

17
ZEJ



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

MODELO DE LATTICE BOLTZMANN PARA
FENOMENOS DE TRANSPORTE Y DISPERSION
DE CONTAMINANTES DE LA ATMOSFERA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
F I S I C O
P R E S E N T A :
ERNESTO HERNANDEZ ZAPATA



Director de Tesis: Víctor Alejandro Salcido González

MEXICO, D. F.

1995

FALLA DE ORIGEN

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

M. en C. Virginia Abrin Batule
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: " MODELO DE LATTICE
BOLTZMANN PARA FENOMENOS DE TRANSPORTE Y DISPERSION DE CONTAMINANTES DE
LA ATMOSFERA "

realizado por ERNESTO HERNANDEZ ZAPATA

con número de cuenta 8522709-3 , pasante de la carrera de FISICA

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis	
Propietario	DR. VICTOR ALEJANDRO SALCIDO GONZALEZ
Propietario	DR. ALIPIO GUSTAVO CALLES MARTINEZ
Propietario	DR. CLAUDIO ESTRADA GASCA
Suplente	M. EN C. RAUL MAURICIO RECHTMAN SCHKENZEL
Suplente	M. EN C. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE

Consejo Departamental de Física
DR. ALEJANDRO BUELAS MAYORGA

A MIS PADRES.

AGRADECIMIENTOS.

Quiero dar las gracias, en primer lugar, a los profesores Alipio G. Calles, Claudio Estrada, Raúl M. Rechtman y Patricia Goldstein. Ellos revisaron mi tesis y espero haber atendido adecuadamente sus valiosos consejos.

En segundo lugar, quiero agradecer al Instituto de Investigaciones Eléctricas (I.I.E.) de Cuernavaca y, en particular, a su Departamento de Sistemas de Combustión tanto por la beca que me fue otorgada como por proporcionarme el ambiente académico en el cual pude elaborar este trabajo.

En tercer lugar, debo reconocer mi gran deuda con Alejandro Salcido. Él me sugirió el tema de esta tesis y, durante todo el tiempo que duró la preparación de ésta, me proporcionó con sus consejos un apoyo imposible de evaluar.

Por último, es forzoso que mencione nuevamente a Alejandro y, con él, a mi querida amiga Ruth Merino, para agradecerles su amistad y la gran solidaridad de que siempre me rodearon.

Ernesto Hernández Zapata.

INDICE.

INTRODUCCIÓN

PAG. 1

CAPITULO 1.- LA MODELACIÓN DEL TRANSPORTE Y DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES

PAG. 3

- 1.1.- Importancia y limitaciones de la modelación de la contaminación atmosférica pag. 3
- 1.2.- Factores importantes en la dispersión de contaminantes pag. 5
- 1.3.- Modelación matemática de la micrometeorología pag. 9
- 1.4.- La modelación del transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera pag. 11
- 1.5.- Los modelos de gases en redes pag. 15

CAPITULO 2.- MICROMETEOROLOGÍA

PAG. 19

- 2.1.- Estructura de la capa frontera planetaria (PBL) pag. 19
- 2.2.- Turbulencia y técnicas de cerradura. pag. 23
- 2.3.- El perfil logarítmico de velocidades pag. 29

CAPITULO 3.- BREVE RESUMEN DE MECÁNICA DE FLUIDOS Y TEORÍA CINÉTICA. PAG. 32

- 3.1.- El punto de vista del medio continuo pag. 32
- Caso especial: flujo a través de canales pag. 34
- 3.2.- El punto de vista de la teoría cinética pag. 35

CAPITULO 4.- LOS MODELOS DE GASES EN REDES

PAG. 44

- 4.1.- Modelo HPP (Hardy, De Pazzis y Pomeau, 1976). pag. 44
- 4.2.- Los modelos FHP (Frisch, Hasslacher y Pomeau, 1986) pag. 46
- 4.3.- El modelo ARIANNA. Descripción. pag. 49
- Análisis termodinámico del modelo pag. 53
- 4.4.- El modelo ARIANNA. Simulaciones y Resultados pag. 57
- Perfil logarítmico de la velocidad del viento en la capa superficial atmosférica pag. 63
- Diagnóstico del campo de vientos en el valle de México y sus alrededores pag. 63

CAPITULO 5.- ANÁLISIS DE LOS MODELOS DE LATTICE BOLTZMANN PARA LA SIMULACIÓN DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS. PAG. 72

- 5.1.- Esbozo del modelo. pag. 72
- 5.2.- La forma geométrica del modelo. pag. 73
- 5.3.- Desarrollo teórico del modelo. pag. 75
- 5.3.1.- El término de equilibrio. pag. 79
- 5.3.2.- El "término viscoso". pag. 86
- 5.3.3.- Breve resumen del modelo. pag. 88
- 5.3.4.- Simulaciones y resultados. pag. 89

CAPITULO 6.- EXTENSIÓN DEL MODELO DE LATTICE BOLTZMANN PARA LA SIMULACIÓN DE FENÓMENOS TÉRMICOS.

PAG. 95

- Sobre el término viscoso. pag. 107
- Resumen del modelo. Conclusiones. pag. 108

CONCLUSIONES.

PAG. 110

REFERENCIAS.

PAG. 112

INTRODUCCIÓN.

Una de las principales herramientas que se han desarrollado para el estudio y control de la contaminación atmosférica es la modelación de los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes. Existen diversos modelos matemáticos para simular dinámica de fluidos en general y dispersión de contaminantes en particular: modelos Gaussianos, soluciones numéricas de las ecuaciones de Navier-Stokes simplificadas, etc. Recientemente han sido desarrolladas las técnicas que podríamos llamar "modelos de gases en redes". Este concepto abarcaría dos tipos de estrategias alternativas estrechamente relacionadas: por un lado, los modelos de autómatas celulares ("Lattice Gas"); por el otro, las técnicas conocidas como "Lattice Boltzmann Equation" (cuya mejor traducción sería quizá la de "ecuación de Boltzmann modelada sobre una red").

Una serie de características de los modelos de gases en redes (tales como su fácil implementación computacional y su capacidad de tratar problemas con condiciones iniciales y de frontera complejas) sugieren que estas técnicas podrían ser sumamente útiles en el estudio de los fenómenos de contaminación atmosférica, ya sea en la simulación directa de la dispersión de contaminantes o, por ejemplo, en el problema de la reconstrucción de campos de viento (Ver capítulo 4). En este trabajo nos hemos propuesto explorar las posibilidades y limitaciones de los modelos de gases en redes en la simulación de la dinámica de fluidos y de la contaminación atmosférica.

Los autómatas celulares son sistemas dinámicos totalmente discretos que tienen lugar en una red discreta de variables booleanas que evoluciona en pasos de tiempo discretos. Los elementos de la red (las variables booleanas) representan las moléculas de un "gas" en un micromundo ficticio. Imponiendo ciertas reglas de evolución temporal, se "fuerza" al sistema a que se comporte de acuerdo a las leyes básicas de la microfísica de los gases "reales" (tales como la conservación de masa, momento y energía o como la isotropía del espacio) y se espera obtener *indirectamente* el comportamiento macroscópico de un fluido "real" mediante algún tipo de promedio sobre las moléculas del "gas modelo".

Los modelos "Lattice Boltzmann" se derivaron de la investigación sobre los modelos de autómatas celulares. Sin embargo, hay diferencias importantes entre ambas técnicas. La principal es que los modelos "Lattice Boltzmann" no tratan propiamente con las moléculas individuales del gas sino con *las funciones de distribución de éstas*. Se intenta, por lo tanto, modelar no las leyes de las colisiones microscópicas sino las ecuaciones macroscópicas de Navier-Stokes a través de un enfoque inspirado en la teoría cinética de los gases. Enfatizamos a lo largo del trabajo que, por las razones mencionadas, puede considerarse en alguna medida a los modelos "Lattice Boltzmann" como sistemas "macroscópicos" (si bien con ciertas características discretas).

Con el propósito de que sirva de guía para la lectura de este trabajo, vamos a dar una idea del contenido de sus diversos capítulos.

En el capítulo 1 exponemos brevemente la importancia de la modelación matemática del transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera y esbozamos las diversas técnicas que han sido desarrolladas con este propósito. En el parágrafo 1.5 del mismo capítulo se discute la filosofía detrás de los modelos de gases en redes.

En el capítulo 2 presentamos un breve análisis de los factores físicos involucrados en la dinámica de la capa frontera planetaria (PBL) que es el sistema en que el fenómeno de la contaminación atmosférica tiene lugar. Por esta razón nuestros modelos están orientados hacia la simulación de fenómenos micrometeorológicos (es decir, al estudio de la capa frontera planetaria bajo diferentes condiciones físicas).

En el capítulo 3 se resumen los aspectos básicos de la mecánica de los fluidos y de la teoría cinética de los gases ya que representan el principal punto de comparación con el desarrollo teórico de nuestros modelos de gases en redes.

En el capítulo 4 se expone el modelo ARIANNA, un modelo de autómatas celulares de nueve velocidades orientado a la reconstrucción de campos de viento sobre terrenos complejos desarrollado por Alejandro Saleido, investigador del Instituto de Investigaciones Eléctricas (I.I.E.). A diferencia de otros modelos de autómatas celulares, ARIANNA permite simular fenómenos térmicos y no exclusivamente dinámicos (en el parágrafo 4.3 se analizan las propiedades termodinámicas del equilibrio en el modelo ARIANNA). Se han desarrollado diversas simulaciones con dicho modelo con dos intenciones. En primer lugar, la de estudiar su comportamiento en problemas de dinámica de fluidos con soluciones conocidas a las cuales se ha llegado ya sea empíricamente o a partir de la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes (flujos de Couette y de Poiseuille, recuperación del perfil logarítmico de la velocidad del viento bajo condiciones neutras de estabilidad atmosférica) y, en segundo lugar, con la intención de aplicar el modelo al problema de la reconstrucción de campos de viento en el valle de México. En ambos casos los resultados son prometedores.

En el capítulo 5 se analizan teóricamente las propiedades de un modelo Lattice Boltzmann que fue planteado originalmente en un artículo de R.D. Kingdon et al [7] y cuyo análisis, implementación computacional y extensión teórica representa el núcleo más original del trabajo de tesis. Nuevamente se representa al fluido mediante una red discreta que evoluciona en pasos de tiempo discretos, pero ahora no se trata de variables booleanas sino reales dado que representan no a las partículas sino a sus funciones de distribución correspondientes. La traslación de las moléculas y las colisiones entre ellas no se introducen directamente sino mediante una actualización de las funciones de distribución en cada paso de tiempo. Cabe destacar que en este modelo (a diferencia de la mayoría de los modelos Lattice Gas) el tensor de esfuerzos resulta ser isotrópico e invariante de Galileo y que los coeficientes de viscosidad son introducidos sin referencia a tipos de colisión específicos. Es, sin embargo, incapaz de simular fenómenos térmicos dado que, como se muestra en este capítulo, la energía no juega un rol importante y de hecho ni siquiera se conserva. El modelo ha sido implementado en un programa de computación en lenguaje C y ha sido probado simulando flujos bidimensionales estacionarios y no-estacionarios a través de canales planos. Nuestras simulaciones están satisfactoriamente de acuerdo con las soluciones analíticas de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Finalmente, en el capítulo 6 se extiende el modelo Lattice Boltzmann del capítulo anterior incluyendo nuevos "niveles de energía" con el propósito de que cumpla con la ley de conservación de la energía y permita simular fenómenos térmicos. Sin embargo, esta extensión no ha sido sometida aún a "pruebas experimentales" (es decir, a una simulación computacional de situaciones conocidas).

1

CAPITULO I.
INTRODUCCIÓN: LA MODELACIÓN DEL TRANSPORTE Y DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES.

1.1 IMPORTANCIA Y LIMITACIONES DE LA MODELACIÓN DE LA CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA.

En la mayoría de los estudios de calidad del aire, una de las principales herramientas es la modelación de la contaminación atmosférica. Estos modelos han sido desarrollados para estudiar todos los aspectos del problema: evaluar tasas de emisión, describir los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes que tienen lugar en la atmósfera, evaluar los diferentes efectos perjudiciales que tiene la contaminación atmosférica en cada región determinada, etc. Además pueden ser de naturaleza muy diferente: modelos de laboratorio en pequeña escala (como son las simulaciones con túneles de viento) o bien modelos matemáticos (analíticos o, más frecuentemente, numéricos) que intentan describir los aspectos físicos y químicos del problema. En este trabajo sólo nos interesa discutir los modelos matemáticos diseñados para estudiar los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes.

