


Figura 6.6: Magnitud de v_x para el flujo alrededor de un disco con un flujo de Poiseuille de entrada con una magnitud de $v_c = 1,5\text{m/s}$ y ubicado en $y = 0.10875\text{m}$. Se presentan en orden descendente los resultados para obstáculos con diámetros de 0.05m , 0.1m y 0.2m . A diferencia de la figura 6.2, se observa el comportamiento del flujo cuando el obstáculo se encuentra muy cerca de la frontera sólida inferior, mostrando que la estela inferior que se forma tras el obstáculo no se forma debido al efecto de las fuerzas viscosas que se ejercen en proximidad con la frontera sólida.

Finalmente, para probar la capacidad de las RNAs para la estimación de un tamaño de obstrucción completamente desconocido se incluyó en el conjunto de predicción 21 simulaciones igualmente espaciadas sobre el eje y con un diámetro de obstáculo de $\beta = 0.366$. Este escenario, también se dividió en los tres subcasos diferentes siguiendo la misma descripción que en 1a, 1b y 1c.

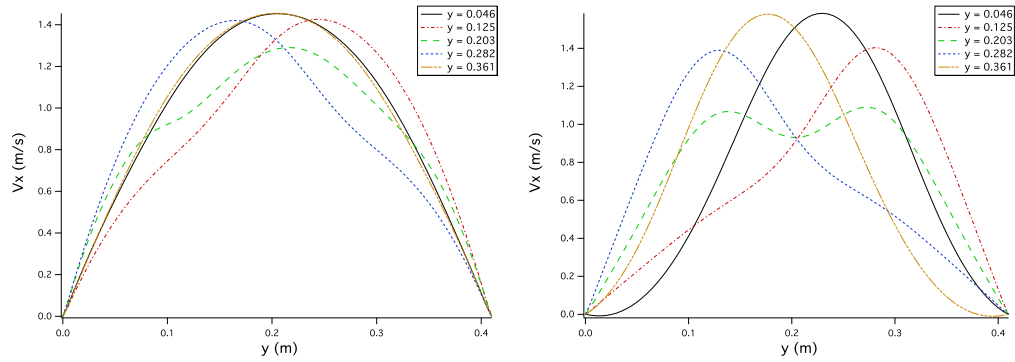


Figura 6.7: Ejemplo de las mediciones obtenidas para diferentes ubicaciones de obstáculos con diámetro de 0.05m (izquierda) y 0.2m (derecha) en torno al eje y considerando una $v_c = 1.5\text{m/s}$ en el sitio de medición B. Se dibuja v_x contra la posición en y , para obstáculos ubicados en $y = 0.046\text{m}$, 0.125m , 0.203m , 0.282m y 0.361m .

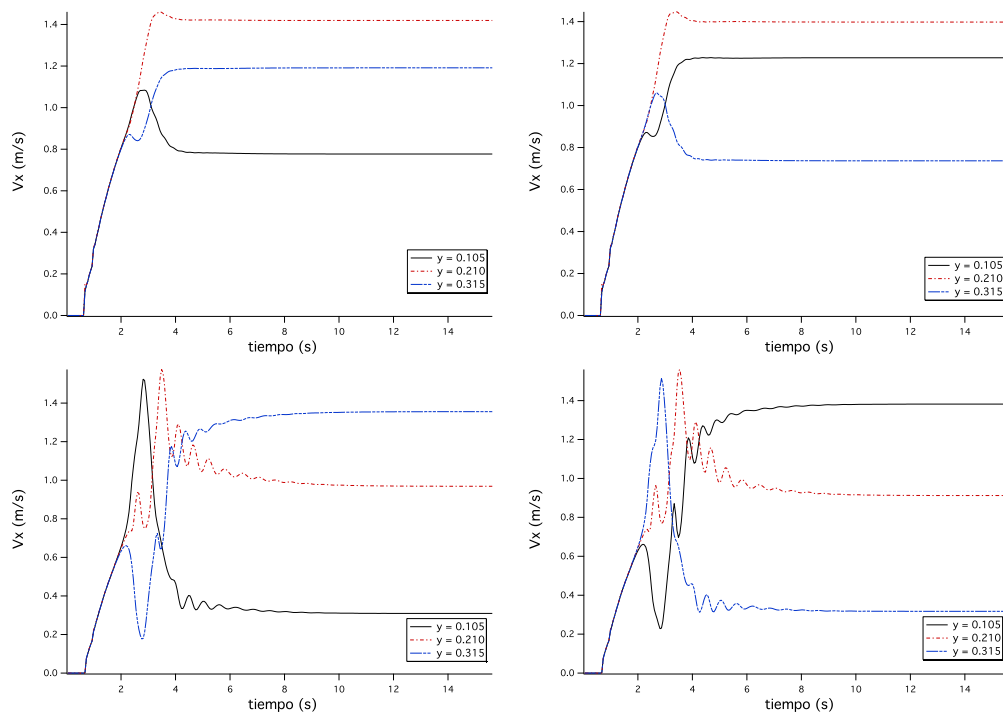


Figura 6.8: Series de tiempo de la componente x del campo de velocidades medidas en $y = 0.105\text{m}$, 0.210m y 0.315m en el sitio de medición B. Se presentan los resultados obtenidos para un obstáculo pequeño con diámetro de 0.05m ubicado en $y = 0.10875\text{m}$ (arriba izquierda) y 0.3135m (arriba derecha), y otro mayor con diámetro de 0.2m ubicado en $y = 0.10875\text{m}$ (arriba izquierda) y 0.3135m (arriba derecha).

En la figura 6.7 se presenta un ejemplo de los valores medidos para la componente x de la velocidad extraídos en el sitio de medición B considerando el obstáculo más pequeño y el más grande analizados en este caso, en cinco distintas ubicaciones a lo largo del eje y . Se observa que para el obstáculo de 0.2m de diámetro los perfiles se distinguen claramente el uno del otro, mientras que para el más pequeño, los perfiles de la velocidad son muy parecidos cuando el obstáculo se encuentra muy cerca de las paredes del tubo.

A su vez, en la figura 6.8 se presentan las series de tiempo para la componente x de la velocidad para esos mismos obstáculos en ubicaciones cercanas a las paredes.

3. En este caso, se analizó una situación similar al caso 1 donde el obstáculo se ubica de nuevo en $y = 0.210\text{m}$ y $x = 0.6\text{m}$. Con la diferencia de que hemos cambiado el flujo entrante cuya velocidad característica había sido de $v_c = 1.5\text{m/s}$ en los casos 1 y 2, por un conjunto de diferentes valores que van desde $v_c = 0.15\text{m/s}$ a 1.8m/s , en pasos de $\Delta v_c = 0.15\text{m/s}$. Este análisis se realiza para examinar una extensión del caso 1a, con diferentes velocidades de flujo de entrada y con once distintos tamaños para los obstáculos, tal como se muestra en la tabla 6.2.

En detalle, en este caso, se consideraron diez valores equidistantes a lo largo del eje y de v_x o q antes del obstáculo, a $x = 0\text{m}$ según los esquemas de la figura 5.1, lo cual implica tomar el perfil del flujo de Poiseuille entrante, y otros diez valores equidistantes de v_x o q en el sitio de medición B, análogo a lo que se hacía antes en el caso 1a. En la figura 6.9 se presentan un ejemplo del comportamiento del flujo para este caso, cuando no solo se varía el diámetro del obstáculo sino también la velocidades del flujo entrante. Concretamente se pueden ver los resultados obstáculos con diámetros de 0.04m, 0.2m y 0.36m, para velocidades de 0.6m/s y 1.8m/s.

Parámetros para el caso 3		
β	Velocidad (m/s)	Sensor Ubicación
0.0122	0.15	11 (0.025m)
0.0976	0.30	27 (0.065m)
0.1952	0.45	43 (0.105m)
0.2928	0.60	59 (0.145m)
0.3904	0.75	75 (0.185m)
0.4880	0.90	91 (0.225m)
0.5856	1.05	107 (0.265m)
0.6832	1.20	123 (0.305m)
0.7808	1.35	147 (0.365m)
0.8784	1.5	163 (0.405m)
0.9638	1.65	
	1.8	

Tabla 6.2: Base de datos para diámetros, velocidades del flujo de entrada y ubicaciones de los sensores utilizados en el caso 3. La última columna define la ubicación de los diez sensores a lo largo del eje y en la malla, entre paréntesis se muestran sus valores equivalentes en unidades físicas. Los valores de v_x y q se extrajeron de estos sensores numéricos tanto en $x = 0\text{m}$ como en $x = 2.10\text{m}$ a través del tubo dos dimensional, donde el último corresponde al sitio de medición B.

Con estos argumentos, los datos de entrada de las RNAs consisten en 20 valores para cada una de las 132 simulaciones producidas. Con el fin de explorar el rendimiento de la RNA y su dependencia de la elección de los conjuntos de muestras para el entrenamiento, validación y predicción, hemos seleccionado los patrones de forma aleatoria. Los conjuntos de validación y predicción tienen 20 patrones cada uno, mientras que el conjunto de entrenamiento tiene 92.

Todos los casos de estudio simulados se resumen en las tablas 6.1 y 6.2.

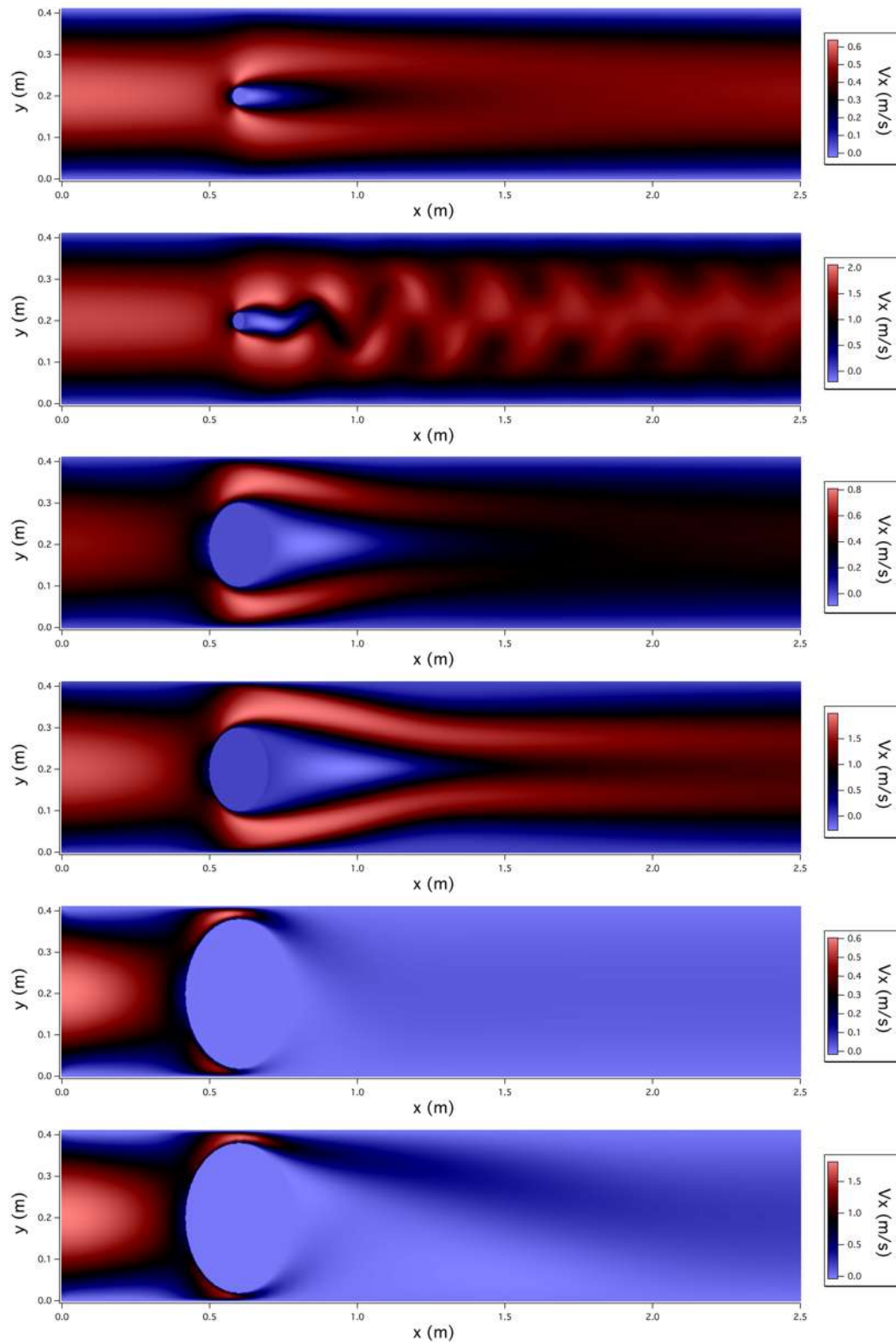


Figura 6.9: Magnitud de v_x del flujo alrededor de un disco ubicado en $y = 0.21$ m con dos diferentes velocidades características, $v_c = 0.6$ m/s y 1.8 m/s. Se presentan en orden descendente los resultados para valores de $\beta = 0.0976$, 0.488, 0.878. A diferencia de la figura 6.2, se observa el comportamiento del flujo cuando para un mismo obstáculo, el perfil de velocidades del flujo de Poiseuille entrante tiene una baja o alta velocidad máxima.