Los resultados de la modelación de la contaminación atmosférica son de gran importancia ya que ayudan tanto a conocer el impacto que tienen sobre el medio ambiente diferentes fuentes emisoras de contaminantes como a proponer estrategias de control, mejoramiento y conservación de la calidad del aire. Podríamos hablar (en términos más explícitos) de las siguientes aplicaciones principales de la modelación del transporte y dispersión de contaminantes:

- (1) ayuda a diseñar legislación de control de emisiones, determinando las tasas máximas de emisión (así como otras características de la emisión: altura de las chimeneas, por ejemplo) que permitan mantener las concentraciones de contaminantes en la atmósfera por debajo de los valores permitidos por las normas establecidas;
- (2) permite evaluar propuestas de técnicas y estrategias de control de la contaminación atmosférica;
- (3) ayuda a seleccionar los lugares más apropiados para las futuras instalaciones de fuentes emisoras de contaminantes;
- (4) ayuda a definir estrategias de intervención inmediata en casos de emergencia producidos por concentraciones excesivas de contaminantes en alguna región determinada;
- (5) permite deslindar responsabilidades por los niveles de contaminación atmosférica existentes (esto es, evaluar el peso relativo de cada fuente emisora en cualquier región determinada).

Una distinción importante debe ser hecha entre la modelación de la contaminación atmosférica y el *monitoreo* de la calidad del aire (es decir, la recolección de mediciones experimentales de la calidad del aire en alguna localidad). Dentro del marco de la investigación científica, la creación de teorías y modelos no necesita ser justificada; es lo único que permite comprender realmente los fenómenos físicos y químicos teniendo lugar en la atmósfera. Pero hay que remarcar que la modelación matemática constituye también una necesidad *práctica* que la pura recolección de datos experimentales no permite satisfacer. Los datos obtenidos mediante el monitoreo son indispensables para inferir teorías y para calibrar o validar los modelos de contaminación atmosférica. Pero su resolución espacial y temporal es totalmente insuficiente para permitir una buena representación de la complicada estructura de los fenómenos atmosféricos involucrados en la difusión de contaminantes.

Debe distinguirse también entre modelos "estadísticos" (basados en relaciones semiempíricas estadísticas entre diferentes medidas disponibles proporcionadas por el monitoreo) y modelos "determinísticos" (basados en descripciones matemáticas de los procesos atmosféricos involucrados, por ejemplo la ecuación de difusión). Un ejemplo de modelo "estadístico" sería uno que pronosticara los niveles de concentración de contaminantes para las próximas horas como una función estadística tanto de las medidas disponibles proporcionadas por el monitoreo como por las pasadas correlaciones entre estas medidas y los niveles de concentración. La denominación de modelos "determinísticos" y "estadísticos" es dada por P.Zannetti [1] pero quizá sea mejor llamarlos modelos "auto-consistentes" y "totalmente dependientes del monitoreo" respectivamente dado que, por ejemplo, los modelos Lattice Gas contienen elementos probabilísticos pero no son "estadísticos" en el sentido definido arriba. Los modelos "determinísticos" serían aquellos donde la dinámica del modelo es independiente del monitoreo, el cual únicamente proporcionaría valores iniciales o valores de ciertos parámetros. Por el contrario, la dinámica de los modelos "estadísticos" estaría determinada (al menos en parte) por el monitoreo. Hay que destacar que sólo los modelos "determinísticos" proporcionan (si son bien diseñados y calibrados) un claro (no-ambiguo) deslindamiento de la responsabilidad de cada fuente emisora en la concentración de contaminantes en cada área receptora.

El análisis de la contaminación atmosférica involucra el estudio de la compleja interrelación entre multitud de fenómenos físicos y químicos. Pero aún en situaciones muy simplificadas (por ejemplo, dispersión de gases contaminantes no-reactivos en la atmósfera bajo condiciones de viento estacionario y horizontal sobre una orografía simple) la modelación enfrenta serios problemas. El más destacado es el fenómeno de la difusión turbulenta. Las situaciones típicas de la capa límite planetaria están asociadas con escalas de movimiento turbulento que van desde 300 m hasta 1 mm. Es, por lo tanto, muy difícil resolver directamente las ecuaciones de movimiento en dicha capa frontera aun con las grandes y rápidas computadoras modernas. Una "red numérica" que representara una región de la atmósfera de 10 km x 10 km de área superficial y 1 km de altura requeriría alrededor de 10^{20} puntos de la red para tener alguna esperanza (en el mejor de los casos) de resolver todas las fluctuaciones. Más aún, las condiciones iniciales y de frontera con su dependencia temporal deben ser especificadas exactamente. Y, sin embargo, son precisamente los flujos turbulentos los mecanismos fundamentales de la dispersión de contaminantes en la atmósfera. Debido a esto, el fenómeno de dispersión turbulenta suele verse como un proceso estocástico: su dinámica es tan complicada que sólo puede ser tratada como si fuera afectada por componentes aleatorios. Examinaremos un poco más esta cuestión en los parágrafos siguientes.

Los modelos de contaminación atmosférica varían grandemente en cuanto a su complejidad. Algunos utilizan solamente unos pocos parámetros, otros por el contrario utilizan una gran cantidad de ellos. Debido a su alto número de parámetros, los modelos complejos pueden fácilmente ser calibrados para ajustarse de modo más preciso al conjunto de datos disponibles proporcionados por el monitoreo. Desafortunadamente, mientras más grande sea el número de parámetros de entrada cuya especificación el modelo necesita, mayor serán los errores en los datos de salida. Hay un número óptimo de parámetros que minimizan la incertidumbre total del modelo. Por estas razones, un modelo simple puede tener mejores resultados que uno complejo cuando es aplicado sobre una base de datos diferente de la utilizada para su calibración (es decir, el hecho de que el modelo complejo pueda *ajustarse* mejor a los datos que el modelo simple no significa que puede *pronosticar* mejor que éste).

1.2 FACTORES IMPORTANTES EN LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES.

No nos preocuparemos por fenómenos de contaminación en gran escala (por ejemplo, la acumulación de dióxido de carbono en la superficie terrestre) dado que la contaminación atmosférica causada por una fuente única o pequeños grupos de fuentes es un problema local. Las concentraciones elevadas ocurren generalmente desde la vecindad inmediata de la fuente emisora hasta una distancia de varios kilómetros en la dirección del viento. Curiosamente hay una diferencia importante entre el efecto combinado de una serie de fuentes emisoras con respecto al producido por una única fuente. En este caso (multitud de fuentes emisoras distribuidas sobre un área pequeña) se pueden producir altas concentraciones a mucho mayor distancia. [1].

La mayoría de los fenómenos de contaminación atmosférica ocurren dentro de la capa límite planetaria (también llamada el PBL). Esta es la capa más baja de la atmósfera en donde se producen los efectos de superficie de la interface tierra-aire (relacionados con intercambios de momento, calor y humedad entre la atmósfera y la superficie terrestre). La estructura del PBL, dividido en diversas "subcapas", no será descrita aquí. Sin embargo, podemos señalar que en la subcapa más cercana a la superficie terrestre (la "subcapa laminar" o "capa de rugosidad" que se extiende desde la superficie hasta una distancia característica z_0 , la "longitud de rugosidad") la turbulencia es intermitente o no completamente desarrollada y, por lo tanto, el movimiento molecular puede jugar un rol relevante en la transferencia de masa y de energía. Desde z_0 (cuyo orden de magnitud puede variar desde unos 10^{-5} metros para superficies lisas como el hielo hasta alrededor de 10 metros para zonas residenciales en ciudades modernas) hasta el tope del PBL (la distancia característica z_p) los fenómenos de flujo turbulento prevalecen y las transferencias de masa y de energía asociadas a éstos resultan ser por varios órdenes de magnitud mayores que las asociadas a fenómenos moleculares. Estos últimos pueden, por lo tanto, ser despreciados. La turbulencia tiene una fuerte capacidad de mezclado, dado que los remolinos (cuyas dimensiones varían desde 1 mm hasta el tamaño del PBL) son capaces de separar parcelas de aire muy próximas. Así, por ejemplo, la transferencia de energía térmica entre las diferentes partes del PBL está dominada por fenómenos convectivos y no de conducción de calor. Estos fenómenos de movimiento convectivo son inducidos por un gradiente de temperatura vertical que puede ser positivo o negativo dependiendo de la dirección de la transferencia de calor en la superficie terrestre (esto es, de la tierra hacia el aire o a la inversa). Las características más esenciales de la dispersión de la pluma emitida por alguna fuente contaminante están relacionadas fuertemente con el gradiente vertical de la temperatura. Es esencialmente la especificación de este gradiente de temperaturas lo que determina la "clase de estabilidad" de la atmósfera.

El cambio de la temperatura con la elevación es, en la mayor parte de la baja atmósfera, aproximadamente lineal. Ocurren desviaciones importantes de la linealidad cerca de la superficie y en regiones influenciadas por variaciones superficiales bruscas (como las ciudades con sus edificios) o por variaciones en las características topográficas. En la mayoría de los casos la no-linealidad de la temperatura como función de la elevación es simplemente despreciada.

Supongamos que un pequeño volumen de aire sufre un cambio pequeño en la elevación debido a la dinámica del movimiento. Este cambio puede ser negativo o positivo (es decir, el "elemento de volumen" puede elevarse o "caer" por una pequeña cantidad). Dado que se trata de un movimiento rápido a cortas distancias, se puede considerar al "elemento de volumen" como térmicamente aislado en su movimiento. El "elemento de volumen" sufrió entonces un proceso adiabático y se alteró su temperatura debido a dicho proceso (se enfrió y se expandió si se movió en la dirección de menor presión, hacia arriba, mientras que se calentó y se contrajo si se movió en la dirección de mayor presión, hacia abajo). Supongamos que la atmósfera tiene un *gradiente adiabático* (esto es, que una parcela de aire que se eleva una distancia de z_1 a z_2 sin intercambiar calor con sus alrededores sufre el mismo cambio en la temperatura que la diferencia de

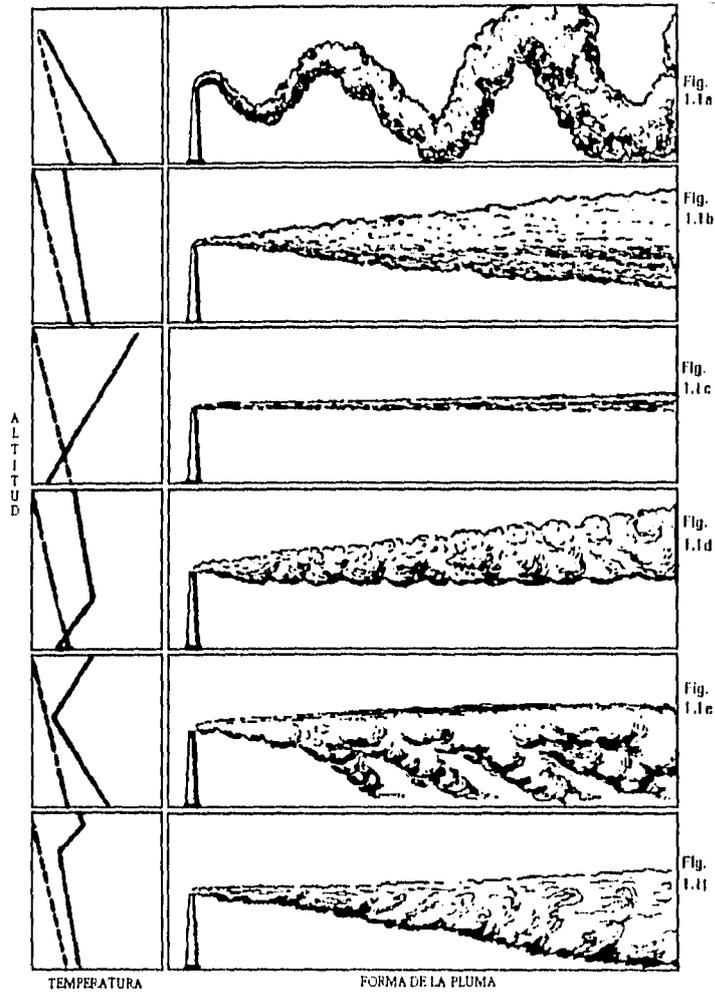


Figura 1.1. Diversos perfiles de temperatura (la línea punteada es el perfil *adiabático*) y las plumas correspondientes a dichas diferentes condiciones de estabilidad atmosférica.

temperaturas atmosféricas entre z_1 y z_2). En este caso, el medio ambiente del "elemento de volumen" tendrá las mismas características termodinámicas que aquél del que partió al comenzar su movimiento. El "elemento de volumen" permanecerá en su sitio y la "fluctuación" no será ni amplificada ni removida. Así, un gradiente cercano al adiabático determina lo que se llama "condiciones neutras de estabilidad". (El

gradiente adiabático del aire seco tiene el valor numérico de $-0.986^{\circ}\text{C}/100\text{ m}$ que frecuentemente es aproximado por una caída de un grado por cada 100 m de elevación). Si, por el contrario, la atmósfera tiene un gradiente no-adiabático el "elemento de volumen" sufrirá una fuerza debida a la boyancia (ya sea positiva o negativa) que incrementará o reducirá su alejamiento del punto de partida. En el caso de que el gradiente de temperatura sea menos negativo que el gradiente adiabático, o positivo (*inversión térmica*), el movimiento es suprimido y el "elemento de volumen" tenderá a regresar a su altura original: tenemos entonces condiciones atmosféricas *estables*. Las condiciones *inestables* ocurren cuando el gradiente es más negativo que el adiabático: el movimiento inicial del "elemento de volumen" es amplificado y diverge del equilibrio, produciendo un fenómeno de turbulencia convectiva.