6.2.2. Región objetivo

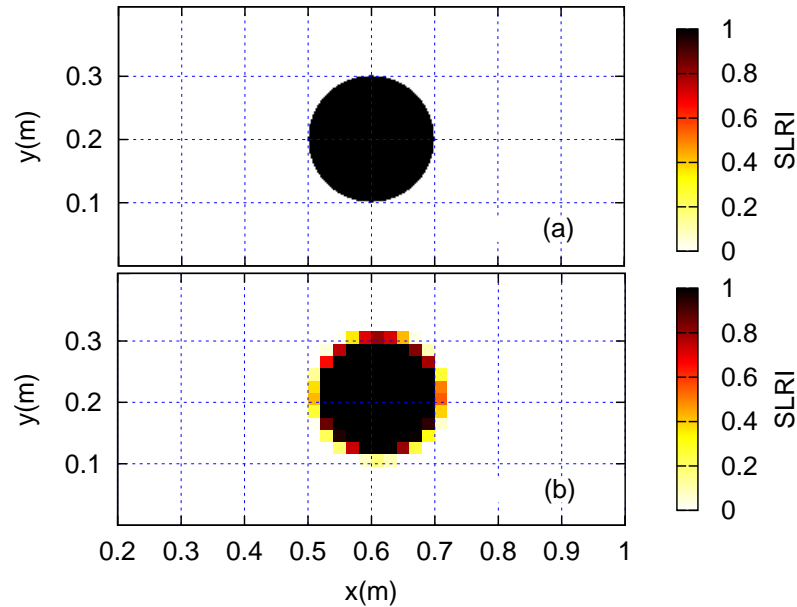


Figura 6.10: En el gráfico (a) se muestran los nodos sólidos de la malla de la simulación con LBM que conforman al obstáculo, mientras que en (b) se muestra la representación del obstáculo a través de la malla objetivo. El menor número de celdas utilizadas en la malla objetivo en comparación con la malla de LBM causa una pérdida de resolución en la malla. La caja de colores representa el índice de relación sólido/líquido (SLRI), donde un valor 0 significa que una celda está compuesta únicamente por elementos de fluido y un valor de 1 representa una celda completamente ocupada por elementos sólidos. Las líneas de la malla mostradas en las figuras son sólo para referencia y no representan el tamaño real de una celda objetivo.

Dado que se usan RNAs entrenadas con un aprendizaje supervisado, es necesario proveer los objetivos, relacionados con el tamaño, forma y ubicación del verdadero obstáculo. Para ello, se ha definido como región objetivo, a una región dentro del tubo que contiene al obstáculo y su entorno inmediato. Sin embargo, si se considera que cada uno de los nodos del dominio de la simulación con LBM que están comprendidos dentro de la región objetivo, sean el objetivo de la RNA, como se ilustra en la figura 5.1, entonces dicha RNA tendrá un gran número de salidas, por lo que resultará muy caro desde el punto de vista computacional. Por lo tanto,

como primer enfoque se propone una reducción en la resolución de la información que se le proporciona a la RNA respecto del obstáculo, considerando una región objetivo consistente en una malla fija de 40x20 celdas, donde cada celda de dicha malla consta de 64 nodos de la malla numérica. A partir de ahora se hará referencia a la región objetivo como la *malla objetivo*.

Además, se ha asignado un valor numérico para cada celda de la malla objetivo, dependiendo de la relación de nodos de la malla numérica que representan elementos sólidos o fluidos. Esto significa que la proporción de celdas objetivo ocupadas por el obstáculo, está representada por el número de nodos sólidos dividido entre el número total de nodos de la malla numérica contenida en esa celda. En otras palabras, hemos definido un índice que relaciona el número de elementos sólidos con el número de elementos fluido para cada celda de la malla objetivo, donde se calculó la relación sólido/líquido de dicha celda, lo que significa que un valor de 1 representa una celda que contiene sólo elementos sólidos del obstáculo y un valor de 0 implica que sólo hay fluido en la celda. A partir de ahora, se le llamará a este índice como el índice de relación sólido/líquido (SLRI). Un ejemplo de la transformación de la simulación LBM de la malla numérica a la malla objetivo para un obstáculo de tamaño 0.2m se presenta en la figura 6.10, donde los tonos oscuros se refieren a las celdas ocupadas mayoritariamente por el obstáculo (alto SLRI), mientras que las celdas con tonos más claros significan una mayor proporción de elementos de fluido (bajo SLRI).

6.2.3. Estructura de la red neuronal artificial

La estructura interna de la RNA podría diferir internamente en cada caso, es decir, el número de neuronas de entradas y de neuronas ocultas, pero el número de neuronas de salidas es constante para todos los casos, ya que el objetivo es el mismo: aproximarse a la forma de un obstáculo que bloquea el flujo. Recordando que la región donde se ubica el obstáculo está descrita por una malla objetivo de 40x20 celdas, lo que significa que el objetivo y la predicción tienen 800 elementos. Los detalles específicos de la estructura interna de la malla son similares a los presentados en el capítulo anterior y están descritos en el apéndice E.

En los casos estudiados se encontró que las RNAs con una capa de entrada conformada con la información de las bases de datos construidas, una capa oculta con 20 neuronas y una capa de salida con 800 neuronas era lo suficientemente compleja como para dar buenos resultados sin pérdida de rendimiento para todos los casos de estudio. Todas las RNAs utilizadas tienen capas ocultas y de salida con funciones de activación sigmoideas. Por otra parte, las RNAs fueron entrenadas usando un algoritmo de *backpropagation* [119]. En este trabajo, se utilizó este método para minimizar una función de error cuadrático medio, utilizando una tasa de aprendizaje de 0.001, con un máximo de 15.000 iteraciones en la formación y utilizando una técnica de validación cruzada como criterio de parada. Para mayor claridad, todos los resultados mostrados aquí corresponden al conjunto de predicciones. Para más detalles sobre el entrenamiento supervisado y algoritmo de *backpropagation* el lector puede consultar [87, 120].

6.3. Resultados del capítulo

Bajo los argumentos antes señalados, mediante las bases de datos construidas, se ha realizado una estimación del tamaño y ubicación de un obstáculo que obstruye el flujo de un fluido confinado a un conducto dos dimensional, empleando para ellos las RNAs. Con el fin de estimar la precisión de la predicción de la RNA para cada uno de los casos analizados en el conjunto de prueba, empleamos el coeficiente R^2 . El cálculo de R^2 se realizó sobre el objetivo y la malla pronosticada, considerando la SLRI real y el resultado obtenido en la predicción. El coeficiente R^2 se define de la siguiente manera:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{800} (O_i - \langle T \rangle)^2}{\sum_{i=1}^{800} (T_i - \langle T \rangle)^2}, \quad (6.1)$$

donde T_i y O_i son el objetivo i -ésimo y la salida de la RNA respectivamente, y $\langle T \rangle$ es el promedio del SLRI para todo el vector objetivo:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{800} \sum_{i=1}^{800} T_i. \quad (6.2)$$

Esto significa que el rango del coeficiente R^2 va de $(-\infty, 1]$, donde un valor de $R^2 = 1$ implica un ajuste perfecto término por término, entre el objetivo y la

predicción de la RNA, mientras que $R^2 \rightarrow 0$ significa que la predicción se acerca a $\langle T \rangle$.

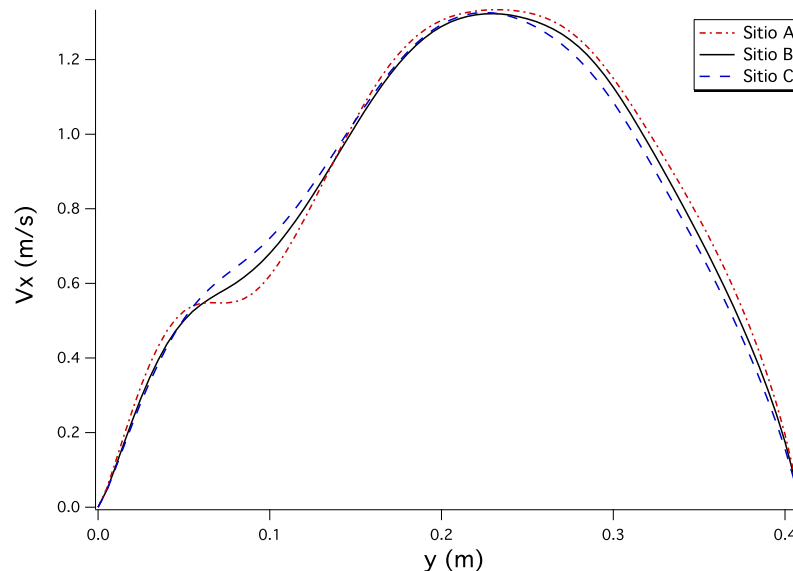


Figura 6.11: Magnitud de la componente x de la velocidad del flujo alrededor de un obstáculo centrado en $y = 0.21\text{m}$, medida en los sitios A, B y C. Se observa que las curvas son muy similares.

Antes de continuar, es importante recordar que, las mediciones del flujo consisten en una instantánea del perfil de v_x o q del fluido, al momento en que el sistema alcanza una estabilidad neutral, y a su vez considerar que, el análisis aquí presentado, tiene validez bajo los rangos de β , de las ubicaciones del obstáculo en torno al eje y y las velocidades iniciales presentadas en la sección 6.2, bajo una serie de casos distintos. Para el caso descrito en 1a, presentamos los resultados midiendo en detectores localizados no sólo en el sitio de entrenamiento B, sino también en A y C como se muestra en la figura 6.11. En este caso, se estudió cómo se comporta la RNA si sólo se entrena con información del lugar de medición B y se prueba en A, B y C, para los mismos obstáculos.

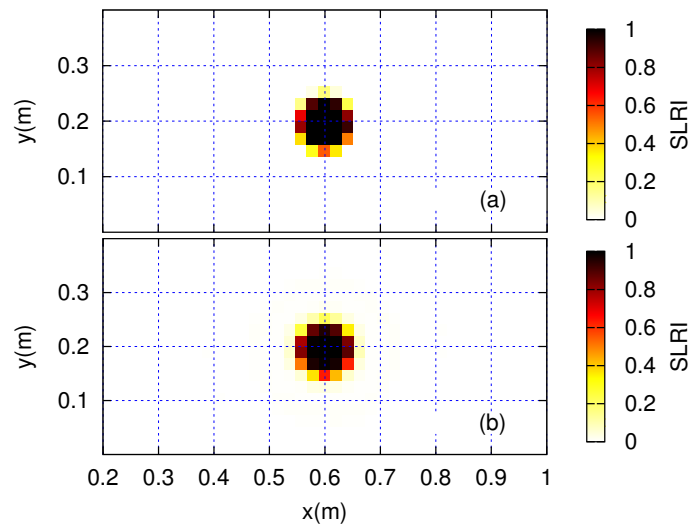


Figura 6.12: Objetivo (a) y predicción de la RNA (b) considerando el perfil de v_x del fluido generado por un obstáculo en el centro del tubo dos dimensional con $\beta = 0.4758$. La caja de color representa el SLRI. La diferencia entre el objetivo y la predicción del obstáculo es casi imperceptible a simple vista, el coeficiente R^2 ha alcanzado un valor de 0.979.

Para las mediciones realizadas en el sitio B, tanto en q como en v_x se observan valores de R^2 muy cercanos a 1.0 para los obstáculos con diámetros superiores a 0.05m, es decir, para $\beta > 0.25$, véase la figura 6.12, donde se traza la malla objetivo y la malla pronosticada para un obstáculo de $\beta = 0.4758$, alcanzando una predicción de $R^2 = 0.979$. Sin embargo, para los obstáculos pequeños la precisión disminuye, por ejemplo, con $\beta = 0.0488$ obtenemos $R^2 = 0.654$ considerando v_x y $R^2 = 0.802$ usando q .

Las estimaciones en los sitios de medición A y C para los mismos diámetros se presentann en la figura 6.13, y muestran un comportamiento similar con pequeñas variaciones en la precisión, esto se esperaba ya que los perfiles cambian en tiempo y espacio. Por ejemplo, en la estimación para el obstáculo con un valor de $\beta = 0.0122$, R^2 disminuye aproximadamente 16%. Esto podría implicar que medir lejos del obstáculo podría producir buenas estimaciones del tamaño del obstáculo.

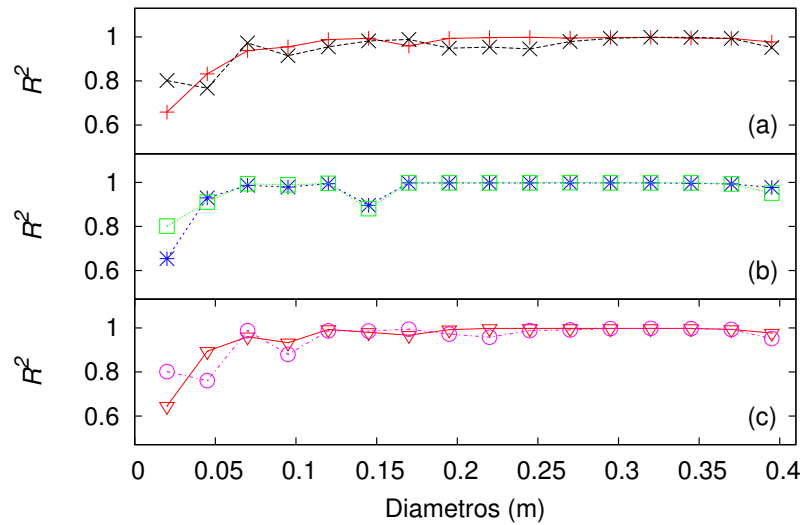


Figura 6.13: Coeficiente de R^2 para las predicciones realizadas por la RNA para los obstáculos ubicados en el centro del tubo dos dimensional con diferentes diámetros. La RNA es entrenada con datos extraídos con un sensor localizado sobre la línea en B, y probado con mediciones en A, B y C. En (a), la curva roja (+) muestra resultados usando v_x , y q es representado por la curva negra (x) en el sitio A. En (b), los datos de entrada se extrajeron del sitio de medición B, y las curvas azules (*) y verdes (□) representan los valores de R^2 usando los perfiles de v_x y q respectivamente. En c), las curvas en rojo (∇) y magenta (○) corresponden a los resultados de v_x y q en el sitio de medición C respectivamente. Todos los coeficientes de R^2 están por encima de 0.6, lo que puede interpretarse como una buena correlación entre la predicción y el objetivo. Obsérvese cómo los resultados son independientes del lugar de medición.

La figura 6.14 muestra los resultados con un solo sensor a $y = 0.21$ m, donde obtuvimos valores de R^2 por encima de 0.8 considerando v_x . Esta precisión disminuye cuando q se considera como información de entrada para las RNAs, obteniendo la peor predicción con $R^2 = 0.231$. Para el caso de tres sensores, los resultados mejoraron considerablemente manteniendo un comportamiento muy similar para ambas variables físicas, obteniendo la peor predicción con $R^2 = 0.669$ para $\beta = 0.183$. Además en el caso 1c, se obtuvieron valores de $R^2 > 0.9$ para $\beta > 0.25$.

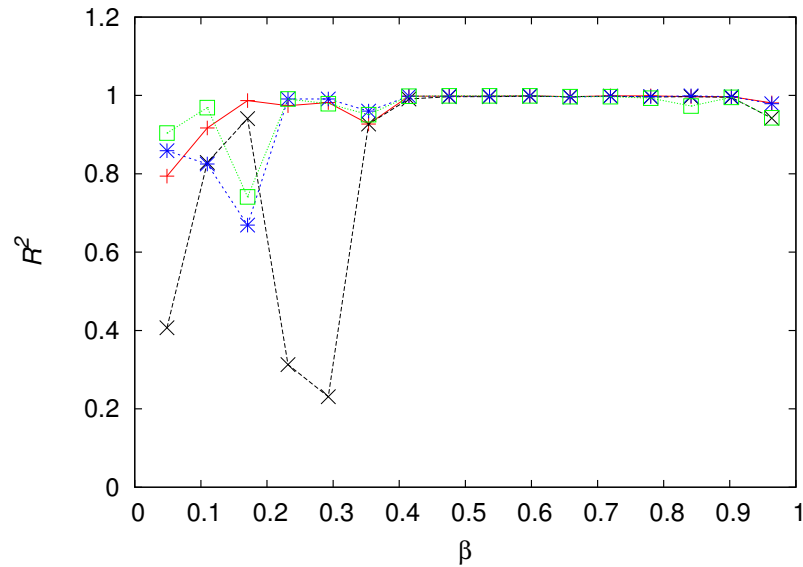


Figura 6.14: Análisis de la predicción de las RNAs mediante el coeficiente R^2 para varios tamaños de obstáculos centrados en el tubo dos dimensional. Midiendo la serie de tiempo en un solo sensor para v_x (+) y q (×) con un solo sensor a $y = 0.205\text{m}$, y con tres sensores en $y = 0.105\text{m}$, 0.210m y 0.315m para v_x (×) y q (□) en el sitio B de medición. Nótese que considerando la serie de tiempo para tres sensores, hay valores de R^2 cerca de 1 para diámetros mayores a $\beta = 0.20$, mientras que con uno solo esto sucede para $\beta > 0.25$.

Siguiendo el enfoque del caso 2a, donde las RNAs son entrenadas con perfiles de v_x o q medidos en el sitio B, con la intención de obtener no sólo una estimación del tamaño de la obstrucción, sino también su ubicación sobre el eje y . Como se muestra en la figura 6.16, los resultados tienen un coeficiente R^2 para los obstáculos más grandes ($\beta \geq 0.488$) que se aproxima a 1.0. Sin embargo, en relación al obstáculo con $\beta = 0.366$ para el cual la RNA no fue entrenada en absoluto, los peores resultados han bajado a un valor de $R^2 = 0.356$ para v_x y $R^2 = 0.243$ para q . Observe que ambas estimaciones se hacen con el obstáculo cerca de las paredes de la tubo. Por su parte, el coeficiente R^2 ara el obstáculo con diámetro $\beta = 0.244$, tiene su valor más bajo cuando se ubica en el centro del tubo, con un valor de $R^2 = 0.66$ y $R^2 = -0.033$ utilizando los perfiles de v_x y q respectivamente.

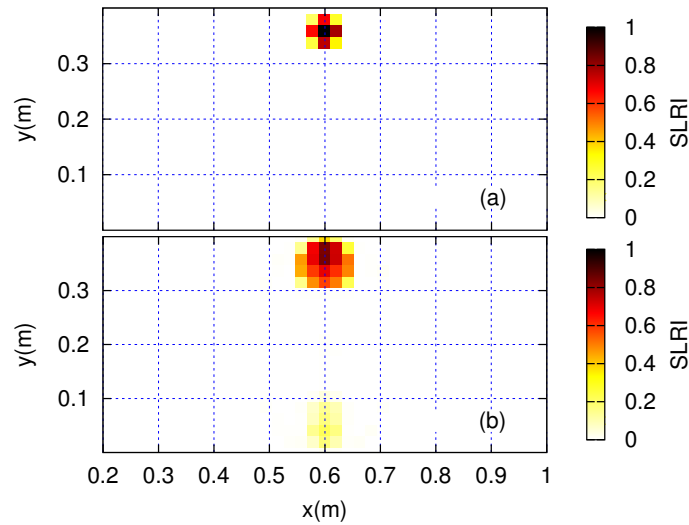


Figura 6.15: Objetivo (a) y predicción de la RNA (b) considerando el perfil de v_x del fluido generado por un obstáculo en $y = 0.35\text{m}$ con $\beta = 0.122$. Contrastando con la figura 6.12, observamos como la RNA se confunde e indica un SLRI de valor bajo en el fondo del tubo dos dimensional, resultando en una predicción con $R^2 = 0.09$.

En cuanto al caso 2b, en el que la RNA es entrenada con la serie de tiempo en un sólo sensor en el centro del tubo. La RNA es incapaz de aprender el comportamiento del flujo, sobre todo para los obstáculos cercanos a las fronteras así como para los pequeños, como se ve también en el caso 2a. Esto es evidente en la figura 6.17 donde obtenemos valores negativos para los pequeños obstáculos $\beta = 0.122$, con un valor mínimo de $R^2 = -0.312$ cuando el obstáculo está en el centro del tubo. Para los obstáculos más grandes ($\beta \geq 0.244$) la RNA es más precisa, excepto cuando están cerca de las paredes.

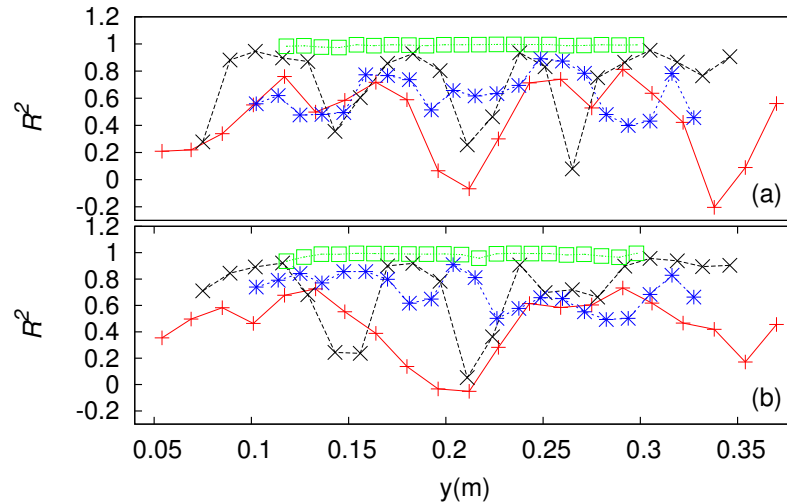


Figura 6.16: Análisis de la predicción de obstáculos en diferentes posiciones sobre el eje y , mediante el entrenamiento y testeo de la RNA con perfiles de v_x (a) y q (b) para sensores en el sitio de medición B. La curva roja (+) muestra los resultados para el obstáculo $\beta = 0.122$, mientras que las curvas negra (\times), azul (\ast) y verde (\square) muestran aquellas con valores de $\beta = 0.244$, 0.366 and 0.488 respectivamente. Los valores de R^2 son similares para ambos enfoques, donde el obstáculo más pequeño tiene la peor predicción en el centro y cerca de los bordes del tubo dos dimensional.

En el caso 2c, donde la serie de tiempo se generó con tres detectores equidistantes a $y = 0.105\text{m}$, 0.210m y 0.315m sobre el sitio de medición B, las predicciones mostradas en la figura 6.18 indican valores similares de R^2 para ambos q y v_x . En este escenario, las predicciones para el obstáculo más pequeño ($\beta = 0.122$) muestran una mejora sobre los resultados de sus contrapartes para el caso 2b (figura 6.17). Para el obstáculo con $\beta = 0.366$ todos los valores de R^2 están por encima de 0.4 usando v_x o q . Mientras tanto, para los obstáculos con $\beta = 0.244$ y $\beta = 0.488$ la malla de predicción muestra un gran ajuste respecto a la malla objetivo en casi todas las ubicaciones, con R^2 por encima de 0.8 . Sin embargo, el obstáculo con $\beta = 0.122$ y ubicado en el centro del tubo tiene un valor de $R^2 = -0.102$ usando el perfil de q .

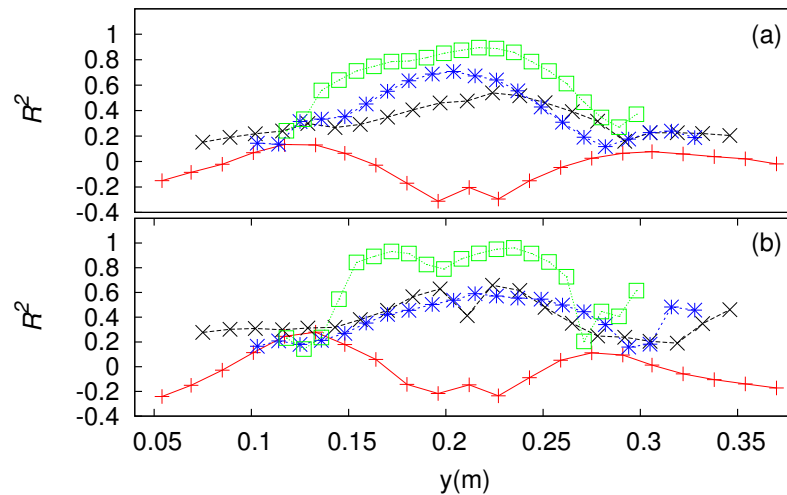


Figura 6.17: Análisis de la predicción de obstáculos en diferentes posiciones a lo largo del eje y . Las RNAs se entrenan con la serie de tiempo de v_x (a) y q (b) en el centro del tubo dos dimensional en el sitio de medición B. Las curvas rojas (+), negras (\times), azules (\ast) y verdes (\square) muestran los resultados para $\beta = 0.122, 0.244, 0.366$ y 0.488 respectivamente. Es evidente la dificultad de la RNA para dar una predicción adecuada sobre la ubicación del obstáculo con un solo sensor, esto es más evidente para los pequeños obstáculos cercanos a los bordes del tubo.

En general, para el caso 2, el peor ajuste se obtiene para los obstáculos más pequeños. Esta confusión de las RNAs no es sorprendente, ya que las fronteras del tubo perturban aún más la dinámica del fluido generado después del obstáculo cuando se ubica cerca de las paredes que en aquellos escenarios donde se encuentra en el centro. La capa límite se ve afectada por la naturaleza viscosa del flujo y si el obstáculo es muy pequeño, el efecto que causa al flujo es contrarrestado por fuerzas viscosas, lo que implica que cuando medimos lejos del obstáculo (por ejemplo, en el lugar de medición B), el flujo se comporta prácticamente como si no hubiera ningún obstáculo. Además, los obstáculos más pequeños, independientemente de su distancia a los límites del tubo, no afectan significativamente el patrón del flujo que se genera detrás de ellos, por lo que la RNA no puede caracterizarlos correctamente. Como puede verse en el caso 2b, un solo sensor no es suficiente para

obtener una buena estimación y también reduce la precisión con respecto al caso 2a. Al aumentar a tres sensores en el caso 2c, se obtuvo una mejora considerable en términos de valores de R^2 .