Las condiciones de estabilidad atmosférica juegan un papel importante para identificar el tipo de pluma que se desprende de una fuente emisora de contaminantes (VER Figura 1.1). En ausencia de efectos térmicos, el gradiente de temperatura atmosférico tiende a ser adiabático. Bajo estas condiciones neutras de estabilidad, la pluma tiene una forma cónica cuya sección transversal es aproximadamente elíptica (con el eje horizontal generalmente más largo que el vertical) (Figura 1.1b). Si tenemos condiciones inestables (un gradiente de temperaturas muy negativo como el que se produce durante el día debido a que el sol calienta la tierra directamente y el calentamiento de la atmósfera es indirecto a través de la superficie terrestre), aumenta la intensidad de la turbulencia y la dispersión de la pluma. Cuando los vórtices son más grandes que la sección transversal de la pluma, esta adquiere una forma como la de la figura 1.1a. En el caso de condiciones estables en la atmósfera tenemos una supresión de la turbulencia en la dirección vertical produciendo una pluma semejante a la de la figura 1.1c donde el eje horizontal (de la sección transversal) suele ser mucho más grande que el eje vertical. Las otras tres plumas que aparecen en la figura 1 son producidas bajo gradientes de temperatura no-uniformes teniendo discontinuidades que separan capas de diferente clase de estabilidad. Las plumas de las figuras 1.1e y 1.1f son generalmente las más críticas en lo que respecta a altas concentraciones de contaminantes al nivel del suelo. La capa superior (térmicamente estable) suprime la dispersión hacia arriba mientras que esta es amplificada hacia abajo debido a una capa neutra o inestable que comienza a la altura de la pluma o más abajo. Estas condiciones atmosféricas son causadas (por ejemplo) por el calentamiento de la superficie terrestre en las primeras horas de la mañana después de haber imperado condiciones estables durante la noche. También pueden ser causadas por transferencia de calor a través del aire entre regiones de la superficie terrestre a temperaturas marcadamente diferentes (como, por ejemplo, entre el agua y la tierra o entre regiones rurales y urbanas). Finalmente, las condiciones atmosféricas de la figura 1.1d (capa inestable desde la altura aproximada de la pluma hacia arriba; la capa superficial en condiciones estables) son las más favorables en lo que respecta a los índices de concentración de contaminantes a nivel del suelo.

El movimiento del aire en un lugar determinado se caracteriza mediante la suma de dos términos: un valor "promedio" de la velocidad (que es al que se refieren usualmente cuando se habla de la "velocidad del viento") más una componente turbulenta. La turbulencia, que es el mecanismo fundamental de la dispersión de contaminantes en la atmósfera, puede ser inducida térmicamente (convección) o puede ser producida por la fricción mecánica entre diferentes parcelas de aire con movimiento relativo (o entre el aire y la superficie terrestre). Usualmente a una elevación mayor la intensidad de la turbulencia decrece pero las escalas de los vórtices se hacen cada vez mayores. Como se explicó en el parágrafo 1.1 la turbulencia es muy difícil tanto de tratar teóricamente como de determinar experimentalmente. La mayoría de los cálculos de la difusión dependen de especificaciones indirectas de la turbulencia mediante los perfiles de temperatura y de velocidad del viento.

En muchos casos suele hacerse la simplificación de considerar a la velocidad del viento (el término "promedio" del que hablamos arriba) como dependiente únicamente de la elevación (en general, desde luego, el campo de velocidades es mucho más complicado). Existe una serie de fórmulas que los meteorólogos suelen utilizar como perfiles de velocidad del viento "estándar" (tales como el perfil logarítmico, por ejemplo, del que se hablará con más detenimiento en el capítulo 2) los cuales han sido

obtenidos ya sea empíricamente o mediante el análisis de situaciones físicas sumamente simplificadas.

En muchas situaciones, sin embargo, es de gran importancia considerar los cambios en la dirección del viento con la elevación ya que producen un incremento en la dispersión horizontal de la pluma debido a la fricción. La capa planetaria entera sufre grandes cambios en la dirección del viento con la elevación debido a la dinámica del movimiento de gran escala, principalmente por la fuerza de Coriolis causada por la rotación de la tierra. Sin embargo, excepto para enormes fuentes emisoras, las dimensiones de la pluma no son generalmente tan grandes como para que estos cambios se vuelvan un factor importante en el transporte y dispersión de los contaminantes.

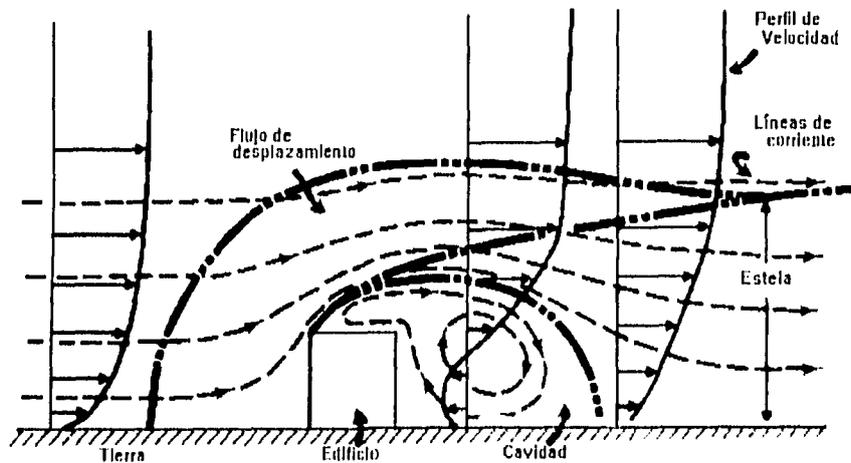


Figura 1.2.- Aspecto cualitativo que toma un flujo alrededor de un edificio de forma cúbica.

Por el contrario, si la emisión de la pluma se realiza dentro de la "capa de rugosidad" como fue definida más arriba (esto es, la capa cercana a la superficie terrestre fuertemente influenciada por las características de dicha superficie) no podrán despreciarse los cambios en la dirección del viento con la elevación. Cambios fuertes de la dirección del viento con la altura se producirán por ejemplo en regiones montañosas o en las ciudades debido al irregular terreno cubierto de edificios. El movimiento del aire alrededor de un edificio aislado tiene un aspecto cualitativo más o menos general (ilustrado en la figura 1.2). Las propiedades cuantitativas varían ampliamente con la geometría del edificio y la dirección del viento. El primer efecto de un edificio sobre una corriente que "colisiona" con él es la deflexión de la corriente de aire moviéndose hacia dentro de una "región de desplazamiento". La velocidad arriba del edificio incrementa su magnitud pero no hay cambios en la turbulencia preexistente. En la región por debajo de la corriente de aire y por encima del edificio se origina una *estela*, una región de una gran intensidad de turbulencia. Las dimensiones (horizontales y verticales) de los vórtices de la estela se incrementan en la dirección del viento pero la intensidad de la turbulencia decrece. Eventualmente, a una distancia de alrededor de 10 veces la altura del edificio, la estela se vuelve indistinguible del medio que la rodea. Se distingue también una región dentro de la estela, llamada la cavidad, que tiene aún más altos niveles de turbulencia que producen variaciones marcadas en la dirección del viento, inclusive la total inversión de dicha dirección. Si una pluma

es emitida dentro de la estela tendrá una mucho mayor dispersión que en el medio ascendente pero se moverá continuamente en la dirección de la corriente del viento. Por el contrario, si la pluma es emitida dentro de la cavidad tiende a dispersarse dentro de la región.

Este mismo tipo de dinámica crea distribuciones de concentración y de velocidad del viento altamente asimétricas en la vecindad inmediata de la fuente emisora. Excepto bajo ciertas condiciones, esta asimetría tiende a suavizarse y el comportamiento posterior de la pluma es esencialmente independiente de la asimetría inicial. Sin embargo, la pluma puede ser fuertemente alterada si se produce una condición de "downwash" donde partes significativas del gas emitido caen dentro de la estela vecina a la fuente emisora: por un lado la pluma dejará la región alrededor de la fuente a elevaciones mucho más bajas que las normales; por el otro, se producirá una mucho mayor dispersión del gas contaminante (se incrementará la sección transversal de la pluma y, con esto, disminuirá la elevación de la pluma). Las características de la sección transversal de la pluma y de la forma de la línea central de la pluma cerca de la fuente emisora no son predichas por las ecuaciones usuales de la ascensión de la pluma. Estas son aplicables exclusivamente a grandes distancias (como quedará más claro en el parágrafo 1.4). Como un resultado, la ascensión de la pluma predicha en la mayor parte de los modelos resulta siempre mayor que la ascensión real.

Desde luego, los fenómenos micrometeorológicos involucrados en el transporte y la dispersión de contaminantes son mucho más complejos que lo que este breve y sobreesimplificado esbozo puede haber sugerido. Intervienen también, por ejemplo, los vientos meteorológicos locales (tales como brisas marinas, vientos de montaña, etc), la elevación de la inversión de la temperatura que limita a z_i , los movimientos verticales atmosféricos debidos a sistemas de diferencias de presión, etc.

1.3. MODELACIÓN MATEMÁTICA DE LA MICROMETEOROLOGÍA.

Los modelos matemáticos que intentan simular las condiciones micrometeorológicas en una región determinada pueden ser diseñados tanto para estudiar los fenómenos meteorológicos en sí como para proporcionar los datos de entrada necesarios que requiere cualquier modelo de transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera.

P.Zannetti hace la siguiente distinción entre modelos matemáticos diseñados para estudiar micrometeorología: modelos de diagnóstico y modelos de pronóstico. Los modelos de diagnóstico están basados en un análisis de datos meteorológicos disponibles. Generalmente incluyen poca información física (en muchas ocasiones ninguna). Los datos de entrada son valores locales del campo de velocidades (o de cualquier otro parámetro meteorológico, como la temperatura) obtenidos mediante medición directa en las estaciones meteorológicas. La información de salida es el campo de velocidad (o de temperatura, etc) evaluado en todo el espacio (o en una red tridimensional) mediante una extrapolación de los valores locales de entrada. Estos modelos no intentan predecir la evolución de la micrometeorología sino proporcionar la mejor estimación de un supuesto "estado estacionario" meteorológico. Un ejemplo muy sencillo de este tipo de modelos es el IBM-2 [este estima la velocidad del viento en todos los puntos de una red computacional mediante los siguientes pasos: (1) una velocidad inicial es estimada en cada punto como la velocidad medida en la estación de observación más cercana, (2) estos valores son corregidos mediante un promedio pesado de la velocidad en los puntos adyacentes al punto de interés, (3) se realiza esto hasta obtenerse un estado estacionario del campo de velocidades]. Otros modelos algo más sofisticados introducen más información física, por ejemplo aproximan la ecuación de conservación de la masa para flujos incompresibles, $\nabla \cdot \vec{u} = 0$.

Los modelos de pronóstico meteorológico intentan describir la evolución del sistema atmosférico a partir de las condiciones iniciales a través de la integración espacio-temporal de las ecuaciones de conservación de la masa, la energía, el momento, la humedad, etc. bajo algunas condiciones de frontera preescritas. Desde luego se utiliza sólo algún conjunto restringido de estas ecuaciones, un sistema de ecuaciones que a la vez sea *completo* (esto es, que permita que todas las variables dependientes que aparecen en el sistema pueden obtenerse mediante la integración como funciones del tiempo y del espacio) y describa suficientemente bien la complejidad del fenómeno estudiado. La integración de las ecuaciones tiene, sin embargo, una dificultad de principio ligada a las características intrínsecas de los fenómenos turbulentos que se trata de modelar. En este trabajo únicamente vamos a dar una explicación sobresimplificada y muy breve de la turbulencia con el propósito de exponer (también de manera muy simple) las limitaciones de los modelos de pronóstico meteorológico y la manera aproximada en que muchos han tratado de resolver estas dificultades.

A primera vista el movimiento turbulento de un fluido puede ser visto como una colección caótica de diferentes movimientos. Sin embargo, puede ser idealizada como un movimiento compuesto por una variedad de remolinos (o vórtices) de diferentes tamaños. Frecuentemente los físicos representan la turbulencia mediante un *espectro* de energías correspondientes a las diferentes escalas de los vórtices. La fricción entre parcelas de aire llevando a cabo un movimiento de gran escala origina remolinos de menor tamaño y éstos a su vez generan remolinos más pequeños aún. Esta transferencia de energía de remolinos "grandes" a "pequeños" es conocida usualmente como la "cascada de energía". En los remolinos de la escala menor, la cascada de energía es disipada y transformada en energía térmica debido a la viscosidad molecular. En la modelización numérica de los fenómenos turbulentos se utilizan redes computacionales tales que el espaciamiento de los puntos de la red es mucho mayor que las escalas correspondientes a una amplia región del espectro de la turbulencia. Esto significa que sólo los movimientos de gran escala pueden ser modelados directamente. Por el contrario, los movimientos de pequeña escala tienen que ser aproximados mediante una descripción estadística (aproximada).

Se puede definir el "valor medio" de la velocidad del viento como la parte del movimiento que es resoluble (o "detectable") utilizando mediciones o modelos meteorológicos. Llamaremos a este "valor medio" de la velocidad \vec{u} , la "velocidad del viento". La "desviación" \vec{u}' de la velocidad *real* del aire con respecto a dicho "valor medio" es la componente turbulenta de la velocidad del aire. De este modo, podemos escribir:

$$\vec{V} = \vec{u} + \vec{u}'$$

donde \vec{V} es la velocidad real del aire en el punto en cuestión.

Es claro que los movimientos frecuentemente causan variaciones en la temperatura, la humedad, las concentraciones de contaminantes o de cualquier componente de la atmósfera (esto sucede generalmente cuando hay gradientes medios de estas variables a través de la región atmosférica de que se trata). Necesitamos, entonces, descomponer a su vez estas variables en un término "medio" y un término "turbulento".

Hay que remarcar que hay muy diversas interpretaciones de la descomposición del campo de velocidades en términos "medio" y "turbulento". No trataremos ese problema aquí.

Consideremos la ecuación de conservación del momento en la mecánica de fluidos:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = -\vec{V} \cdot \nabla \vec{V} - \left(\frac{1}{\rho} \right) \nabla p - g\hat{k} - 2\vec{\Omega} \times \vec{V} \quad (1.1),$$

donde $\frac{D\vec{V}}{Dt} = \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V}$ es el campo de aceleraciones y los otros términos son respectivamente las densidades de fuerza debidas a las diferencias espaciales de la presión, el campo gravitacional de la tierra y la fuerza de Coriolis (causada por la rotación de la tierra). Para tratar el problema de la turbulencia se suele promediar la ecuación. En términos vagos, este promedio se lleva a cabo sobre un conjunto representativo que toma en cuenta todas las posibles "realizaciones" del fenómeno bajo las mismas condiciones. De esta manera, la ecuación 1.1 puede ser transformada en una ecuación donde no aparece \vec{V} sino $\bar{u} = \langle \vec{V} \rangle$. Sin embargo, la componente turbulenta no puede ser eliminada de las ecuaciones ni siquiera después de realizar esta operación. En las ecuaciones aparecen términos que dependen de las cantidades $\langle u_i' u_k' \rangle$. Estos términos provienen de realizar el promedio del término convectivo $\vec{V} \cdot \nabla \vec{V}$ en la ecuación (1). Las cantidades $\langle u_i' u_k' \rangle$ no son nulas porque las diversas componentes turbulentas no son independientes estadísticamente. Pero la aparición de estas nuevas variables (los flujos turbulentos) provoca que el sistema de ecuaciones ya no sea completo. Necesitamos entonces escribir los flujos turbulentos en función de las variables medias. Como no hay ningún principio básico que nos permita hacer eso, se realiza mediante suposiciones semiempíricas. A estas suposiciones se les conoce en la literatura como *hipótesis de cerradura*. La más simple de todas es la "teoría K" que relaciona los flujos turbulentos con los gradientes de las variables promedio a través de términos de proporcionalidad llamados "coeficientes de transporte turbulento".

La introducción de la hipótesis de cerradura nos permite describir al sistema meteorológico mediante un sistema de ecuaciones diferenciales completo. Sólo en casos excepcionales muy sencillos puede obtenerse una solución analítica de este sistema de ecuaciones. En el caso más general se debe obtener la solución de las ecuaciones mediante métodos numéricos (los cuáles pueden estar basados en técnicas muy diferentes como métodos de diferencia finita, métodos espectrales, pseudo-espectrales, métodos de elemento finito, esquemas de interpolación, etc). Finalmente, hay que destacar que hay ciertas objeciones a la confrontación directa de los resultados de la integración con el experimento ya que son estimaciones de un promedio sobre un conjunto representativo de la velocidad hidrodinámica \vec{V} , mientras que los datos obtenidos por monitoreo son promedios sobre algún período de tiempo (y ambos promedios no son necesariamente idénticos).

1.4. LA MODELACIÓN DEL TRANSPORTE Y LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES EN LA ATMÓSFERA.

Aunque en el mundo real la ascensión de la pluma y la dispersión alrededor de la línea central de ésta son fenómenos interrelacionados, en las modelaciones más usuales de la contaminación atmosférica se analizan independientemente uno del otro. En estas técnicas, la pluma completa es formada por una superposición de las dos características.

La altura efectiva de la pluma h_e (elevación de la línea central relativa al nivel del suelo) es la suma de la altura de la "chimenea" (o de la fuente emisora, en general) h_s y la "ascensión de la pluma" Δh . Los valores de la ascensión de la pluma varían fuertemente con las características de la dinámica próxima a la fuente emisora, así como de las variables atmosféricas. Por el contrario, la dispersión de la pluma depende principalmente de la turbulencia atmosférica. Debido a esto hay una cierta "justificación" de la separación del problema del transporte y dispersión de contaminantes en dos problemas separados e independientes. (Ver figura 1.3).

El problema de la "ascensión de la pluma" es entonces el de describir a Δh como función de la distancia en la dirección del viento. Es decir, el problema de describir la "línea central de la pluma". Existen varias definiciones no equivalentes de la "línea central de la pluma" pero no discutiremos ese problema aquí. La mayoría de las ecuaciones de ascensión de la pluma han sido desarrolladas para características atmosféricas que son uniformes o que varían suavemente. La ascensión de la pluma es dependiente del crecimiento de la pluma causado a su vez por la turbulencia atmosférica. Esta no es introducida en los modelos directamente sino a través de algunos parámetros. En general, estos modelos no pueden ser aplicados a regiones de grandes variaciones en la turbulencia como las que son causadas por los edificios y otras irregularidades de superficie (Ver párrafo 1.2).

Deben distinguirse dos tipos de factores en las características de las variables iniciales (las que determinan las características de la pluma en el momento de la emisión): los factores que influyen en el momento de la pluma y los que influyen en su boyancia. La rapidez de la ascensión inducida por el momento es inicialmente alta y decrece rápidamente con la distancia. Las fuerzas debidas a la boyancia no producen una gran rapidez inicial pero continúan actuando durante un periodo amplio de tiempo. En la mayor parte de las plumas producidas por emisiones industriales o domésticas, la ascensión está dominada por la boyancia. Generalmente, las ecuaciones de ascensión de la pluma desprecian totalmente el momento inicial. Tal pluma es llamada una "pluma boyante".

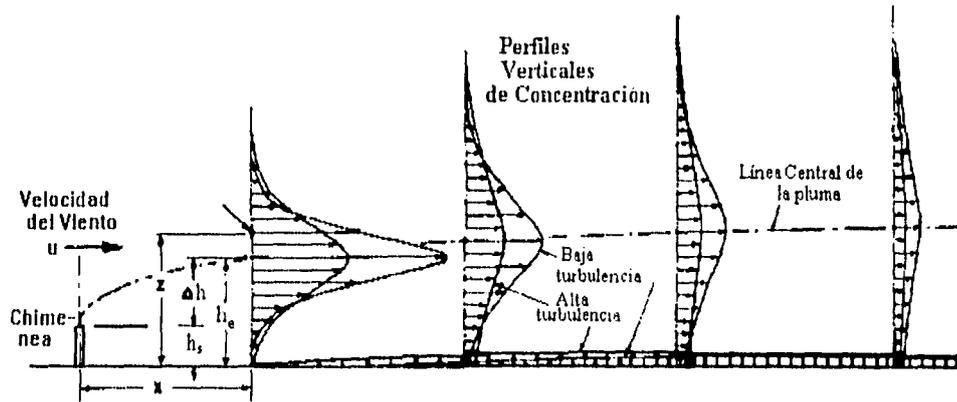


Figura 1.3.- La evolución de la pluma contaminante es descompuesta en dos procesos supuestamente independientes: la ascensión de la pluma hasta h_e , y la dispersión de la pluma si se supone que la línea central es horizontal y de altura h_e .

En contraste con las relativamente pocas ecuaciones utilizadas para describir la dispersión de los contaminantes, existe una multitud de ecuaciones y técnicas desarrolladas para estudiar la ascensión de la pluma. Puede haber variaciones significativas entre las ecuaciones de diferentes investigadores aplicadas a los mismos datos debido a las diferencias de interpretación y énfasis en los diversos factores físicos involucrados [1].

Hay que remarcar que la mayor parte de los modelos y técnicas utilizadas para la ascensión de la pluma no dan como resultado ninguna especificación de la línea central de la pluma. Algunas ecuaciones permiten obtener la altura como función de la distancia en la dirección del viento pero la gran mayoría simplemente da un valor constante que la pluma alcanza a grandes distancias en la dirección del viento. Teóricamente, una pluma bajo condiciones atmosféricas neutras o inestables ascenderá indefinidamente. En la realidad perderá eventualmente su identidad debido a la continua dispersión. Por el contrario, bajo condiciones de estabilidad atmosférica la pluma alcanzará una altura donde su boyancia se anula y alcanza un equilibrio térmico con sus alrededores. [Puede pasar que debido a su inercia exceda esta altura y retorne posteriormente]. Pero lo que nos interesa aquí es que esta altura h_e es introducida como un valor constante en los modelos más usuales de dispersión de contaminantes, los modelos gaussianos.

Si una pluma es emitida dentro de una atmósfera de turbulencia relativamente uniforme, la dispersión es en todas direcciones y tiene propiedades de geometría y distribución de concentraciones que puede ser predicha mediante métodos analíticos. Las ecuaciones de dispersión de plumas resultando de uniformidad de la turbulencia (siendo diferentes, sin embargo, sus componentes y e z) producen una distribución de concentraciones gaussiana alrededor de la línea central. Esta forma de la dispersión de la pluma es ilustrada en la figura 1.3. Deben hacerse, además de la uniformidad de la turbulencia, otras suposiciones simplificadoras para obtener una distribución de concentración gaussiana: las emisiones proceden de un sólo punto, una "fuente virtual" (lo cual evidentemente no es realista en la región cercana a la fuente emisora); además la pluma no tiene momento ni boyancia inicial (la línea central es horizontal elevada a la altura h_e).

Evidentemente estas condiciones en muchos casos sobresimplifican el problema: no es posible describir fenómenos atmosféricos donde el gradiente de temperatura se modifique notablemente en la región de interés (y, en general, condiciones atmosféricas diferentes de las estables), tampoco pueden describirse fenómenos de dispersión de contaminantes donde las condiciones iniciales de emisión sean importantes (como en el fenómeno de 'downwash') ni donde haya cambios significativos en la dirección del viento debidos, por ejemplo, a irregularidades en la superficie terrestre (piénsese en una ciudad con sus múltiples edificios). A pesar de estas limitaciones, la ecuación de la pluma gaussiana encuentra aplicaciones fructíferas en un amplio rango de condiciones atmosféricas. En muchos casos, aunque las concentraciones instantáneas de la pluma sean muy irregulares, una promediación para un tiempo suficientemente largo (alrededor de una hora) genera distribuciones muy próximas a la campana de Gauss (con menor aproximación en lo que respecta a la dirección vertical).

Concretamente la ecuación de la pluma gaussiana (en su forma más simple) es la siguiente:

$$c = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z|\bar{u}|} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta}{\sigma_y}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{h_e - z_r}{\sigma_z}\right)^2\right]$$

donde $c = c(\vec{s}, \vec{r})$ es la concentración en la posición \vec{r} debida a las emisiones en \vec{s} ; Q es la tasa de emisión, $\sigma_y(j_y, d)$ y $\sigma_z(j_z, d)$ son las desviaciones estándar vertical y horizontal respectivamente de la distribución de concentración espacial de la pluma como función de las componentes turbulentas de la velocidad j_y y j_z así como de la distancia d a lo largo de la dirección del viento entre el receptor y la fuente; Δ es la distancia transversal al viento entre la fuente y el receptor; z_r es la altura en que se encuentra ubicado el receptor.