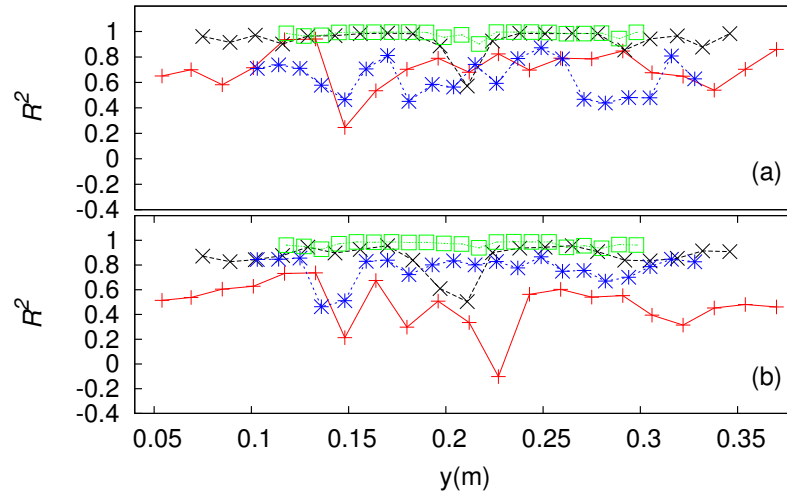


Figura 6.18: Resultados de R^2 obtenidos para obstáculos en diferentes posiciones sobre el eje y . Las RNAs son entrenadas con la serie de tiempo de v_x (a) y q (b) en tres sensores a $y = 0.105\text{m}$, 0.210m y 0.315m en el sitio de medición B. Las curvas rojas (+), negras (\times), azules (\ast) y verdes (\square) muestran los resultados para obstáculos con $\beta = 0.122$, 0.244 , 0.366 and 0.488 respectivamente. Nuevamente, el peor ajuste del coeficiente se obtuvo con el obstáculo más pequeño, con un valor de $R^2 = -0.102$ usando q como dato de entrada. Sin embargo, hay una mejora notable para los otros tres tamaños de obstáculos en comparación con el caso donde se utilizó un solo sensor.

Los resultados de los casos 1 y 2 muestran que a medida que aumenta el número de puntos de medición en espacio y tiempo, la predicción del tamaño del obstáculo de la RNA mejora considerablemente. Por ejemplo, comparando los casos 1a donde las RNAs usan 83 valores en el espacio y sólo uno en el tiempo produce, una precisión equivalente a los casos 1c donde se usan tres mediciones en el espacio y 300 en el tiempo. Una conclusión similar puede alcanzarse comparando los casos 2a y 2c. En otras palabras, la RNA para el caso 1a se desempeña mejor que en el caso 1c, ya que 1a requiere menos mediciones en el tiempo. Sin embargo, en un

sentido práctico, tener un sitio de medición con sólo tres sensores puede ser más deseable que un enfoque de construcción de un sitio de medición con más de 83 sensores.

En referencia al caso 3, los valores del coeficientes R^2 obtenidos para cada escenario se muestran en la Tabla 6.3. Aquí se observa el problema persistente del obstáculo más pequeño ($\beta = 0.0122$), con un valor de $R^2 = -23.753$ cuando se usa v_x , o incluso peor para q con $R^2 = -246.954$. Sin embargo, estos resultados particulares también tienen la segunda velocidad de flujo de entrada más baja con $v_c = 0.3\text{m/s}$. Para entender esto, compare los resultados obtenidos en el caso 1a, donde el valor de v_c asociado es siempre igual a 1.5m/s . Esto significa que una disminución en la precisión se asocia no sólo con la dificultad de la RNA para caracterizar los patrones de flujo para pequeños obstáculos, sino también porque el campo de velocidades del flujo alrededor del obstáculo muestra valores muy bajos. En otras palabras, en el caso 3 se encontró que teniendo tanto obstáculos muy pequeños como velocidades de flujo de entrada reducidas, la razón de fuerzas inerciales con respecto a las viscosas dentro del fluido es muy baja. Nótese la mejora en los resultados para el mismo valor de $\beta = 0.0122$ con $v_c = 1.35\text{m/s}$, obteniendo $R^2 = -0.645$ para v_x o $R^2 = -0.680$ para q . Lo mismo sucede para el obstáculo con $\beta = 0.0976$, mejorando de $R^2 = 0.250$ a 0.975 , y de $R^2 = -4.518$ a 0.975 para v_x y q respectivamente cuando la velocidad de flujo entrante se incrementa de $v_c = 0.15\text{m/s}$ a $v_c = 0.75\text{m/s}$ para ambas variables. Cabe destacar que para la mayoría de las predicciones restantes los valores de R^2 son cercanos a 1, con un desempeño similar al del caso 1a. Todo esto significa que la RNA aprende mejor a medida que se aumenta la velocidad del flujo entrante, y que en general la precisión es mejor cuando se emplea v_x en lugar de q .

La relevancia del caso 3 en este estudio, es que la RNA está capacitada no sólo para diferentes diámetros, sino también para diferentes velocidades de flujo de ingresos, lo que implica una mayor complejidad en cuanto a la información de entrada, resultando en una clara mejora en el reconocimiento de la forma de los obstáculos. A pesar de que para $\beta = 0.0122$ se obtienen malos resultados, la RNA pudo obtener valores de $R^2 > 0.96$ para $\beta \geq 0.0976$ al usar v_x como entrada,

excepto en el caso particular de $\beta = 0.0976$ con una velocidad de entrada baja de $v_c = 0.15\text{m/s}$, lo que es diez veces menor que el valor de v_c utilizado en el caso 1a. Un resultado similar se obtiene cuando se emplea q , obteniendo valores generales de $R^2 > 0.915$. Tenga en cuenta que comparando con el caso 1, los mejores resultados se obtuvieron para $\beta > 0.25$ con $R^2 > 0.9$ para ambos v_x y q .

β	v_c (m/s)	R^2 for v_x	R^2 for q
0.0122	0.3	-23.753	-246.954
0.0122	1.35	-0.645	-0.680
0.0976	0.15	0.250	-4.518
0.0976	0.75	0.966	0.919
0.0976	1.8	0.975	0.975
0.1952	1.5	0.961	-0.016
0.2928	0.45	0.989	0.936
0.2928	1.65	0.989	0.944
0.3904	0.45	0.998	0.978
0.3904	1.2	0.991	0.997
0.4880	0.9	0.999	0.988
0.4880	1.05	0.998	0.994
0.4880	1.5	0.999	0.986
0.5856	1.05	0.998	0.997
0.5856	1.2	0.997	0.997
0.7808	0.75	0.999	0.996
0.7808	1.2	0.999	0.999
0.8784	1.35	0.999	0.992
0.9638	0.6	0.999	0.966
0.9638	0.9	0.999	0.992

Tabla 6.3: R^2 para el conjunto de predicción, considerando diez valores del perfil de flujo entrante tomando v_x o q antes del obstáculo y diez valores en el sitio de medición B. Excluyendo los tres obstáculos más pequeños, los otros resultados son prominentes, con valores cercanos a 1.

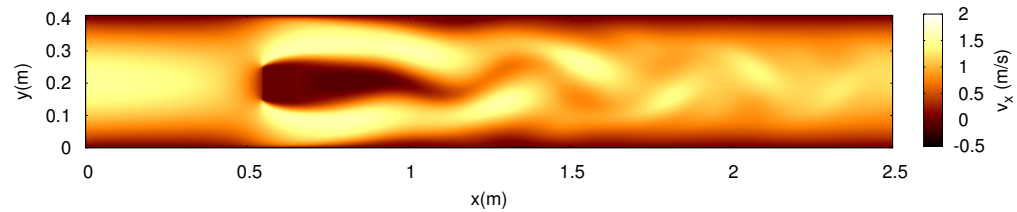


Figura 6.19: Magnitud de v_x , para una simulación de un flujo alrededor de un obstáculo cuadrangular con un flujo de entrada de $v_c = 1.5\text{m/s}$. El obstáculo se encuentra a 0.6m sobre el eje x . Al igual que con el disco, los vórtices formados después del obstáculo cuadrado son conducidos a lo largo de la dirección del flujo, generando también una calle de vórtices de Karman, pero con una frecuencia de proyección de vórtices distinta.

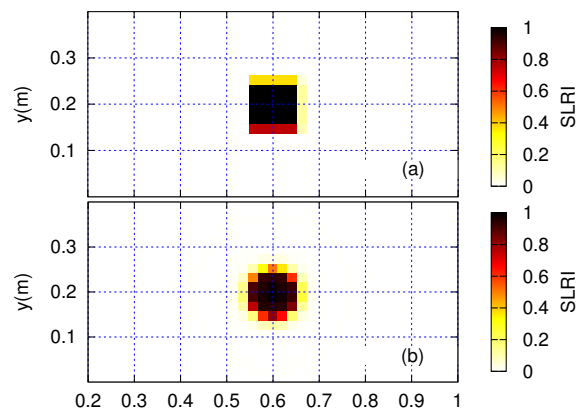


Figura 6.20: Detectores . Representación del obstáculo cuadrangular (a) con la malla numérica ubicado en el centro del diámetro del tubo dos dimensional para la simulación con LBM. Predicción (b) del obstáculo cuadrangular, considerando como entrada de la RNA la serie de tiempo de q con tres sensores diferentes sobre el sitio de medición B. Como era de esperar, la RNA considera este obstáculo con una forma similar a la que fue entrenado, sin embargo tiene un tamaño y ubicación comparable a la del objetivo.

Hasta ahora, se han hecho predicciones sobre el tamaño y la ubicación de los obstáculos. Pero también podemos probar la capacidad de una RNA ya entrenada para estimar la forma y el tamaño de un obstáculo diferente. Para mostrar esta capacidad, analizamos un experimento final, introduciendo un obstáculo cuadrado de lado 0.1m con las mismas condiciones que las presentadas en el caso 1, véase

la figura 6.19. Para simplificar, sólo presentamos el caso de la serie temporal con tres sensores diferentes en el sitio de medición B (como en 1c). A pesar de que la forma pronosticada es similar a aquellas para las que la RNA fue entrenada, obtuvimos un tamaño similar al del objetivo cuadrado, véase la figura 6.20, con un valor excepcional de $R^2 = 0.93$.

6.4. Conclusiones del capítulo

Se ha construido y entrenado una serie de RNAs con la capacidad de estimar la forma y ubicación de un obstáculo dentro de un tubo dos dimensional con un ancho específico de 0.41m, $1/80 \leq \beta < 1$ y un rango de flujos de entrada con velocidades características de 0.15m/s a 1.8m/s. Las RNAs utilizan como entradas al perfil de v_x o q a cierta distancia del obstáculo. Se analizaron varios casos variando tanto el diámetro (caso 1), la posición del obstáculo respecto al eje y (caso 2) y la velocidad del fluido de entrada (caso 3).

Basándose en las especificaciones empleadas en este trabajo, a partir de los resultados obtenidos para el caso 1, la RNA es capaz de generar estimaciones sobre el tamaño del obstáculo cuando los datos suministrados son muy similares a los utilizados en la fase de entrenamiento, con resultados de $R^2 > 0.9$ para valores de $\beta > 0.25$. En el caso 2 se hizo algo similar, considerando un obstáculo para el cual la RNA no fue entrenada con ninguna información sobre el perfil o serie temporal de v_x o q . Incluso cuando hubo una disminución evidente en la precisión, la RNA fue capaz de estimar no sólo la forma sino también la ubicación de tal obstáculo con un $R^2 > 0.6$ en general. Y resultados notables para valores de $\beta \geq 0.244$ cuando los obstáculos no están demasiado cerca de las paredes del conducto. Finalmente, en el caso 3 se han utilizado múltiples velocidades de flujo de entrada para cada bloqueo considerado, descubriendo que para bajas velocidades y pequeños obstáculos, las predicciones de la RNA tienen poca precisión, mientras que para mayores tamaños y mayores velocidades del flujo de entrada la precisión se mejora considerablemente, alcanzando valores de $R^2 > 0.9$ en general para $\beta \geq 0.0976$.

Encontramos que las RNA funcionan mejor en dos situaciones diferentes.

En primer lugar, cuando el número de sensores en un sitio de medición es grande, como se presenta en el caso 1*a*. En segundo lugar, cuando la serie de tiempo con tres sensores se considera, como en el caso 1*c*. Sin embargo, en sentido práctico, es más conveniente extraer datos en un lapso de tiempo con unos pocos sensores. En el mismo contexto, los resultados por entrenamiento de las RNAs con v_x o q son similares.

Por último, de todos los casos revisados se obtienen los mejores resultados para el caso 3 dado que la RNA puede dar predicciones con diferentes velocidades de fluidos de entrada, mientras que los casos 1 y 2, sólo fueron entrenados a una sola velocidad de fluidos de entrada. Además, el caso 3 tenía menos obstáculos en el conjunto de entrenamiento.

Se puede concluir, por tanto, que el código desarrollado con LBM permite construir bases de datos confiables y amplias, que permiten el estudio de obstrucciones en un flujo confinado en dos dimensiones, provocadas por un obstáculo conformado por un disco. A la vez, las RNAs presentadas, son lo suficientemente precisas para realizar el reconocimiento de la forma y ubicación de estos obstáculos tomando como información de entrada el perfil de velocidades o la presión dinámica del fluido.

Capítulo 7

Conclusiones y perspectivas

En esta tesis doctoral se ha trabajado con los métodos numéricos SPH y LBM en la resolución de problemas presentes en la dinámica de los fluidos, dado que ambos métodos presentan características que los hacen eficientes para dicha tarea. Con estos métodos se desarrollaron algoritmos numéricos en dos dimensiones, que fueron probados bajo distintos escenarios: el flujo de Poiseuille, el Flujo de Couette, el flujo en una cavidad y el flujo alrededor de un disco.

Los resultados obtenidos de estas pruebas para la precisión de los códigos muestran el desempeño particular de los códigos desarrollados. En el caso de LBM, ha quedado probada su capacidad para tratar flujos viscosos incompresibles tanto a bajos como altos valores del número de Reynolds. El código ha mostrado una alta precisión al tratar con los flujos de Poiseuille y Couette, para los cuales se les ha probado contra la solución exacta respectiva a cada flujo, obteniéndose errores por debajo del 0.05 % en la mayoría de los casos estudiados. Para la prueba del flujo en una cavidad con una pared móvil, el código mostró una alta capacidad, logrando incluso capturar los vórtices que se generan en las esquinas de la cavidad debido al cizallamiento entre las capas de fluido. En dicho caso, se llevaron a cabo estudios desde valores para el Re en un rango de 10 a 1000, obteniendo errores del 1 % para Re bajos hasta errores del 10 % para $Re = 1000$. Finalmente, en la prueba del flujo alrededor de un disco en 2D, se realizaron simulaciones en un rango del Re de entre 1 y 500, abarcando desde comportamientos laminares sin la presencia de estelas o vórtices, hasta comportamientos en los que se presenta un flujo turbulento con

proyección periódica de vórtices. En este último caso la precisión del código fue tal que se logró obtener un valor del número de Strouhal de 0.29942 y 0.2940387 al usar FBB y HBB respectivamente, para un $Re = 100$ y una resolución de 164x500. Dichos valores quedan contenidos en los rangos mostrados en el trabajo de Schäfer en [57]. A su vez, se probó la auto-convergencia para dicho valor de Re en ambos casos, obteniendo un factor de convergencia de 0.204 al usar FBB, y 1.629 al usar HBB. Ambos factores de convergencia se encuentran fuera del rango esperado. Aunque si se considera que el FC obtenido para el vórtice de Taylor-Green osciló en torno a 4, es posible que la caída en el orden de precisión se deba al hecho de estar simulando el flujo en torno a un obstáculo sólido curvo, y a su vez al alto valor del Re y la presencia de proyección de vórtices.

Para el código desarrollado con SPH, se probó su capacidad para trabajar con flujos a bajos números de Reynolds. Para los flujos de Poiseuille y Couette, los resultados obtenidos se mantuvieron por debajo del 1% de error al compararlos con las soluciones exactas. Para el estudio del flujo en una cavidad, los resultados obtenidos fueron buenos para $Re = 10$ con un error inferior al 10%, el cual se incremento a valores de hasta el 15% de error para $Re = 100$. Al intentar emular el comportamiento del flujo a $Re 400$, el código desarrollado con SPH mostró claras deficiencias, no pudiendo mostrar resultados aceptables. Más allá de este valor del Re , el código con SPH fue incapaz de trabajar adecuadamente. Lo anterior se repitió para el caso del flujo alrededor de un disco, para el cual solo se realizaron simulaciones en un rango del Re de 1 a 30, debido a la necesidad de mejoras en el desarrollo del código que permitieran emular de forma aceptable este fenómeno. Con lo anterior, ha quedado de manifiesto que se requiere mejorar el código SPH, en lo particular, en el tratamiento con las fronteras para poder tratar flujos a mas altos Re , sobre todo en lo que respecta a la interacción solido-liquido y las fronteras abiertas. No obstante, realizar dichas mejoras implicaban un alto coste de tiempo debido a su complejidad de implementación, lo que sumado a la lentitud de las simulaciones realizadas con este método, llevaron a la decisión de emplear solo LBM en las investigaciones científicas realizadas en este trabajo doctoral.

Con el método LBM se llevaron a cabo dos importantes investigaciones en-

focadas en el estudio de obstrucciones presentes en flujos viscosos e incompresibles en tubos dos dimensionales. Dichas investigaciones requirieron del uso de Redes Neuronales Artificiales (RNAs), para lo cual se trabajó en colaboración dentro del instituto de física y matemáticas. Para la realización de ambas investigaciones, se empleó el método LBM para la construcción de las bases de datos requeridas para el aprendizaje y obtención de predicciones por las RNAs.

El primer trabajo desarrollado con el código se presentó en el artículo *Estimation of Reynolds number for flows around cylinders with Lattice Boltzmann methods and artificial neural networks* [86], publicado en la revista *Physical Review E*. En este se construyó una base de datos que permitió el estudio del flujo alrededor de un disco para un rango de valores del Re de 1 a 120. Con la ayuda de RNAs, permitió se estimaron los valores del número de Reynolds asociados a un cierto perfil de velocidades y/o de la vorticidad del fluido extraído en la región posterior al obstáculo cilíndrico. De esta forma, se mostró que es posible caracterizar el patrón del flujo posterior a un obstáculo con forma de disco dado por el Re , sin conocer las características de dicho obstáculo ni las propiedades del perfil anterior al mismo.

Por otro lado, el segundo trabajo desarrollado con el código se presentó en el en el artículo *Recognition of an obstacle in a flow using artificial neural networks* [89], publicado en la revista *Physical Review E*. En este se construyeron distintas bases de datos, con las cuales fue posible realizar un estudio sobre las obstrucciones que se presentan en un flujo confinado en dos dimensiones, las cuales habrían de ser provocadas por un obstáculo circular. Dicho estudio incorporó el uso de las RNAs para realizar un reconocimiento del tamaño y ubicación de las obstrucciones, tomando como información inicial solo el perfil de velocidades del fluido. Para dicho estudio, se concluyó que el caso 3 presentado en la sección 6.2, arroja los mejores resultados, alcanzando valores de $R^2 > 0.9$ en general para $\beta \geq 0.0976$.

Finalmente, como conclusión general, se puede afirmar que en este trabajo doctoral se desarrolló un algoritmo numérico robusto y estable mediante el método Lattice Boltzmann, el cual fue probado mediante diversos modelos, consiguiendo resultados con aceptable precisión. A su vez, con esta herramienta numérica se

desarrollaron dos investigaciones científicas que culminaron, en ambos casos, con artículos publicados en revistas internacionales.

7.1. Perspectivas

Como perspectivas a futuro, se espera ampliar el código desarrollado con LBM hasta ahora a fin de poder trabajar en problemas mas complejos y a su vez con un mejor rendimiento del código. Por ello, se habrían de desarrollar o investigar los siguientes puntos:

- Condiciones de frontera para superficies curvas. Estás permiten realizar con mayor precisión, simulaciones donde los cuerpos solidos inmersos en flujos o bien que confinan al fluido son curvos. Ejemplos de esto es el mismo caso estudiado del flujo alrededor de un obstáculo cilíndrico, o bien el flujo en medios porosos caracterizados por obstáculos curvos, e incluso el estudio de flujo es tubos dos dimensionales en L con codos curvos.
- Fluidos inmiscibles. Cuando dos fluidos (generalmente solo se hace referencia a los líquidos) no tienen la capacidad de constituir una solución homogénea más allá de las proporciones implicadas, se dice que son inmiscibles. En este caso se desea estudiar numéricamente la interacción de dos fluidos inmiscibles, en los casos del flujo adyacente de dos fluidos inmiscibles y el desplazamiento de fluidos no miscibles a través de medios porosos.
- Termofluidos. La implementación de la transferencia de calor en un fluido tiene amplias aplicaciones. Fundamentalmente el interés de desarrollar simulaciones numéricas de este tipo tiene como meta el estudio del enfriamiento de baterías de iones de litio mediante microfluidos; en lo que se conoce como transferencia de calor conjugado.
- Desarrollo en 3D. Hasta ahora, los trabajos realizados no se encuentran implementados en 3 dimensiones, lo cual limita al código a no poder simular fenómenos físicos más realistas, como puede ser el estudio de obstrucciones

en tuberías en 3 dimensiones. No obstante, llevar a cabo esto implica un alto coste computacional, y por tanto, es necesario a su vez realizar cómputo en paralelo, lo cual se desea hacer a través de tarjetas gráficas mediante el empleo de CUDA.

Apéndice A

Discretización LBM usando diferencias finitas

A fin obtener la ecuación de Lattice Boltzmann bajo el modelo de colisión BGK (ec. 3.5), a partir de la expresión para la ecuación discreta de Boltzmann (ec. 3.3), se emplearán las nociones de diferencias finitas para la diferenciación numérica de la derivada de una función. Considerando que $f_i = (\vec{x}, \vec{c}_i, t)$ representa el valor de f para \vec{c}_i ; esto es, los paquetes de elementos de fluido con velocidad \vec{c}_i que se encuentran en el punto \vec{x} a un tiempo t . Al tiempo $t + \Delta t$, dicho valor estará dado por:

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Delta t \frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} + \dots \quad (\text{A.1})$$

Considerando que cuando $\Delta t \rightarrow 0$, es posible descartar todas las derivadas de orden 2 y superiores, se tienen entonces:

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Delta t \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathcal{O}((\Delta t)^2), \quad (\text{A.2})$$

lo cual arroja

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{f_i(\vec{x}, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t)}{\Delta t} + \mathcal{O}((\Delta t)^2). \quad (\text{A.3})$$

De forma similar, para calcular el valor de f_i en un punto $\vec{x} + \Delta \vec{x}$, a un tiempo $t + \Delta t$, se tiene

$$f_i(\vec{x} + \Delta \vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Delta t \frac{\partial f_i}{\partial t} + \Delta \vec{x} \cdot \vec{\nabla} f_i + \mathcal{O}((\Delta \vec{x})^2, (\Delta t)^2). \quad (\text{A.4})$$

De lo cual, dado que $\Delta\vec{x} = \vec{c}_i\Delta t$, se obtiene que:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i\Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Delta t \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla} f_i \right) + \mathcal{O}((\Delta\vec{x})^2, (\Delta t)^2). \quad (\text{A.5})$$

Con este resultado, despejando se llega a la expresión:

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla} f_i \right) = \frac{f_i(\vec{x} + \vec{c}_i\Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t)}{\Delta t} + \mathcal{O}((\Delta\vec{x})^2, \Delta t). \quad (\text{A.6})$$

De donde finalmente, la ecuación discreta de Boltzmann bajo el modelo de colisión BGK toma la forma:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i\Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau}(f_i + f_i^{eq}) + \mathcal{O}((\Delta\vec{x})^2, (\Delta t)^2), \quad (\text{A.7})$$

que descartando términos de orden mayor, nos lleva a la ec. 3.5.

Apéndice B

Fuerza de cuerpo en LBM

Para la simulación del flujo de Poiseuille en LBM, se utilizó una fuerza de cuerpo $\vec{F} = \rho\vec{g}$, donde \vec{g} es la aceleración debida a la fuerza \vec{F} . Esto, con el fin de emular la presencia de una diferencia de presiones a lo largo del dominio físico. A su vez de poder comparar los resultados obtenidos con SPH, para los cuales, también se ha empleado una fuerza de cuerpo. Para ello hay que modificar la ecuación de Lattice Boltzmann (LBE), lo que se hace añadiendo un término adicional:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i\delta t, t + \delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \frac{1}{\tau} (f_i^{eq}(\vec{x}, t) - f_i(\vec{x}, t)) + \Delta t F_i, \quad (\text{B.1})$$

donde la ecuación de la distribución de equilibrio $f^{(eq)}$ se define como $f_i^{eq} = f_i^{eq}(\rho, \vec{u}^*)$, siendo \vec{u}^* la velocidad de equilibrio dada por

$$\vec{u}^*(x, t) = \frac{1}{\rho} \left(\sum_i f_i^{eq} \vec{c}_i + m\vec{F}\Delta t \right), \quad (\text{B.2})$$

donde m es un parámetro a determinar. Entonces, el término de forzamiento F_i puede ser escrito en una serie de potencias como en [121]:

$$F_i = w_i \left[A + \frac{\vec{B} \cdot \vec{e}_i}{c_s^2} + \frac{\vec{C} : (\vec{e}_i \vec{e}_i + c_s^2 I)}{2c_s^4} \right], \quad (\text{B.3})$$

donde A , \vec{B} y \vec{C} son funciones de \vec{F} a determinar conforme al requisito de que los momentos de F_i permanezcan consistentes con las ecuaciones de Navier-Stokes.

Así, este desarrollo ha utilizado el modelo desarrollado por Guo et al en [122] para la implementación de una fuerza de cuerpo en LBE.

Apéndice C

Conversión de unidades en LBM

Considerando que la malla numérica que emplea LBM es adimensional y mesoscópica, es importante establecer el proceso para convertir unidades al trabajar con LBM en la simulación numérica de fenómenos hidrodinámicos de tal modo que los parámetros empleados en la simulación sean válidos. Lo cual está motivado por la pregunta fundamental: ¿Qué valores imponer a los parámetros Δx y Δt de tal forma que la simulación numérica sea consistente con el fenómeno físico a representar y que a su vez se mantenga estable? Denotando que en LBM, el intervalo espacial que separa a los nodos, tiene el mismo valor a lo largo de todas las direcciones.

Para realizar esto, de forma simple podemos establecer que para una cierta cantidad física Q , la expresión que la relaciona con la cantidad adimensional \tilde{Q} es:

$$Q = \tilde{Q} \times C_Q, \quad (\text{C.1})$$

donde C_Q es el factor de conversión entre la cantidad adimensional \tilde{Q} y la cantidad física Q . Así, por ejemplo, podemos establecer para el Re

$$Re = \tilde{Re} \iff C_{Re} = 1. \quad (\text{C.2})$$

Con ello podemos responder a nuestra pregunta inicial determinando los valores para los parámetros Δx y Δt a fin de relacionarlos con los valores $\Delta \tilde{x}$ y $\Delta \tilde{t}$ de la malla de LBM. Tomando en cuenta que en la malla adimensional de LBM $\Delta \tilde{x} = 1$ y $\Delta \tilde{t} = 1$, entonces:

$$\Delta x = \Delta \tilde{x} \times C_l = C_l, \quad (\text{C.3})$$

donde C_l es el factor de conversión para la longitud, y del mismo modo, para el tiempo se tiene que $\Delta t = C_t$, con C_t el factor de conversión para el tiempo. Para la cantidad longitud se tiene que

$$l = \tilde{l} \times C_l, \quad (\text{C.4})$$

entonces podemos establecer que $\Delta x = l/\tilde{l}$, donde l es la longitud macroscópica característica del fenómeno físico y \tilde{l} es el número de nodos de la malla numérica que representan a dicha longitud macroscópica. Finalmente, para calcular Δt , recordemos primero la expresión para la viscosidad dada por la expresión 3.6, la cual podemos reescribir como

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{C_l^2}{C_t}. \quad (\text{C.5})$$

Despejando C_t podemos establecer la expresión para calcular Δt que relaciona el intervalo de tiempo macroscópico con el intervalo tiempo mesoscópico a partir del tiempo de relajación τ y Δx , esto es,

$$\Delta t = C_t = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{C_l^2}{\nu}. \quad (\text{C.6})$$

A fin de mostrar este proceso, consideremos un ejemplo. Si consideramos un flujo dentro de un tubo dos dimensional vertical, impulsado por la fuerza de gravedad $F_g = \rho g$ con una aceleración $g = 10\text{m/s}^2$, con los siguientes valores iniciales: un diámetro del tubo de $l = 1 \times 10^{-3}\text{m}$, una viscosidad de $\nu = 1 \times 10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$ y una densidad $\rho = 1 \times 10^3\text{kg/m}^3$. Si la velocidad máxima del flujo de Poiseuille es de $v_{max} = 1.5\text{m/s}$, entonces el valor del Re asociado es de 1250.