Esta ecuación puede ser generalizada muy fácilmente para incluir reflexión (total o parcial) en la superficie terrestre o en el tope del PBL.

La ecuación de pluma gaussiana, tal como fue escrita arriba, se refiere claramente a un estado estacionario [c es independiente del tiempo]. Utiliza condiciones meteorológicas (viento y estados turbulentos) que deben considerarse homogéneas y estacionarias en el área modelada. No puede trabajar en condiciones de calma donde $|\vec{u}|=0$. Hay, sin embargo, generalizaciones de la ecuación de pluma gaussiana que pueden modelar efectos de fumigación, de "downwash" y otros fenómenos (Existen algunos pocos modelos gaussianos que modelan efectos producidos por terrenos complejos).

Uno de los mayores desafíos de los modelos gaussianos es el cálculo de las desviaciones estándar σ_y y σ_z . Diversas fórmulas han sido propuestas para calcular dichas varianzas en función de la turbulencia atmosférica, la mayoría de ellas con una justificación semiempírica.

Aunque en su actividad práctica los meteorólogos utilizan más frecuentemente los modelos gaussianos, se han elaborado modelos matemáticos de la dispersión de contaminantes que intentan ser más flexibles y contener mayor información física. De un modo más o menos simplificado, estos modelos pueden ser divididos en modelos eulerianos y lagrangianos. En los modelos eulerianos, el sistema de referencia permanece fijo y el movimiento del aire tanto como la concentración de contaminantes y las variables termodinámicas representan "campos eulerianos" (definidos como el valor de la propiedad en cuestión que tiene el elemento de fluido que está pasando en un determinado tiempo t por una determinada posición \vec{r}).

Por el contrario, los modelos lagrangianos describen a los elementos de volumen desde un sistema de referencia que sigue el movimiento medio local instantáneo. Sin embargo, el término "lagrangiano" se ha extendido para describir todos los modelos en que la pluma es descompuesta en "elementos" de manera que el comportamiento de cada uno es independiente del de los demás.

Un ejemplo de modelo euleriano es el que se basa en la integración de la ecuación de conservación de la masa de la especie c (el contaminante estudiado):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\vec{V} \cdot \nabla c + D\nabla^2 c + S,$$

donde D es la difusividad molecular y S la razón de emisión.

Nuevamente para superar el problema de la turbulencia se promedia la ecuación sobre el conjunto representativo (constituido por todos los "experimentos" realizables bajo las mismas circunstancias). Aquí también hay que introducir una hipótesis de cerradura que nos lleva a una ecuación no sobre la concentración sino sobre su promedio $\langle c \rangle$. La ecuación de difusión debe ser completada por apropiadas condiciones de frontera.

Es interesante la siguiente observación [1]: Consideremos la ecuación de difusión (promediada) unidimensional $\frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x}$. Para modelar esta ecuación numéricamente hay que discretizarla. Sucede sin embargo que el análisis de los términos truncados en un esquema simple de diferencia finita muestra que el error generado es proporcional a $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ que es un término de tipo difusivo que fácilmente puede generar una difusión artificial a través de la red numérica del mismo orden de magnitud de la difusión real. Este tipo de limitaciones parecen ser la desventaja mayor de este tipo de modelos]

Un ejemplo de modelos lagrangianos es el modelo gaussiano de pluma segmentada. Este es una extensión del modelo gaussiano que extiende su aplicabilidad a condiciones atmosféricas no-estacionarias y no-homogéneas (especialmente permite modelar cambios en la dirección del viento). La pluma es descompuesta en elementos independientes cuyas características son función de las condiciones meteorológicas locales y temporales encontradas por los elementos de pluma a lo largo de su recorrido. Cada segmento, por su parte, genera un campo de concentración de contaminantes de perfil gaussiano.

1.5. LOS MODELOS DE GASES EN REDES.

Como se analizará en forma más detallada en el capítulo 3 sustancias con muy diferentes estructuras microscópicas pueden comportarse de acuerdo a las mismas leyes macroscópicas. Los líquidos y los gases lo hacen así y es precisamente por esta razón que pueden ser agrupados ambos bajo la categoría única de "fluidos". En realidad, las características esenciales de las ecuaciones macroscópicas dependen principalmente de las leyes de conservación microscópicas (la conservación del número de moléculas, del momento, de la energía) y de las simetrías propias del sistema a nivel molecular (desde luego podemos postular que un "fluido simple" es isotrópico, es decir que tiene las mismas propiedades físicas en todas las direcciones). Generalmente los detalles microscópicos (tales como la naturaleza exacta de las fuerzas intermoleculares) influyen en los valores de los "coeficientes de transporte" pero no en la forma de las ecuaciones diferenciales que gobiernan el comportamiento de los fluidos.

Este tipo de observaciones permiten justificar una nueva estrategia de simulación de fenómenos de dinámica de fluidos que ha producido mucho interés dentro de las más diversas comunidades científicas. Esta estrategia está basada en la creación de *modelos de micromundos ficticios*. Nos referimos a los modelos de gases en redes, tales como los modelos de autómatas celulares ("Lattice Gas") y la técnica conocida como "Lattice Boltzmann Equation" (que podría quizá traducirse como "ecuación de Boltzmann modelada sobre una red") a la cual nos estaremos refiriendo a lo largo de todo el trabajo cuando hablemos de los modelos Lattice Boltzmann.

Los autómatas celulares fueron introducidos en los años cincuenta por dos matemáticos de primer nivel, John von Neumann y Stanislaw Ulam. Consisten de una red, cada sitio de la cual puede hallarse en alguno de un número finito de estados (usualmente codificados por variables booleanas). El autómata evoluciona en pasos discretos, siendo actualizados los sitios *simultáneamente* por medio de alguna regla predeterminada (esta puede ser de tipo determinística o bien no-determinística, esto es, estar sujeta a alguna clase de mecanismo aleatorio). Los estados actuales en un sitio dependerán enteramente de los estados precedentes en el sitio en cuestión y en un conjunto finito de vecinos de éste (mientras más pequeño sea el número de vecinos que ejercen influencia sobre el valor actualizado del estado en un sitio, el algoritmo resultará más eficiente). Como puede observarse ya de esta breve descripción, una notable característica de los modelos de autómatas celulares es que son algoritmos *inherentemente paralelos* [4] [5].

La idea de que los autómatas celulares pudieran ser útiles para modelar las ecuaciones de la hidrodinámica (esto es, aproximar sus soluciones) fué propuesta por Hardy, de Pazzis y Pomeau en 1973 y desarrollada por Uriel Frisch, Brosl Hasslacher e Yves Pomeau en su artículo "Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation", publicado en 1986 [4]. A partir de este artículo se desarrolló toda una corriente de investigación que busca explorar las posibilidades y limitaciones que tienen los modelos de gases en redes (como se conoce a todos los modelos derivados del modelo original de Frisch, Hasslacher y Pomeau) para estudiar una gran diversidad de problemas de la física tales como magnetohidrodinámica, efectos de

boyancia, modelos de reacción-difusión, fenómenos de interfaces y combustión entre otros. Muy destacadamente los modelos de gases en redes han resultado ser la técnica *ideal* para el estudio del movimiento de fluidos a través de medios porosos.

Los modelos de gases en redes se definen sobre una red regular cada uno de cuyos sitios está caracterizado por un conjunto finito de posibles direcciones del movimiento de una partícula que se encuentre en dicho sitio en un paso de tiempo determinado. En cada dirección de movimiento puede o no haber una molécula moviéndose en el sitio en cuestión. El sistema evoluciona en pasos temporales discretos siguiendo una serie de reglas que gobiernan la propagación y las colisiones de las partículas del gas de manera consistente con las leyes de conservación de la masa, el momento y la energía. Esta breve descripción será analizada con más detenimiento en el capítulo 4.

Hay que destacar que aún no han sido analizadas rigurosamente las limitaciones de aplicación de los modelos de gases en redes. Frisch, Hasslacker y Pomeau demostraron su aplicabilidad a flujos incompresibles de baja velocidad cerca del equilibrio. Sin embargo no se sabía qué podría ocurrir en flujos bajo condiciones muy diferentes. Por otra parte, en los modelos que permiten incluir propiedades termodinámicas (como el modelo ARIANNA que examinaremos más tarde), éstas presentan un aspecto muy peculiar (Ver parágrafo 4.3. capítulo 4). La justificación de estas técnicas descansa entonces sólo en forma parcial en la teoría. Ciertamente los "micromundos ficticios" propios de estos modelos buscan precisamente cumplir con *las leyes microscópicas de conservación y de simetría que determinan la forma de las ecuaciones generales de la hidrodinámica* y esta es la única razón intrínseca a la definición de la dinámica de estos modelos que nos permite establecer una relación entre estos "gases booleanos" y los fluidos reales. En realidad, no se trata de estudiar directamente el comportamiento de los fluidos propiamente dichos (o cuando menos de los fluidos *reales*), sino de sistemas en algún sentido "análogos" a éstos (en el caso de los modelos de gases en redes, la analogía está en las leyes microscópicas de conservación y simetría; en el caso de los métodos de Lattice Boltzmann, la analogía está en el comportamiento *estadístico* del sistema).

Por otro lado, las principales razones del éxito en la promoción de los modelos de gases en redes han sido los resultados obtenidos directamente en las simulaciones computacionales (al margen de la teoría). A partir del artículo ya citado de 1986 se escribieron muchos códigos computacionales para determinar la región de validez de estas técnicas. El resultado obtenido en la mayoría de los casos es que *los autómatas celulares se comportan realmente como fluidos, cuando menos desde el punto de vista cualitativo*.

Los modelos de gases en redes tienen una serie de ventajas sobre los métodos tradicionales de modelación de la dinámica de fluidos (basados en la solución numérica o analítica de las ecuaciones de la hidrodinámica bajo diferentes condiciones). En primer lugar son un medio para evitar enfrentarse al "problema de la cerradura" asociado al comportamiento turbulento de los fluidos. Esta "virtud" puede resultar al mismo tiempo un riesgo puesto que en el planteamiento de los modelos de autómatas celulares no se hace una distinción intrínseca entre flujo "medio" y "turbulento". Por el contrario, se supone que el comportamiento turbulento del "gas" se presentará en las simulaciones por sí mismo sin necesidad de haber sido introducido "a priori". Quizás pudiera hablarse de que se trata de un procedimiento "experimental" donde el objeto de experimentación no son los fluidos reales sino los propios modelos computacionales de "gases booleanos".

Otra característica sumamente ventajosa de las técnicas de autómatas celulares es su extrema simplicidad. Tienen además una buena cantidad de ventajas de implementación (el algoritmo es inherentemente paralelo; no hay problemas de inestabilidad numérica-es usual que la máquina se detenga en cálculos con métodos numéricos-; la energía y el momento se conservan sin errores de redondeo; todos los bits son aprovechados igualmente). Varios grupos han estudiado incluso la posibilidad de construir máquinas diseñadas especialmente para cálculos de modelos de gases en redes. Según los más entusiastas estas

técnicas podrían ser aplicables a cualquier cálculo: adicionando más partículas por sitio, más direcciones de partículas, más velocidades, más variedad de reglas de colisión se pueden obtener cada vez mejores aproximaciones. Sin embargo, esto llevará claramente un costo computacional (por ejemplo, en memoria o en tiempo de corrida). Este problema no ha sido todavía muy bien analizado.

Hay, sin embargo, también una serie de limitaciones importantes de los modelos de gases en redes. Algunas de las más significativas son: el rango de velocidades es muy limitado; el tensor de esfuerzos propio del "gas" no es isotrópico ni es invariante de Galileo (esto es, depende de la velocidad macroscópica); para modelos que asumen una sola rapidez para todas las partículas la velocidad del sonido resulta ser de aproximadamente $\frac{2}{3}$ de la rapidez por partícula (lo cual implica que no puedan ser simulados flujos con grandes números de Mach). Otro problema es que se produce ruido en los resultados debido a las características "discretas" de estos modelos. Una manera de "suavizar" los resultados es promediar sobre el espacio y/o el tiempo. (La promediación sobre el tiempo sólo tiene sentido para flujos estacionarios). Si el modelo es no-determinístico puede utilizarse un método mejor que consiste en hacer un promedio sobre una muestra de "experimentos" realizados bajo las mismas condiciones. Otro problema de buena parte de los modelos de autómatas celulares es que cumplen con algunas leyes de conservación espúreas que afectan la dinámica de los autómatas en el nivel macroscópico. Sin embargo, existen muchas reglas de colisión especialmente diseñadas para remover estas leyes de conservación (Ver capítulo 4).