Si elegimos un número de nodos de la malla numérica de $\tilde{l} = 200$ para representar al diámetro l del tubo entonces el intervalo espacial Δx será de $1 \times 10^{-5}\text{m}$. A su vez dado que $\tilde{\rho} = 1$, entonces $C_\rho = 1 \times 10^3\text{kg/m}^3$. Por tanto solo resta conocer el valor del intervalo del tiempo Δt , que para fijarlo correctamente, es necesario obtenerlo a partir del tiempo de relajación τ . Eligiendo $\tau = 0.6$ de la ec. C.6, se obtiene un valor para $\Delta t = 3.333 \times 10^{-6}\text{s}$. A partir de estos valores es posible deducir el factor de conversión de cualquier otra variable física relacionada.

Apéndice D

Vórtice de Taylor-Green

En dinámica de fluidos, el vórtice de Taylor-Green es un flujo no estacionario asociado a un vórtice en decaimiento, que tiene una solución exacta mediante las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes [52, 123]. Como este flujo se conoce analíticamente, a menudo se utiliza como una prueba de referencia para los resolvers numéricos de las ecuaciones de Navier-Stokes [124, 125]. El flujo Taylor-Green es inestable y completamente periódico en un dominio de tamaño $l_x l_y$. Formulado en dos dimensiones espaciales, sus campos de velocidad y presión se leen como:

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = v_0 \begin{pmatrix} -\sqrt{k_y/k_x} \text{Cos}(k_x x) \text{Sen}(K_y y) \\ \sqrt{k_x/k_y} \text{Sen}(k_x x) \text{Cos}(K_y y) \end{pmatrix} e^{-t/t_d}, \quad (\text{D.1})$$

$$p(\vec{x}, t) = p_0 - \rho \frac{v_0^2}{4} \left[\frac{k_y}{k_x} \text{Cos}(2K_x x) + \frac{k_x}{k_y} \text{Cos}(2K_y y) \right] e^{-2t/t_d}. \quad (\text{D.2})$$

Aquí, V_0 corresponde a la escala de velocidad inicial, $k_{x,y} = 2\pi/l_{x,y}$ corresponden a los componentes del vector de onda \vec{k} y

$$t_d = \frac{1}{\nu(k_x^2 + k_y^2)}, \quad (\text{D.3})$$

es el tiempo de decaimiento del vórtice.

En la presente tesis, el vórtice de Taylor-Green se ha empleado para estudiar la convergencia del código LBM cuando a éste no se le agrega ningún artificio numérico externo y las fronteras son por tanto periódicas en toda dirección (vease

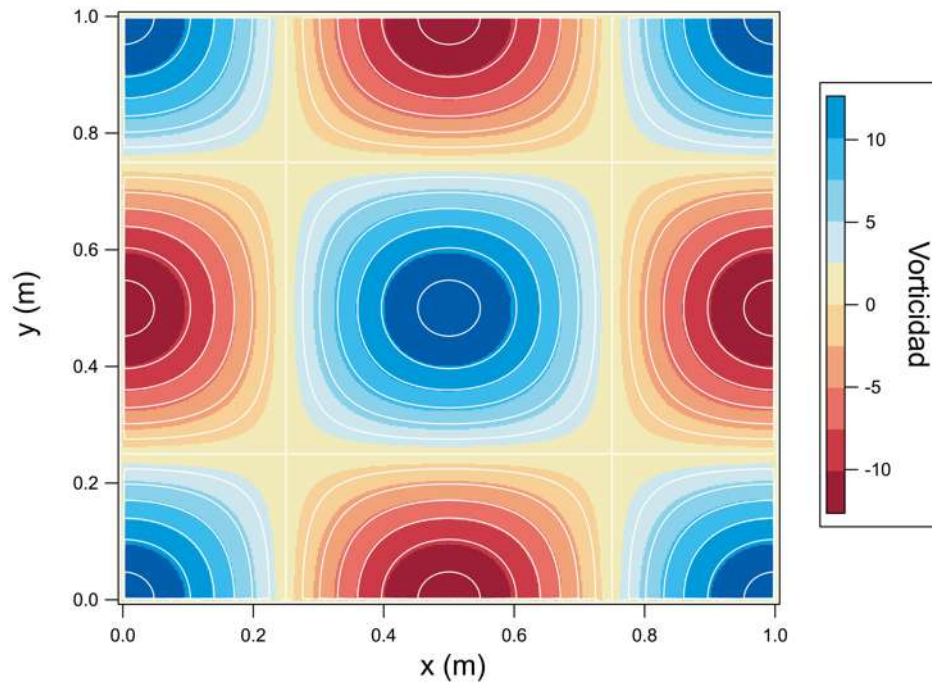


Figura D.1: Magnitud de la componente z de la vorticidad para el vórtice de Taylor-Green para un $Re = 10$ a $t = 0.1$ s. Se observa que el vórtice central presenta vorticidad positiva, mientras que los que están a sus costados presentan vorticidad negativa. Por tanto, los vórtices rotan en sentidos opuestos, manteniendo siempre su ubicación inicial.

la fig. D.1). Para el estudio de convergencia presentado en la sección 4.4, se empleó una $v_0 = 1$ m/s, con $l_x = l_y = 1$ m y una viscosidad cinemática ν de 0.1 m²/s; lo cual refiere a un $Re = 10$. Se emplearon 4 distintas resoluciones para la malla espacial, a saber R1 = 100x100 nodos, R2 = 200x200 nodos, R3 = 400x400 nodos, R4= 800x800 nodos. A medida que la malla es refinada sucesivamente por un factor de dos, el número de pasos de tiempo en cada simulación fue incrementado por un factor de 4 para simular el mismo tiempo físico en cada caso. El gasto computacional de las simulaciones (el número total de actualizaciones de nodos) aumenta por lo tanto en un factor de 16 por cada duplicación de la resolución.

Apéndice E

Conceptos de redes neuronales artificiales

El método de Machine Learning (ML) empleado en las secciones 5 y 6, en las que se aplica del código LBM desarrollado en esta tesis, utiliza redes neuronales artificiales (RNAs), las cuales fueron consideradas, dado que ofrecen un método directo para resolver problemas debido a su adaptación a información desconocida, incompleta o ruidosa, además de realizar un cálculo veloz después del entrenamiento [126]. En adición, se han aplicado con éxito en otros sistemas complejos como es el procesamiento de imagen y de voz, el reconocimiento de patrones, filtrado de señales, y también se han implementado en el modelado de fluidos computacionales para flujos turbulentos y dispersión [88, 127, 128], lo cual es bastante similar a la patrones de campo vectorial analizados en la presente tesis.

Las RNAs son un paradigma del aprendizaje automatizado, basado en sistemas biológicos, y que son empleados para clasificación, optimización y problemas de regresión, utilizando un número masivo de interconexiones de neuronas, en referencia a las redes neuronales biológicas [129]. Las RNAs tratan de generalizar la información más relevante sobre datos ruidosos o incompletos, extrayendo patrones a través de la composición de funciones no lineales (generalmente sigmoides como la tangente logística o hiperbólica), funcionando como aproximadores de función universal, como el teorema de los estados de Cybenko [130].

La arquitectura de la RNA más usual es el llamado perceptrón multicapa

(MLP), que es una extensión del perceptron simple desarrollado por Rosenblatt [131]. El MLP consiste en una disposición de capas de neuronas de procesamiento interconectadas entre ellas: una capa de entrada, una o varias capas ocultas, y una capa de salida. En una estructura de MLP la información va desde la capa de entrada a la oculta y más tarde desde la oculta a la salida. Las conexiones entre neuronas son reguladas por coeficientes de peso, que se ajustan en la fase llamada entrenamiento.

Para ilustrar una operación de una RNA, supongamos un MLP de tres capas con n neuronas de entrada, m elementos en una sola capa oculta, y l neuronas de salida, donde la relación entre un vector de entrada $\vec{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ y la k -th neurona de salida se determinan por la expresión

$$y_k = G \left(\tilde{w}_{0k} + \sum_{j=1}^m \tilde{w}_{jk} * F \left(\sum_{i=1}^n w_{ij} * x_i + w_{0j} \right) \right), \quad (\text{E.1})$$

donde w_{ij} and \tilde{w}_{jk} son los pesos de conexión entre las neuronas en las capas de entrada oculta y salida, respectivamente; w_{0j} y \tilde{w}_{0k} son algunos pesos adicionales llamados bias que funcionan como umbrales; F y G son las funciones de activación de las neuronas en cada capa, que en este trabajo pusimos F como la tangente hiperbólica y a G como una función lineal.

Para asegurarse de que una RNA de resultados apropiados, sus pesos deben ser ajustados. Una forma de hacerlo es implementar un algoritmo de entrenamiento supervisado, que consiste en introducir N ejemplos en la RNA. Cada ejemplo consiste en i entradas denotadas por \tilde{x}_i^p y k salidas denotadas por \tilde{y}_k^p , donde el índice $p = 1, \dots, N$ indiza cada uno de los N patrones del conjunto par \tilde{x}_i, \tilde{y}_k . Una minimización de la función de error dependiente del peso $E(\vec{w})$ se define por

$$E(\vec{w}) = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N \sum_{k=1}^l \frac{1}{2} (\tilde{y}_k^p - y_k^p)^2, \quad (\text{E.2})$$

siendo y_k los vectores de respuesta de la RNA y \tilde{y}_k los vectores objetivo. Para los capítulos 5 y 6, \tilde{x}_i^p corresponde a los valores i -ésimos medidos para v_x , la componente z de la vorticidad o la presión dinámica q en los detectores para la simulación p -ésima, mientras que \tilde{y}_k^p representa el valor correspondiente del Re

para la misma simulación (tener sólo una salida en la red implica $k = 1$), o bien al índice de relación sólido-liquido (IRSL) conformado por un total de 800 valores de salida.

La minimización de la función de coste se realiza mediante la iteración de un algoritmo de gradiente descendente denominado *backpropagation* [119], el cual, en cada paso iterativo t cambia el valor de cada w_{ij} , propagando el error de las neuronas de salida a las neuronas de entrada mediante la regla

$$w_{ij}(t + 1) = w_{ij}(t) - \gamma \frac{\partial E(t, \vec{w})}{\partial w_{ij}(t)} + \alpha \Delta w_{ij}(t), \quad (\text{E.3})$$

con $0 < \gamma < 1$ denominada como tasa de aprendizaje, la cual es determinada por el usuario, $\alpha \Delta w_{ij}(t)$ se denomina momento de impulso, añadido para evitar quedar atrapado en un mínimo local, con $0 < \alpha < 1$, el cual es otro parámetro a ajustar. Para calcular \tilde{w}_{jk} se emplea una expresión similar, la cual se describe a detalle en [126]; a su vez los pesos w_{0j} y \tilde{w}_{0k} suelen iniciarse aleatoriamente dentro de algún intervalo definido para respectivo caso a tratar.

Para la implementación numérica de las RNAs en lugar de usar códigos fuente abiertos, se decidió utilizar nuestra propia implementación para tener el control total de los detalles en el código, buscando diferentes estructuras y parámetros en el proceso de aprendizaje. Por un lado, la selección de la estructura de las RNA se hizo considerando que debía ser lo más simple posible, para mantener la ventaja computacional y lo suficientemente compleja para su adaptación a patrones desconocidos.

Concluyendo, lo anterior describe la conformación y construcción de las RNAs desarrolladas por otros colaboradores con la finalidad de realizar los estudios científicos desarrollados durante este trabajo doctoral.