Una ventaja de los modelos de gases en redes de la que no hemos hablado y que, sin embargo, es una de las cruciales, es la facilidad de implementar en ellos condiciones iniciales y de frontera complejas. En este aspecto tiene una indudable superioridad sobre los métodos tradicionales de simulación de la dinámica de fluidos. Es precisamente por esta razón que han resultado de particular utilidad en el estudio del movimiento de fluidos a través de medios porosos y es también una de las razones principales por las que nosotros consideramos que estos modelos podrían ser muy apropiados tanto para la reconstrucción de campos de viento sobre terrenos complejos (con el fin de obtener campos de entrada para modelos de dispersión y transporte de contaminantes) como para el estudio de la contaminación propiamente dicha.

De hecho, la aplicación de los modelos de gases en redes para la simulación de los fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera fue una propuesta original presentada por los investigadores del I.I.E. durante la International Conference AIR POLLUTION 93 llevada a cabo en Monterrey, NL. en febrero de 1993 y en el International Symposium on Heat and mass Transfer in Energy Systems and Environmental Effects realizado en Cancún, Q.Roo en agosto de 1993. Uno de los resultados del trabajo de investigación realizado sobre esta línea desde aquellas fechas es ARIANNA, un modelo de gases en redes bidimensional que presentaremos en el capítulo 4 (donde será analizada con cierto detalle). El modelo ARIANNA está orientado precisamente a la aplicación de las técnicas de autómatas celulares al problema del diagnóstico de campos de viento.

Una posible objeción contra los modelos de gases en redes es que consiste en un número de partículas (del orden de 10^5) enormemente pequeño en relación con el de un sistema físico como los que nos proponemos simular. Otra manera de pensar el carácter microscópico de estos modelos es comparar el valor del cociente entre el camino libre medio y las dimensiones de la red en el "gas modelo" con el valor de dicho cociente para el sistema físico a simular. Si se deseara simular un sistema con el mismo valor de dicho cociente la red entera del modelo representaría aproximadamente un centímetro cuadrado. Podría quizá utilizarse la teoría de similitud para extrapolar los cálculos a los de un sistema mayor, pero sería necesario tener una teoría muy completa de las "leyes macroscópicas" que cumple el "gas modelo" (por ejemplo, si aproxima suficientemente bien las ecuaciones de Navier-Stokes). Aquí se ha optado por seguir un enfoque puramente empírico. Es decir, se considera que el modelo funciona si logra simular con

razonable aproximación lo que el sistema físico realiza efectivamente. Así, por ejemplo, los valores numéricos en metros y segundos que se les asignan a las distancias y tiempos naturales del modelo en varias de las simulaciones con ARIANNA se eligieron arbitrariamente para realizar una mejor comparación con el sistema a simular. De cualquier manera, una de las principales ventajas de los modelos Lattice Boltzmann que describiremos a continuación (y cuyo análisis es el núcleo del trabajo de tesis) es *que no es un modelo microscópico* y que aproxima bastante bien las ecuaciones macroscópicas que gobiernan el comportamiento de los fluidos.

La técnica de los modelos Lattice Boltzmann se originó como un subproducto de la investigación sobre los modelos de autómatas celulares [6][7]. Hay, sin embargo, diferencias importantes entre ambos tipos de modelos. Mientras los modelos de gases en redes trabajan con variables booleanas (es decir, con variables cuyos únicos valores posibles son "0" o "1" que en los modelos significan respectivamente "hay una partícula en ese estado" o "no la hay"), los modelos Lattice Boltzmann lo hacen con variables reales que representan a las *funciones de distribución de las partículas* (Ver capítulos 4 y 5). Desde luego con esta modificación se pierden algunas de las ventajas de los modelos de autómatas celulares tales como la ausencia de errores de redondeo (resultante del uso casi exclusivo de aritmética binaria) o como la extrema eficiencia en el uso de la memoria computacional.

Por otro lado, esta técnica permite vincular más fácilmente la definición del modelo a las ecuaciones de la mecánica de los fluidos (el enfoque de estos modelos está directamente relacionado con el de la teoría cinética de los gases). En el artículo "A Lattice Boltzmann model for the simulation of fluid flow" (1992,[7]), R.D. Kingdon, P. Schofield y L. White presentan un modelo Lattice Boltzmann que permite modelar las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos bidimensionales. Cabe destacar que, dentro de este modelo, el tensor de esfuerzos es isotrópico e invariante de Galilea, y que los coeficientes de viscosidad son introducidos en él sin referencia a tipos de colisión específicos.

Otra ventaja adicional del modelo (con respecto a los modelos de autómatas celulares) es que no es necesario "suavizar" sus resultados dado que se comporta con buena aproximación como un "sistema macroscópico" como mostraremos en el capítulo 5 mediante los resultados de muestras simulaciones (no necesitamos entonces realizar promedios de los resultados de las simulaciones ya sea sobre una muestra de experimentos, sobre el espacio o sobre el tiempo).

En este trabajo de tesis estamos interesados en explorar las posibilidades y limitaciones de los modelos de gases en redes, en particular de los modelos tipo Lattice Boltzmann, para su aplicación en el estudio de la contaminación atmosférica, ya sea en la reconstrucción de campos de viento sobre terrenos complejos o directamente en la modelación de la dispersión y transporte de contaminantes en la atmósfera. En el capítulo 5 será analizado con detalle el modelo presentado por Kingdon, Schofield y White, y se presentarán diversas pruebas a las que fue sometido por nosotros dicho modelo. En el capítulo 6 desarrollamos teóricamente una extensión del modelo de manera que sea capaz de simular efectos térmicos (ausentes en el modelo original de Kingdon et al). El contenido de estos capítulos representa la parte más original del presente trabajo.

CAPITULO 2.

MICROMETEOROLOGÍA.

La *capa limite planetaria (PBL)* es la capa más baja de la atmósfera, aquella que sufre directamente la influencia de la superficie terrestre (ya sea mediante el flujo de energía, la fricción o cualquier otro mecanismo). La altura de esta capa frontera varía dentro de un rango muy amplio de valores (aproximadamente desde 100 metros hasta 3 Km sobre la superficie terrestre).

La capa limite planetaria es en realidad una parte de la tropósfera (una capa atmosférica cuyo espesor varía entre ocho kms. en los polos a 16 en el ecuador). El aire troposférico es pesado y, a pesar de que sólo representa una pequeña fracción del espesor total de la atmósfera, contiene el 80% de todo el peso atmosférico. En la tropósfera la temperatura disminuye con la altura a una razón media de $2^{\circ}\text{C}^{\circ}$ por cada 300 metros (Evidentemente la temperatura disminuye a medida que aumenta la distancia con respecto a la principal fuente del calor atmosférico, la superficie terrestre). La tropósfera entera puede cambiar en respuesta a características de superficie, pero esta respuesta es relativamente lenta fuera del PBL. Precisamente una de las características principales del PBL *sobre tierra* es la variación diurna de la temperatura que ya no es evidente a otras alturas.

El movimiento del aire atmosférico puede ser considerado como una superposición de remolinos de diversas dimensiones (desde alrededor de 1 mm hasta varios kilómetros). La "microescala" está asociada con remolinos de dimensiones menores que (aproximadamente) 3 Km. Son estos movimientos turbulentos de la "microescala" los que determinan los cambios en las condiciones climáticas de la capa frontera planetaria.

La micrometeorología (esta es, el estudio del PBL) ha descansado fundamentalmente sobre experimentos de campo. La alternativa son, como se remarcó en el capítulo 1 respecto al más restringido campo de la contaminación atmosférica, *las simulaciones numéricas y de laboratorio*. Las más comunes son las simulaciones numéricas y en su mayoría se basan en el método estocástico de modelar dinámica de fluidos. Estos modelos se han tenido que enfrentar al difícil problema de la "cerradura" que ha limitado fuertemente su aplicación práctica. Hay que destacar que el interés de la simulación de fenómenos micrometeorológicos rebasa el ámbito del problema del transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera dado que es de suma importancia en campos tales como la agricultura, la aviación y la obtención de energía mediante el viento.

Debido a que el PBL es el sistema físico que nos interesa modelar en última instancia (dado que es en ella donde, en la mayoría de los casos, son emitidos los contaminantes) trataremos de examinar brevemente algunas de sus características y de los problemas que surgen al intentar estudiar dicho sistema.

2.1. ESTRUCTURA DE LA CAPA FRONTERA PLANETARIA (PBL).

Sobre la superficie terrestre (en regiones de alta presión) la capa frontera tiene una estructura bien definida que evoluciona con el ciclo diurno. Las componentes de esta estructura son la *capa de mezclado*, la *capa residual* y la capa frontera estable. (VER Figura 2.1) Se debe añadir a estas una delgada capa superficial en donde los flujos turbulentos no varían mucho durante el día (varían generalmente por menos de 10% de su magnitud). Debido a esto la capa superficial puede ser estudiada sin necesidad de explicitar si es parte de una capa de mezclado diurna o de una capa estable nocturna. Finalmente existe una "microcapa" (de apenas unos pocos centímetros sobre la superficie terrestre) donde el transporte molecular domina

sobre el transporte turbulento. Evidentemente el problema se complica si hay formación de nubes en la capa de mezclado. En este caso la capa de mezclado se subdivide en una "capa de nubes" y una "capa por debajo de las nubes". No explicaremos esto con más detalle.

Antes de describir brevemente la estructura del PBL, vamos a definir el concepto de temperatura potencial virtual.

La *temperatura potencial* θ en un punto cualesquiera se define como aquella temperatura que tendrá una parcela de aire si sufre una compresión (o expansión) adiabática a partir del estado termodinámico en el punto en cuestión hasta que la presión adquiere un valor determinado P_0 , la presión de referencia. Generalmente suele considerarse como la presión de referencia el valor de la presión a la altura de la superficie terrestre. Bajo condiciones de equilibrio mecánico (y considerando al aire atmosférico regido por la ecuación de estado del gas ideal en su comportamiento termodinámico) el perfil adiabático de la temperatura con la altura debe ser *lineal* y el gradiente adiabático es $\Gamma = -\frac{g}{c_p} \cong -1^\circ \text{C}/100 \text{ mts}$. Debido a esto, se ve claramente que se cumple la siguiente relación entre la temperatura absoluta T y la temperatura potencial θ :

$$\theta = T + \Gamma z$$

donde, desde luego, z es la altura del sitio en cuestión sobre la superficie terrestre. (Desde luego, estamos tratando exclusivamente con una aproximación a primer orden).

Precisamente es esta última relación la que permite que sea más significativa una gráfica del perfil de temperatura potencial que una del de la temperatura absoluta y que los meteorólogos la utilicen con mucha frecuencia en el estudio del PBL. Una clase de estabilidad neutra caracterizada por un perfil de temperaturas adiabático se representa en la gráfica de θ con la altura por una línea vertical. Esto permite identificar rápidamente a partir de la gráfica las diferentes capas que componen la estructura del PBL. (Una línea de pendiente positiva representa una capa estable, una de pendiente negativa representa una capa inestable y una línea vertical representa una zona neutra)

Por su parte, la *temperatura potencial virtual* es la temperatura potencial que el aire seco debe tener para igualar la densidad del aire húmedo a la misma presión. Para aire saturado, la temperatura potencial virtual se define por la fórmula: $\bar{\theta}_v = \theta \cdot (1 + 0.61 r_{sat} - r_L)$ donde r_{sat} es la razón de mezcla de vapor de agua en el aire atmosférico saturado mientras que r_L es la razón de mezcla del agua líquida con respecto al agua presente en el aire atmosférico. En el caso de aire no-saturado la fórmula se reduce a $\bar{\theta}_v = \theta \cdot (1 + 0.61 r)$. (El vapor de agua es menos denso que el aire seco y, por lo tanto, es más boyante. Esto implica que la temperatura potencial virtual del aire seco es siempre más grande que la temperatura potencial a secas que se refiere al aire húmedo).

Haremos ahora una breve descripción de las características de los componentes de la estructura de la capa frontera planetaria:

La *capa de mezclado* domina durante toda la mañana. Su crecimiento es producido por el calentamiento solar de la superficie terrestre (a partir de un día inicialmente sin nubes). Su extensión se realiza a costa de las zonas de aire menos turbulento por encima de la propia capa de mezclado. Alcanza su altura máxima en el atardecer. Excepto por la capa de nubes inmediatamente superior, la capa de mezclado abarca toda la capa límite planetaria durante la mañana.

La turbulencia dominante en la capa de mezclado es convectiva. Las fuentes de turbulencia convectiva incluyen tanto la transferencia de calor desde la superficie terrestre hasta el enfriamiento radiativo inducido desde el tope de la "zona de nubes". En la zona media de la capa de mezclado el perfil de temperatura potencial virtual tiende a tener un gradiente aproximadamente adiabático. Por el contrario, la zona adyacente al suelo tiende a tener un perfil de temperatura potencial virtual con un gradiente más negativo que el adiabático produciendo condiciones de inestabilidad atmosférica. En el tope de la capa de mezclado se encuentra una zona donde el gradiente de θ_v permite condiciones de estabilidad. Esta capa estable opera como una pared para la turbulencia convectiva restringiendo de esta manera la proliferación de la turbulencia aún más allá. La distancia desde la superficie terrestre hasta el tope de la capa de mezclado se suele denotar por z_i .

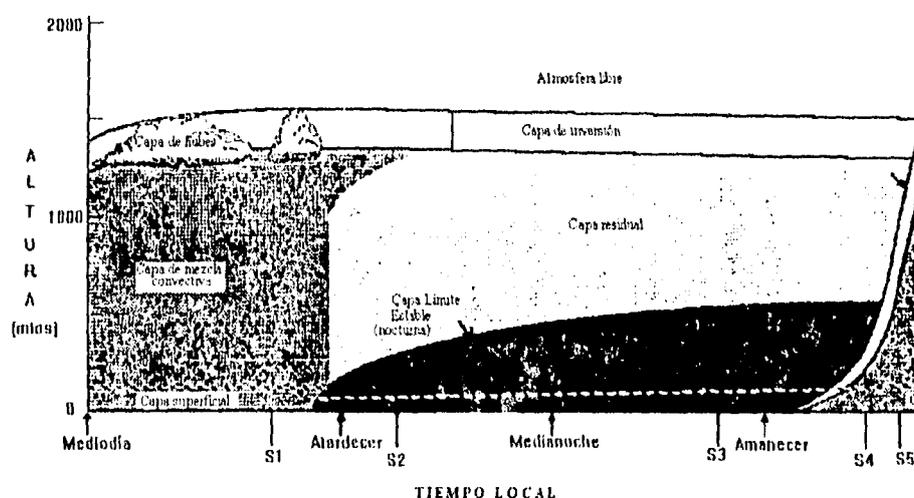


Figura 2.1: Estructura del PBL a lo largo del ciclo diario ("Convective Mixed Layer"= capa de mezclado convectiva; "Surface Layer"=capa superficial; "Residual Layer"=capa residual; "Stable (Nocturnal) Boundary Layer"=capa estable (nocturna); "Height"=altura; "Local Time"=tiempo local; "Noon"=mediodía; "Sunset"=puesta del sol; "Midnight"= mediodía; "Sunrise"=amanecer).

Por lo general en la zona media de la capa de mezclado domina un viento medio de magnitud y dirección muy aproximadamente constante. La dirección de la velocidad del viento sólo forma ángulos muy pequeños con las isobaras (esto es, las superficies de idéntica presión) con la punta dirigida hacia las regiones de más baja presión. Estos ángulos se incrementan cuando nos aproximamos a la superficie terrestre. En la zona adyacente al suelo la velocidad decrece a cero debido a la fricción con la superficie de la tierra, siendo el resultado un perfil de velocidades *casi-logarítmico* como función de la altura en toda la capa superficial.

La fuente principal de la dispersión de contaminantes es la turbulencia. En condiciones de fuerte convectividad como las que predominan en la capa de mezclado esta dispersión es particularmente favorecida. Sin embargo, la capa estable en el tope de la capa de mezclado (frecuentemente conocida como "capa de inversión") es tanto una pared para la turbulencia convectiva como para los contaminantes transportados por ésta impidiendo la dispersión más allá de la propia capa de mezclado.

La capa de mezclado comienza a transformarse en una *capa residual* aproximadamente media hora después de la puesta del sol. A estas horas deja de operar el mecanismo convectivo produciéndose un brusco decaimiento en la turbulencia dentro de la capa de mezclado. A diferencia de sus partes turbulentas, las magnitudes medias de la temperatura, velocidad del viento, presión, etc tienen un valor muy semejante que las de la situación inmediatamente anterior. (Esta es precisamente la razón por la que se conoce la capa resultante como "capa residual"). La capa residual no tiene nunca contacto con la superficie terrestre: durante la noche la inicialmente muy delgada capa estable va creciendo lentamente invadiendo los terrenos de la capa residual; al comenzar el nuevo día aún existe una capa residual que (junto con la capa estable) se transforma rápidamente en la capa de mezclado en unas cuantas horas después del amanecer.

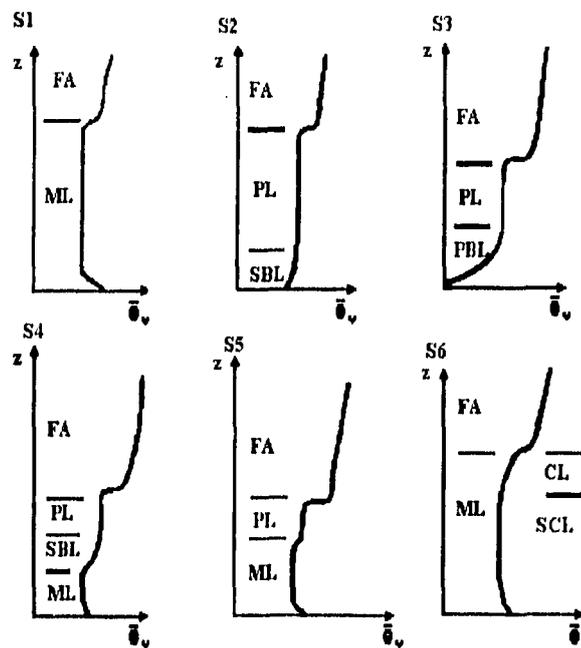


Figura 2.2.- Perfiles de la temperatura potencial virtual que muestran la evolución de la capa límite planetaria durante el ciclo diario. Las horas en que están evaluados estos perfiles (S1-S6) están indicadas en la figura 2.1. (FA,ML,RL,SBL, CL y SCL significan Atmósfera libre, Capa de mezclado, Capa residual, Capa estable, Capa de nubes y Capa por debajo de las nubes).

En la capa residual la turbulencia tiene la misma intensidad en todas las direcciones (a diferencia de la capa de mezclado, donde domina la turbulencia en la dirección vertical). Por esta razón, si una fuente emite contaminantes dentro de la capa residual la forma de la pluma será cónica. Un fenómeno importante en lo que respecta a la contaminación atmosférica es que es principalmente durante la noche en la capa residual donde los diversos contaminantes primarios (es decir, los emitidos directamente por alguna fuente) reaccionan químicamente entre sí (o con los elementos atmosféricos) creando contaminantes secundarios.

Además en las primeras horas de la mañana (cuando la capa residual aún existe) la radiación puede producir reacciones fotoquímicas entre los diversos contaminantes dispersos dentro de la capa residual.

En la *capa estable* propia de la parte baja del PBL nocturno la turbulencia es débil y se presenta sólo ocasionalmente. Esta capa no tiene un tope bien definido sino que se va diluyendo gradualmente con la altura confundiendo al principio con la capa residual. Los contaminantes emitidos dentro de la capa estable se dispersan mucho más rápido en la dirección horizontal que en la vertical (aun cuando los vientos suelen también ser generalmente más calmos que durante la mañana). Hay que destacar que también durante el día pueden surgir en el fondo de la PBL zonas de estabilidad atmosférica si se presenta una advección de aire caliente sobre una superficie fría.

Debemos decir también que la estructura descrita arriba es sólo válida cuando la superficie es tierra y no mar. Sobre los océanos la capa frontera varía en forma relativamente suave tanto en el tiempo como en el espacio. Esto es debido a que el agua tiene una gran capacidad calorífica y absorbe una gran cantidad de calor solar sin incrementar en forma importante su temperatura.

Los meteorólogos están en disposición de obtener experimentalmente perfiles de la temperatura potencial virtual $\bar{\theta}_v$ a tiempos diferentes durante el ciclo diurno (En la figura 2.2 aparecen los perfiles de $\bar{\theta}_v$ en los horarios S1, S2, ..., S6 señalados en la figura 2.1). La ventaja que tienen estos perfiles es que muestran de forma muy nítida la distinción entre las diversas capas componentes del PBL.

2.2.- TURBULENCIA Y TÉCNICAS DE CERRADURA.

La figura 2.3 muestra lo que se entiende por turbulencia. Se trata de mediciones de la velocidad cerca de la superficie de la tierra durante un período de 2 horas y media (desde las 12:00 a m hasta las 2:30 p.m.). La gráfica muestra un patrón sumamente irregular que sin embargo no es totalmente aleatorio. Se puede *idealizar* un valor medio (o *típico*) alrededor del cual oscila el valor *real* de la velocidad del viento sobre un rango limitado de velocidades (El tamaño de este rango de velocidades está relacionado con lo que podríamos llamar *intensidad de turbulencia*: como puede verse en la gráfica esta intensidad tiende a disminuir después del mediodía, 12:00 a.m., evidentemente debido a que el sol calienta menos intensamente la superficie terrestre y, por lo tanto, hay una reducción de la convección). Otra característica que se hace evidente si se analiza con cuidado esta gráfica es que aparecen superpuestas diversas escalas temporales de variación de la velocidad. Así, por ejemplo, el período de tiempo entre cada pequeño "pico" es aproximadamente de un minuto. Los "picos" altos están separados entre sí por unos 5 minutos. Las variaciones detectables más pequeñas tienen un período de alrededor de 10 seg.

A partir de gráficas como la de la figura 2.3 puede obtenerse, mediante análisis matemático, el espectro de la turbulencia que representa la contribución a la energía cinética de turbulencia correspondiente a los remolinos de los diferentes tamaños. (Hay que decir que las dimensiones de los remolinos están relacionadas con el período de tiempo de las variaciones producidas en la velocidad del viento debidas a dichos remolinos: a los remolinos pequeños corresponden períodos de tiempo cortos mientras que a los remolinos grandes corresponden períodos de tiempo largos). La figura 2.4 es un ejemplo del espectro de la velocidad del viento medida cerca de la superficie terrestre. Hay dos "montañas" que sobresalen en este espectro y entre ellas un largo "abismo". Uno de los máximos corresponde a un período de cerca de 100 hrs y el otro abarca períodos de tiempo de entre 10 seg y 10 min (la gráfica está en una escala logarítmica). El "abismo espectral" permite, de hecho, hacer una separación no-ambigua entre los movimientos

correspondientes a los diversos periodos de tiempo. Frecuentemente se considera que la zona a la izquierda del centro del abismo espectral (que corresponde a un periodo de aproximadamente una hora) está asociada con el flujo *medio* mientras que la zona a la derecha del centro del abismo espectral se considera asociada al flujo *turbulento*. Esta separación es bastante arbitraria dado que la turbulencia es un fenómeno de todos los "sistemas fluidos" y el abismo espectral es una característica de la capa límite típica.

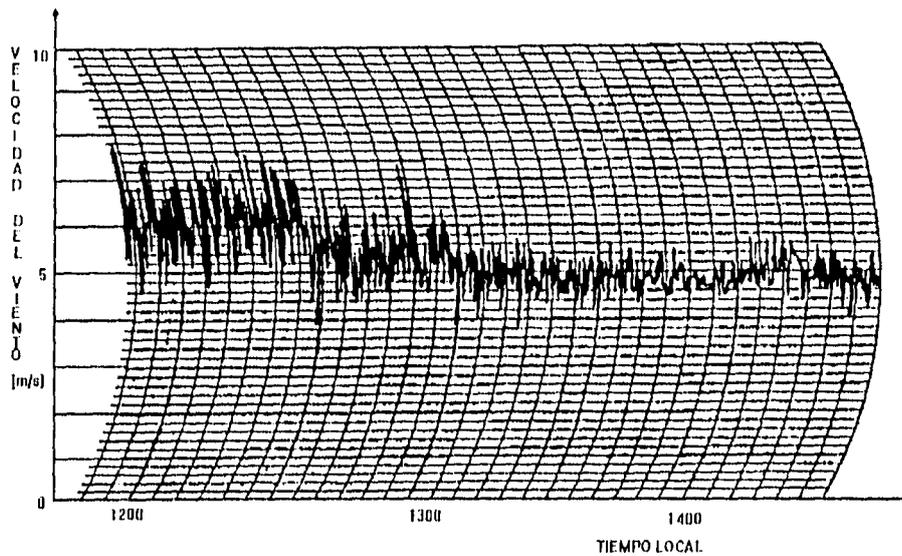


Figura 2.3.- Mediciones de la velocidad del viento durante las primeras horas de la tarde.