Bibliografía

- [1] Franklin, J. (2013). *Computational methods for physics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [2] Batchelor, G. K. (2000). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [3] LeVeque, R. (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems (Classics in Applied Mathematics Classics in Applied Mathematics)*: Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [4] Toro, E. F. (1997). *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*.
- [5] Larson, M. G., & Bengzon, F. (2013). *The Finite Element Method: Theory, Implementation, and Applications*: Springer Publishing Company, Incorporated.
- [6] Hesthaven, J. S., Gottlieb, S., & Gottlieb, D. (2007). *Spectral Methods for Time-Dependent Problems*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [7] Gingold, R. A., & Monaghan, J. J. (1977). Smoothed particle hydrodynamics-theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 181, 375-389. doi:citeulike-article-id:9920290
- [8] Lucy, L. B. (1977). A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astron. J.*, 82, 1013-1024. doi:10.1086/112164
- [9] Monaghan, J. J. (1992). Smoothed particle hydrodynamics. *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 30, 543-574.
- [10] Monaghan, J. J. (1994). Simulating free-surface flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110(2), 399-406. doi:10.1006/jcph.1994.1034
- [11] Monaghan, J. J. (1996). Gravity currents and solitary waves. *Physica D*, 98(2-4), 523-533. doi:10.1016/0167-2789(96)00110-8

- [12] Mohamad, A. A. (2011). *Lattice Boltzmann method: fundamentals and engineering applications with computer codes*. London: Springer.
- [13] Succi, S. (2001). *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond (Numerical Mathematics and Scientific Computation)*: Oxford University Press.
- [14] Chen, S., & Doolen, G. D. (1998). Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, *30*, 329-364. doi:10.1146/annurev.fluid.30.1.329
- [15] Aidun, C. K., & Clausen, J. R. (2010). Lattice-Boltzmann Method for Complex Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, *42*, 439-472. doi:10.1146/annurev-fluid-121108-145519
- [16] Sheikholeslami, M., Gorji-Bandpy, M., & Ganji, D. D. (2014). Lattice Boltzmann method for MHD natural convection heat transfer using nanofluid. *Powder Technology*, *254*, 82-93. doi:10.1016/j.powtec.2013.12.054
- [17] McNamara, G. R., & Zanetti, G. (1988). Use of the Boltzmann-equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters*, *61*(20), 2332-2335. doi:10.1103/PhysRevLett.61.2332
- [18] Wolfram, S. (1986). Cellular automaton fluids 1: Basic theory. *Journal of Statistical Physics*, *45*(3), 471-526. doi:10.1007/bf01021083
- [19] Frisch, U., Hasslacher, B., & Pomeau, Y. (1986). Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Physical Review Letters*, *56*(14), 1505-1508. doi:10.1103/PhysRevLett.56.1505
- [20] Hardy, J., de Pazzis, O., & Pomeau, Y. (1976). Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions. *Physical Review A*, *13*(5), 1949-1961.
- [21] Guo, Z., & Shu, C. (2013). *Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering*: World Scientific.
- [22] Hayashi, H. (2003). Lattice boltzmann method and its application to flow analysis in porous media. *R&D Review of Toyota CRDL*, *38*(1), 17-25.
- [23] Liu, G. R., & Liu, M. B. (2003). *Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method*. Singapore ; London: World Scientific.
- [24] Violeau, D. (2012). *Fluid Mechanics and the SPH Method*: Oxford University Press.
- [25] Monaghan, J. J. (2005). Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on Progress in Physics*, *68*(8), 1703-1759. doi:doi:10.1088/0034-4885/68/8/R01

- [26] Huang, Y., & Dai, Z. L. (2014). Large deformation and failure simulations for geo-disasters using smoothed particle hydrodynamics method. *Engineering Geology*, 168, 86-97. doi:10.1016/j.enggeo.2013.10.022
- [27] Nonoyama, H., Moriguchi, S., Sawada, K., & Yashima, A. (2015). Slope stability analysis using smoothed particle hydrodynamics (SPH) method. *Soils and Foundations*, 55(2), 458-470. doi:10.1016/j.sandf.2015.02.019
- [28] Wu, Q., An, Y., & Liu, Q. Q. (2015). A Smoothed Particle Hydrodynamics Method for Modelling Soil-water Interaction. *Procedia Engineering*, 126, 579-583. doi:https://doi.org/10.1016/j.proeng.2015.11.298
- [29] Liu, M. B., Liu, G. R., & Lam, K. Y. (2003). Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 155(2), 263-284. doi:10.1016/s0377-0427(02)00869-5
- [30] Monaghan, J. J. (2012). Smoothed Particle Hydrodynamics and Its Diverse Applications. In S. H. Davis & P. Moin (Eds.), *Annual Review of Fluid Mechanics* (Vol. 44, pp. 323-346). Palo Alto: Annual Reviews.
- [31] Monaghan, J. J. (1989). On the problem of penetration in particle methods. *Journal of Computational Physics*, 82(1), 1-15. doi:10.1016/0021-9991(89)90032-6
- [32] Dehnen, W., & Aly, H. (2012). Improving convergence in smoothed particle hydrodynamics simulations without pairing instability. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 425(2), 1068-1082. doi:10.1111/j.1365-2966.2012.21439.x
- [33] Morris, J. P., Fox, P. J., & Zhu, Y. (1997). Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH. *Journal of Computational Physics*, 136(1), 214-226. doi:10.1006/jcph.1997.5776
- [34] Colagrossi, A., & Landrini, M. (2003). Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 191(2), 448-475. doi:10.1016/s0021-9991(03)00324-3
- [35] Randles, P. W., & Libersky, L. D. (1996). Smoothed particle hydrodynamics: Some recent improvements and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1-4), 375-408. doi:10.1016/s0045-7825(96)01090-0
- [36] Crespo, A. J. C., Gomez-Gesteira, M., & Dalrymple, R. A. (2007). Boundary conditions generated by dynamic particles in SPH methods. *Cmc-Computers Materials & Continua*, 5(3), 173-184.

- [37] Ferrand, M., Laurence, D. R., Rogers, B. D., Violeau, D., & Kassiotis, C. (2013). Unified semi-analytical wall boundary conditions for inviscid, laminar or turbulent flows in the meshless SPH method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, *71*(4), 446-472. doi:10.1002/fld.3666
- [38] Adami, S., Hu, X. Y., & Adams, N. A. (2012). A generalized wall boundary condition for smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, *231*(21), 7057-7075. doi:10.1016/j.jcp.2012.05.005
- [39] Federico, I., Marrone, S., Colagrossi, A., Aristodemo, F., & Antuono, M. (2012). Simulating 2D open-channel flows through an SPH model. *European Journal of Mechanics B-Fluids*, *34*, 35-46. doi:10.1016/j.euromechflu.2012.02.002
- [40] Lastiwka, M., Basa, M., & Quinlan, N. J. (2009). Permeable and non-reflecting boundary conditions in SPH. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, *61*(7), 709-724. doi:10.1002/fld.1971
- [41] Ferziger, J. H., & Peric, M. (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics* (3 ed.): Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [42] Wolf-Gladrow, D. A. (2000). *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models - An introduction* (Vol. 1725): Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [43] Pan, C. X., Luo, L. S., & Miller, C. T. (2006). An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation. *Computers & Fluids*, *35*(8-9), 898-909. doi:10.1016/j.compfluid.2005.03.008
- [44] Yu, D. Z., Mei, R. W., Luo, L. S., & Shyy, W. (2003). Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation. *Progress in Aerospace Sciences*, *39*(5), 329-367. doi:10.1016/s0376-0421(03)00003-4
- [45] Bouzidi, M., Firdaouss, M., & Lallemand, P. (2001). Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Physics of Fluids*, *13*(11), 3452-3459. doi:10.1063/1.1399290.
- [46] Feng, Z. G., & Michaelides, E. E. (2004). The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems. *Journal of Computational Physics*, *195*(2), 602-628. doi:10.1016/j.jcp.2003.10.013
- [47] Alim, U. R., Entezari, A., & Moller, T. (2009). The Lattice-Boltzmann Method on Optimal Sampling Lattices. *Ieee Transactions on Visualization and Computer Graphics*, *15*(4), 630-641. doi:10.1109/tvcg.2008.201
- [48] Guo, Z. L., Shi, B. C., & Wang, N. C. (2000). Lattice BGK model for incompressible Navier-Stokes equation. *Journal of Computational Physics*, *165*(1), 288-306. doi:10.1006/jcph.2000.6616

- [49] Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., & Krook, M. (1954). A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review*, *94*(3), 511-525.
- [50] Livi, S., & Marsch, E. (1986). Comparison of the Bhatnagar-Gross-Krook approximation with the exact Coulomb collision operator. *Physical Review A*, *34*(1), 533-540.
- [51] Pathria, R. K., & Beale, P. D. (2011). *Statistical Mechanics* (Third Edition ed.). Boston: Academic Press.
- [52] Krüger, T., Kusumaatmaja, H., Kuzmin, A., Shardt, O., Silva & g., Viggien, E. (2017). *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*: Springer Publishing Company, Incorporated.
- [53] He, X. Y., & Luo, L. S. (1997). Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*, *56*(6), 6811-6817. doi:10.1103/PhysRevE.56.6811
- [54] Qian, Y. H., D’Humières, D., & Lallemand, P. (1992). Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation. *EPL (Europhysics Letters)*, *17*(6), 479.
- [55] He, X. Y., Zou, Q. S., Luo, L. S., & Dembo, M. (1997). Analytic solutions of simple flows and analysis of nonslip boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Journal of Statistical Physics*, *87*(1-2), 115-136. doi:10.1007/bf02181482
- [56] Zou, Q. S., & He, X. Y. (1997). On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids*, *9*(6), 1591-1598. doi:10.1063/1.869307
- [57] Schäfer, M., Turek, S., Durst, F., Krause, E., & Rannacher, R. (1996). Benchmark Computations of Laminar Flow Around a Cylinder. In E. H. Hirschel (Ed.), *Flow Simulation with High-Performance Computers II: DFG Priority Research Programme Results 1993-1995* (pp. 547-566). Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag.
- [58] Hanke, M. (2004). Benchmarking FEMLAB 3.0a: Laminar Flows in 2d. Royal Institute of Technology, Report No. 2004:01, 01, 2004.
- [59] Izquierdo, S., & Fueyo, N. (2008). Characteristic nonreflecting boundary conditions for open boundaries in lattice Boltzmann methods. *Physical Review E*, *78*(4), 7. doi:10.1103/PhysRevE.78.046707
- [60] Sukop, M. C., & Thorne, D. T. J. (2007). *Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers*: Springer Publishing Company, Incorporated.

- [61] Suter, S. P., & Skalak, R. (1993). The History of Poiseuille's Law. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 25(1), 1-20. doi:10.1146/annurev.fl.25.010193.000245
- [62] Pfitzner, J. (1976). Poiseuille and his law. *Anaesthesia*, 31(2), 273-275. doi:10.1111/j.1365-2044.1976.tb11804.x
- [63] Munson, B. R., Rothmayer, A. P., Okiishi, T. H., & Huebsch, W. W. (2012). *Fundamentals of Fluid Mechanics* (7 ed.): John Wiley & Sons.
- [64] Stokes, G. G. (2009). On the Theories of the Internal Friction of Fluids in Motion, and of the Equilibrium and Motion of Elastic Solids. In G. G. Stokes (Ed.), *Mathematical and Physical Papers* (Vol. 1, pp. 75-129). Cambridge: Cambridge University Press.
- [65] Takeda, H., Miyama, S. M., & Sekiya, M. (1994). Numerical-simulation of viscous-flow by smoothed particle hydrodynamics. *Progress of Theoretical Physics*, 92(5), 939-960. doi:10.1143/ptp.92.939
- [66] Bruneau, C. H., & Saad, M. (2006). The 2D lid-driven cavity problem revisited. *Computers & Fluids*, 35(3), 326-348. doi:10.1016/j.compfluid.2004.12.004
- [67] Lee, E. S., Moulinec, C., Xu, R., Violeau, D., Laurence, D., & Stansby, P. (2008). Comparisons of weakly compressible and truly incompressible algorithms for the SPH mesh free particle method. *Journal of Computational Physics*, 227(18), 8417-8436. doi:10.1016/j.jcp.2008.06.005
- [68] Luo, L. S., Liao, W., Chen, X. W., Peng, Y., & Zhang, W. (2011). Numerics of the lattice Boltzmann method: Effects of collision models on the lattice Boltzmann simulations. *Physical Review E*, 83(5), 24. doi:10.1103/PhysRevE.83.056710
- [69] Ghia, U., Ghia, K. N., & Shin, C. T. (1982). High-Re solutions for incompressible-flow using the Navier Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, 48(3), 387-411. doi:10.1016/0021-9991(82)90058-4
- [70] Marchi, C. H., Suero, R., & Araki, L. K. (2009). The Lid-Driven Square Cavity Flow: Numerical Solution with a 1024 x 1024 Grid. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 31(3), 186-198. doi:10.1590/s1678-58782009000300004
- [71] Dollet, B., Durth, M., & Graner, F. (2006). Flow of foam past an elliptical obstacle. *Physical Review E*, 73(6). doi:10.1103/PhysRevE.73.061404

- [72] Larsen, A., & Walther, J. H. (1998). Discrete vortex simulation of flow around five generic bridge deck sections. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 77-78, 591-602. doi:10.1016/s0167-6105(98)00175-5
- [73] Lacaze, L., Paci, A., Cid, E., Cazin, S., Eiff, O., Esler, J. G., & Johnson, E. R. (2013). Wave patterns generated by an axisymmetric obstacle in a two-layer flow. *Experiments in Fluids*, 54(12). doi:10.1007/s00348-013-1618-z
- [74] Kawaguti, M., & Jain, P. (1966). Numerical Study of a Viscous Fluid Flow past a Circular Cylinder. *Journal of the Physical Society of Japan*, 21(10), 2055-2062. doi:10.1143/JPSJ.21.2055
- [75] Takami, H., & Keller, H. B. (1969). Steady TwoDimensional Viscous Flow of an Incompressible Fluid past a Circular Cylinder. *The Physics of Fluids*, 12(12), II-51-II-56. doi:10.1063/1.1692469
- [76] Dougherty, N., Holt, J., Liu, B., & O'Farrell, J. (1989). Time-accurate Navier-Stokes computations of unsteady flows - The Karman vortex street. In *27th Aerospace Sciences Meeting: American Institute of Aeronautics and Astronautics*.
- [77] Li, J., Chambarel, A., Donneaud, M., & Martin, R. (1991). Numerical study of laminar-flow past one and 2 circular-cylinders. *Computers & Fluids*, 19(2), 155-170. doi:10.1016/0045-7930(91)90031-c
- [78] Catalano, P., Wang, M., Iaccarino, G., & Moin, P. (2003). Numerical simulation of the flow around a circular cylinder at high Reynolds numbers. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 24(4), 463-469. doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0142-727X(03)00061-4
- [79] Grucelski, A., & Pozorski, J. (2013). Lattice Boltzmann simulations of flow past a circular cylinder and in simple porous media. *Computers & Fluids*, 71, 406-416. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.11.006
- [80] Karabelas, S. J., Koumroglou, B. C., Argyropoulos, C. D., & Markatos, N. C. (2012). High Reynolds number turbulent flow past a rotating cylinder. *Applied Mathematical Modelling*, 36(1), 379-398. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2011.07.032
- [81] Tuann, S., & Olson, M. D. (1978). Numerical studies of the flow around a circular cylinder by a finite element method. *Computers & Fluids*, 6(4), 219-240. doi:http://dx.doi.org/10.1016/0045-7930(78)90015-4
- [82] Rahman, M. M., Karim, M. M., & Alim, M. A. (2008). Numerical investigation of unsteady flow past a circular cylinder using 2-D finite volume method. *Journal of Naval Architecture and Marine Engineering*, 4(1), 27-42. doi:10.3329/jname.v4i1.914

- [83] Bouscasse, B., Colagrossi, A., Marrone, S., & Souto-Iglesias, A. (2017). SPH modelling of viscous flow past a circular cylinder interacting with a free surface. *Computers & Fluids*, *146*, 190-212. doi:10.1016/j.compfluid.2017.01.011
- [84] Zheng, Y. Q., Li, G. N., Guo, W. W., & Dong, C. (2017). Lattice Boltzmann simulation to laminar pulsating flow past a circular cylinder with constant temperature. *Heat and Mass Transfer*, *53*(9), 2975-2986. doi:10.1007/s00231-017-2043-2
- [85] Mei, R. W., Luo, L. S., & Shyy, W. (1999). An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method. *Journal of Computational Physics*, *155*(2), 307-330. doi:10.1006/jcph.1999.6334
- [86] Carrillo, M., Que, U., & Gonzalez, J. A. (2016). Estimation of Reynolds number for flows around cylinders with lattice Boltzmann methods and artificial neural networks. *Physical Review E*, *94*(6), 8. doi:10.1103/PhysRevE.94.063304
- [87] Bishop, C. M. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*: Springer-Verlag New York, Inc.
- [88] Lauret, P., Heymes, F., Aprin, L., Johannet, A., & Slangen, P. (2015). 2D Modeling of Turbulent Flow around a Cylindrical Storage Tank by Artificial Neural Networks. *Chem. Eng. Trans*, *43*, 1621-1626. doi:10.3303/CET1543271
- [89] Carrillo, M., Que, U., Gonzalez, J. A., & Lopez, C. (2017). Recognition of an obstacle in a flow using artificial neural networks. *Physical Review E*, *96*(2), 10. doi:10.1103/PhysRevE.96.023306
- [90] Ugarelli, R., Venkatesh, G., Brattebo, H., Di Federico, V., & Saegrov, S. (2010). Historical analysis of blockages in wastewater pipelines in Oslo and diagnosis of causative pipeline characteristics. *Urban Water Journal*, *7*(6), 335-343. doi:10.1080/1573062x.2010.526229
- [91] Kernan, W. N., Ovbiagele, B., Black, H. R., Bravata, D. M., Chimowitz, M. I., Ezekowitz, M. D., . . . Council Peripheral Vasc, D. (2014). Guidelines for the Prevention of Stroke in Patients With Stroke and Transient Ischemic Attack A Guideline for Healthcare Professionals From the American Heart Association/American Stroke Association. *Stroke*, *45*(7), 2160-2236. doi:10.1161/str.0000000000000024
- [92] Davies, C. E., & Desai, A. (2008). Blockage in vertical slots: Experimental measurement of minimum slot width for a variety of granular materials. *Powder Technology*, *183*(3), 436-440. doi:10.1016/j.powtec.2008.01.009

- [93] Sloan, E. D. (2005). A changing hydrate paradigm - from apprehension to avoidance to risk management. *Fluid Phase Equilibria*, 228, 67-74. doi:10.1016/j.fluid.2004.08.009
- [94] Fraige, F. Y., & Langston, P. A. (2006). Horizontal pneumatic conveying: a 3d distinct element model. *Granular Matter*, 8(2), 67-80. doi:10.1007/s10035-005-0221-2
- [95] Datta, S. P., Das, P. K., & Mukhopadhyay, S. (2014). Obstructed airflow through the condenser of an automotive air conditioner - Effects on the condenser and the overall performance of the system. *Applied Thermal Engineering*, 70(1), 925-934. doi:10.1016/j.applthermaleng.2014.05.066
- [96] Wang, H., Tian, J., Ouyang, H., Wu, Y. D., & Du, Z. H. (2014). Aerodynamic performance improvement of up-flow outdoor unit of air conditioner by redesigning the bell-mouth profile. *International Journal of Refrigeration-Revue Internationale Du Froid*, 46, 173-184. doi:10.1016/j.ijrefrig.2014.08.015
- [97] Duan, H. F. (2016). Sensitivity Analysis of a Transient-Based Frequency Domain Method for Extended Blockage Detection in Water Pipeline Systems. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 142(4), 8. doi:10.1061/(asce)wr.1943-5452.0000625
- [98] Ashley, R. M., Fraser, A., Burrows, R., & Blanksby, J. (2000). The management of sediment in combined sewers. *Urban Water*, 2(4), 263-275. doi:http://dx.doi.org/10.1016/S1462-0758(01)00010-3
- [99] Bailey, J., Keedwell, E., Djordjevic, S., Kapelan, Z., Burton, C., & Harris, E. (2015). Predictive risk modelling of real-world wastewater network incidents. *Procedia Engineering*, 119, 1288-1298. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.proeng.2015.08.949
- [100] Rodriguez, J. P., McIntyre, N., Diaz-Granados, M., & Maksimovic, C. (2012). A database and model to support proactive management of sediment-related sewer blockages. *Water Research*, 46(15), 4571-4586. doi:10.1016/j.watres.2012.06.037
- [101] Deloose, E., Janssen, P., Depoortere, I., & Tack, J. (2012). The migrating motor complex: control mechanisms and its role in health and disease. *Nature Reviews Gastroenterology & Hepatology*, 9(5), 271-285. doi:10.1038/nrgastro.2012.57
- [102] Shi, C. J., & Hruban, R. H. (2012). Intraductal papillary mucinous neoplasm. *Human Pathology*, 43(1), 1-16. doi:10.1016/j.humpath.2011.04.003

- [103] Chiu, J. J., & Chien, S. (2011). Effects of Disturbed Flow on Vascular Endothelium: Pathophysiological Basis and Clinical Perspectives. *Physiological Reviews*, *91*(1), 327-387. doi:10.1152/physrev.00047.2009
- [104] Fujimoto, K., Sugiyama, H., & Yazaki, S. (2015). Use of triple ultra-high-pressure balloons for obstructed right ventricular outflow conduits in adults can be safe and effective. *Cardiology in the Young*, *25*(4), 731-736. doi:10.1017/s1047951114000821
- [105] Duan, W., Kirby, R., Prisutova, J., & Horoshenkov, K. (2015). On the use of power reflection ratio and phase change to determine the geometry of a blockage in a pipe. *Appl. Acoust.*, *87*, 190.
- [106] Wang, X. J., Lambert, M. F., & Simpson, A. R. (2005). Detection and location of a partial blockage in a pipeline using damping of fluid transients. *Journal of Water Resources Planning and Management-Asce*, *131*(3), 244-249. doi:10.1061/(asce)0733-9496(2005)131:3(244)
- [107] Lee, P. J., Vitkovsky, J. P., Lambert, M. F., Simpson, A. R., & Liggett, J. A. (2008). Discrete blockage detection in pipelines using the frequency response diagram: Numerical study. *Journal of Hydraulic Engineering-Asce*, *134*(5), 658-663. doi:10.1061/(asce)0733-9429(2008)134:5(658)
- [108] Ma, J., Lowe, M. J. S., & Simonetti, F. (2007). Feasibility study of sludge and blockage detection inside pipes using guided torsional waves. *Measurement Science and Technology*, *18*(8), 2629-2641. doi:10.1088/0957-0233/18/8/039
- [109] Lile, N. L. T., Jaafar, M. H. M., Roslan, M. R., & Azmi, M. S. M. (2012). Blockage Detection in Circular Pipe Using Vibration Analysis. *International Journal on Advanced Science, Engineering and Information Technology*; Vol. 2 (2012) No. 3, 252-255. doi:10.18517/ijaseit.2.3.197
- [110] Massari, C., Yeh, T. C. J., Ferrante, M., Brunone, B., & Meniconi, S. (2014). Detection and sizing of extended partial blockages in pipelines by means of a stochastic successive linear estimator. *Journal of Hydroinformatics*, *16*(2), 248-258. doi:10.2166/hydro.2013.172
- [111] Yuan, Z. M., Deng, Z. B., Jiang, M. Z., Xie, Y., & Wu, Y. (2015). A modeling and analytical solution for transient flow in natural gas pipelines with extended partial blockage. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, *22*, 141-149. doi:10.1016/j.jngse.2014.11.029
- [112] Bello, O., Virani, N., & Oyadiji, S. O. (2011). Identification of Blockage in a Pipe Using Modal Analysis. *International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*, *1*(54785), 551-559. doi:10.1115/DETC2011-48787

- [113] Adeleke, N., Ityokumbul, M. T., & Adewumi, M. (2013). Blockage Detection and Characterization in Natural Gas Pipelines by Transient Pressure-Wave Reflection Analysis. *Spe Journal*, 18(2), 355-365.
- [114] Al-Naser, M., Elshafei, M., & Al-Sarkhi, A. (2016). Artificial neural network application for multiphase flow patterns detection: A new approach. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 145, 548-564. doi:10.1016/j.petrol.2016.06.029
- [115] Rosa, E. S., Salgado, R. M., Ohishi, T., & Mastelari, N. (2010). Performance comparison of artificial neural networks and expert systems applied to flow pattern identification in vertical ascendant gas-liquid flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(9), 738-754. doi:10.1016/j.ijmultiphaseflow.2010.05.001
- [116] Ling, J., & Templeton, J. (2015). Evaluation of machine learning algorithms for prediction of regions of high Reynolds averaged Navier Stokes uncertainty. *Physics of Fluids*, 27(8), 85-103. doi:10.1063/1.4927765
- [117] Bright, I., Lin, G., & Kutz, J. N. (2013). Compressive sensing based machine learning strategy for characterizing the flow around a cylinder with limited pressure measurements. *Physics of Fluids*, 25(12), 15. doi:10.1063/1.4836815
- [118] Duran, O., Althoefer, K., & Senevatne, L. D. (2007). Automated pipe defect detection and categorization using camera/laser-based profiler and artificial neural network. *Ieee Transactions on Automation Science and Engineering*, 4(1), 118-126. doi:10.1109/tase.2006.873225
- [119] Rumelhart, D. E., Hinton, G. E., & Williams, R. J. (1986). Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 323(6088), 533-536. doi:10.1038/323533a0
- [120] Rojas, R. (1996). *Neural Networks: A Systematic Introduction*. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [121] Ladd, A. J. C., & Verberg, R. (2001). Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. *Journal of Statistical Physics*, 104(5-6), 1191-1251. doi:10.1023/a:1010414013942
- [122] Guo, Z. L., Zheng, C. G., & Shi, B. C. (2002). Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, 65(4), 6. doi:10.1103/PhysRevE.65.046308
- [123] Alexakis, A. (2015). Rotating Taylor-Green flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 769, 46-78. doi:10.1017/jfm.2015.82

- [124] Drikakis, D., Fureby, C., Grinstein, F. F., & Youngs, D. (2007). Simulation of transition and turbulence decay in the Taylor-Green vortex. *Journal of Turbulence*, 8(20), 1-12. doi:10.1080/14685240701250289
- [125] Mei, R. W., Luo, L. S., Lallemand, P., & d'Humieres, D. (2006). Consistent initial conditions for lattice Boltzmann simulations. *Computers & Fluids*, 35(8-9), 855-862. doi:10.1016/j.compfluid.2005.08.008
- [126] Rabuñal, J. R., & Dorado, J. (2006). *Artificial Neural Networks in Real-Life Applications*. Hershey, PA, USA: IGI Global.
- [127] Lauret, P., Heymes, F., Aprin, L., Johannet, A., Dusserre, G., Lapébie, E., & Osmont, A. (2014). Atmospheric Turbulent Dispersion Modeling Methods using Machine learning Tools. *Chem. Eng. Trans*, 36, 517-522. doi:10.3303/CET1436087
- [128] Lauret, P., Heymes, F., Aprin, L., Johannet, A., Dusserre, G., Munier, L., & Lapébie, E. (2013). Near Field Atmospheric Dispersion Modelling on an Industrial Site Using Neural Networks. *Chem. Eng. Trans*, 31, 151-156. doi:10.3033/CET133
- [129] Russell, S. J., & Norvig, P. (2003). *Artificial Intelligence: A Modern Approach*: Pearson Education.
- [130] Cybenko, G. (1989). Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Mathematics of Control, Signals and Systems*, 2(4), 303-314. doi:10.1007/bf02551274
- [131] Rosenblatt, F. (1962). *Principles of neurodynamics; perceptrons and the theory of brain mechanisms*. Washington: Spartan Books.