Es muy usual que el abismo espectral sea utilizado para *definir* la capa límite planetaria. De hecho, se define la capa límite como aquella parte de la tropósfera que responde a los efectos de superficie (tales como la fricción, transferencia de calor o contaminantes, modificaciones del flujo debido al terreno, etc) con un "tiempo de respuesta" de menos de una hora aproximadamente (esto no significa que la capa frontera alcance un equilibrio en ese tiempo sino exclusivamente que el sistema comienza a sufrir sus primeras modificaciones). En otras palabras, la capa límite es aquella zona de la tropósfera donde la turbulencia juega un papel más dominante.

En el capítulo 1 se insistió en la insuficiente resolución de cualquier "red numérica" que intente representar un fluido turbulento. Sólo una parte de la velocidad del viento es "resoluble" mediante métodos numéricos. Usualmente se escribe la velocidad del viento en la forma: $\vec{V} = \vec{u} + \vec{u}'$ donde \vec{V} es la velocidad total, \vec{u} es la velocidad "media" y \vec{u}' es la velocidad "turbulenta".

La interpretación de esta separación de la velocidad en dos términos varía según los autores. Frecuentemente se considera que el valor "medio" es el promedio sobre un conjunto representativo de experimentos idénticos. Si, por ejemplo, $M(\vec{r}, t)$ es una función del espacio y del tiempo su "promedio

sobre conjunto representativo" sería igual a: $\langle M \rangle(\bar{r}, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} M_i(\bar{r}, t)$, dond N es el número de experimentos y M_i es el valor obtenido para M en el experimento i -ésimo.

La utilidad de los promedios sobre conjuntos representativos es esencialmente *teórica*. Para experimentos de laboratorio puede ser practicable (y es de hecho la más conveniente) pero la atmósfera está fuera de nuestro control y no podemos desarrollar "experimentos idénticos" a nuestra voluntad. Por estas razones en la práctica suelen sustituirse los promedios sobre un conjunto representativo por un *promedio sobre un período de tiempo* (o en algunos casos por un promedio en el espacio). Los promedios temporales son muy prácticos

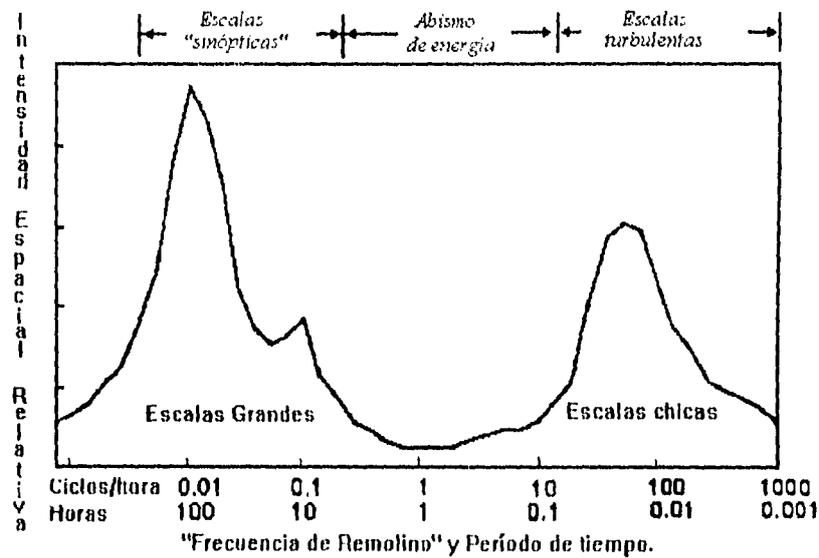


Figura 2.4.- Espectro "típico" de la velocidad del viento cerca de la superficie terrestre. (Estimado de un estudio de Van der Hoven, 1957).

dado que puede ser obtenida a partir de sensores montados sobre una plataforma fija. Haciendo uso de la existencia del "abismo espectral" suele ser conveniente hacer un promedio de los datos obtenidos por los sensores (por ejemplo, para la velocidad del viento) sobre un período de entre 30 minutos y una hora. Bajo ciertas circunstancias (turbulencia *estacionaria*) el promedio sobre un conjunto representativo coincide con el promedio temporal. Esta condición es conocida como la "condición ergódica", la cual es frecuentemente utilizada para simplificar el problema.

Así como la velocidad del viento puede separarse en una parte media y otra turbulenta, puede realizarse lo mismo para todas las demás variables relevantes en la descripción del sistema: así hay temperatura potencial virtual *media* y *turbulenta*, razón de humedad *media* y *turbulenta*, concentración de algún componente del aire (o de algún contaminante) *media* y *turbulenta*, etcetera. Todo esto debido a que los propios movimientos turbulentos producen variaciones en estas variables *si hay algún gradiente medio de dichas variables a través del "dominio turbulento"*.

Es importante volver a destacar que aún cuando haya viento calmo (o incluso velocidad *media* del viento igual a cero) la turbulencia puede producir flujos importantes de momento, calor, contaminantes, etc. Para poner un ejemplo considérese un pequeño remolino cerca de la superficie terrestre durante un día caluroso (cuando el perfil de temperatura es superadiabático; esto es, tiene un gradiente más negativo que el adiabático). Si una determinada parcela dentro del remolino se mueve con una velocidad vertical *turbulenta* w' negativa (es decir, hacia la tierra) debido a su movimiento aproximadamente adiabático *disminuirá* rápidamente su temperatura por θ' (o, por el contrario un decremento en la temperatura implica un decremento en la velocidad vertical debido a la boyancia). De la misma manera velocidades verticales turbulentas positivas están asociadas a temperaturas turbulentas positivas. De lo anterior se deduce que el promedio (temporal o sobre un conjunto representativo) de $w'\theta'$ es siempre *positivo*. Esto implica un *transporte neto de calor hacia arriba aún cuando no haya transporte neto de masa*. Durante la noche la turbulencia produce precisamente lo contrario, un transporte de calor hacia la superficie terrestre (es interesante que debido a este fenómeno los agricultores producen remolinos turbulentos durante la noche para impedir el congelamiento de sus frutas).

La resolución numérica de las ecuaciones que gobiernan el comportamiento de la capa frontera encuentra muy serios obstáculos debido a los efectos turbulentos. No analizaremos con detalle esta problemática sino que haremos un breve esbozo de algunas técnicas que se han desarrollado para tratar de superar este problema como la teoría K y la teoría de similitud. Por otra parte, estas técnicas nos permitirán justificar una expresión semiempírica para el perfil de velocidades en la capa superficial típica.

Las ecuaciones fundamentales que describen nuestro sistema (la capa límite planetaria) son cuando menos cinco: la ecuación de estado termodinámico (usualmente se considera al aire atmosférico como un gas ideal) y las ecuaciones de conservación de la masa, momento, calor y humedad. Generalmente se utiliza sólo algún conjunto restringido de dichas ecuaciones (y en forma aproximada) en cualquier modelación numérica.

Dado que los términos turbulentos no son resolubles en ninguna red numérica es indispensable dividir las diversas variables en sus partes media y turbulenta y promediar las ecuaciones sobre un conjunto representativo adecuado. Así, por ejemplo, la ecuación de conservación de algún constituyente atmosférico cuya concentración es c se transforma mediante este procedimiento de una ecuación para c (ecuación 2.1) en una ecuación para $\langle c \rangle$ (ecuación 2.2).

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_j \frac{\partial c}{\partial x_j} = v_c \frac{\partial^2 c}{\partial x_j^2} + S_c \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} = v_c \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial x_j^2} + S_c - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle u_j' c' \rangle \quad (2.2)$$

donde V_c es la difusividad del constituyente c mientras que S_c es el término de producción (o destrucción) del constituyente en cuestión.

Una vez obtenidas las nuevas ecuaciones surge el problema de la cerradura: el número de incógnitas en el conjunto de ecuaciones para el flujo turbulento es más grande que el número de ecuaciones. (Se entiende por *incógnita* cualquier variable para la que no tenemos una ecuación de pronóstico o de diagnóstico que la defina). Así, por ejemplo, la ecuación 2.2 (que es la ecuación de evolución para $\langle c \rangle$) requiere conocer $\langle u_j' c' \rangle$ que son tres variables de las cuales no sabemos nada. Una ecuación que definiera la evolución de $\langle u_j' c' \rangle$ requeriría a su vez conocer el valor de $\langle u_j' u_k' c' \rangle$ que representa un número aún mayor de incógnitas. De esta manera, la descripción estadística completa de la turbulencia requiere un conjunto infinito de ecuaciones con un número siempre creciente de incógnitas.

Un intento de evadir el "problema de la cerradura" (como se ha dado en llamar a la difícil situación expuesta arriba) es aproximar las incógnitas restantes en términos de cantidades conocidas (o gradientes de cantidades conocidas) mediante alguna expresión semiempírica ("parametrización"). No hay una manera obvia de parametrizar una incógnita cualesquiera tal como $\langle u_j' c' \rangle$. De hecho, hay tantas parametrizaciones como principales investigadores hay trabajando en este problema (o más aún) [3]. Sin embargo, se puede hablar de una serie de criterios generales que deben cumplir estas parametrizaciones para ser consideradas "aceptables" tales como:

- 1) tener las mismas dimensiones que la incógnita parametrizada;
- 2) tener las mismas propiedades tensoriales y de simetría que la incógnita;
- 3) ser invariante bajo transformaciones de sistemas coordenados;
- 4) ser invariante bajo transformaciones de Galileo (es decir, debe tener el mismo valor para cualquier sistema de referencia inercial) si la variable a parametrizar lo es.

(Además de estos criterios, habrá nuevas constricciones para las parametrizaciones "físicamente razonables" dependiendo del problema específico de que se trate).

Una de las técnicas más usuales de "parametrización" es considerar que el "flujo turbulento" de una variable ξ es proporcional al gradiente de la misma variable. Esto puede ser expresado por la siguiente fórmula:

$$\langle u_j' \xi' \rangle = -K \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} \quad (2.3)$$

A la suposición anterior se le conoce como *teoría K* o bien como "teoría del transporte por medio del gradiente". Examinemos superficialmente las bases de esta hipótesis de cerradura mediante un argumento heurístico.

Pensemos en una atmósfera de estabilidad neutra (esto es, con un perfil de temperatura adiabático). Supongamos que a una cierta altura respecto de la superficie terrestre se encuentra un pequeño remolino

turbulento. La velocidad del viento media $\bar{U} = \langle u \rangle$ a distancias considerables de la superficie terrestre suele estar dominada por la maquinaria atmosférica global y representa un movimiento en una dirección esencialmente horizontal. Así pues, supongamos que la velocidad media del viento \bar{U} sólo tiene componente en la dirección x . Consideremos una parcela de aire que sea removida por una componente vertical de la velocidad turbulenta w' . Supongamos que este movimiento turbulento traslada la parcela de aire una pequeña altura Δz . Debido a esto, la parcela de aire tendrá una diferencia en su velocidad con respecto a la velocidad media de la nueva altura alcanzada $\Delta u = -\left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial z}\right)\Delta z$. De la misma manera, si ξ es una propiedad atmosférica cualesquiera sufrirá un cambio en su valor medio de aproximadamente $\Delta \xi = -\left(\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial z}\right)\Delta z$. Estas diferencias en el valor medio de u y de ξ son aproximadamente iguales a sus respectivos términos turbulentos (es decir, $\Delta u = u'$ y $\Delta \xi = \xi'$).

Ahora bien, dijimos ya que la atmósfera tiene condiciones de estabilidad neutra. En esta situación no se presenta la convección y el principal mecanismo de producción de turbulencia es el mecánico (por fricción). Cuando la turbulencia mecánica es la dominante suele suceder que la componente vertical w' de la velocidad turbulenta es proporcional a la componente horizontal u' . Si el gradiente $\frac{\partial \bar{U}}{\partial z}$ es positivo tendremos que velocidades verticales turbulentas w' positivas estarán asociadas con diferencias en la velocidad media Δu (y, por lo tanto, u') negativas mientras que w' negativas estarán asociadas con u' positivas. Conviene entonces escribir $w' = -cu'$ donde c es una constante de proporcionalidad. De la misma manera puede verse que cuando el gradiente $\frac{\partial \bar{U}}{\partial z}$ es negativo las componentes turbulentas w' y u' tienden a tener el mismo signo y conviene escribir $w' = cu'$. Por tanto, el caso general puede ser expresado de la siguiente manera: $w' = c \left| \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \right| \Delta z$. Finalmente puede obtenerse una expresión para el flujo turbulento de la propiedad ξ :

$$\overline{w'\xi'} = -c(\Delta z)^2 \left| \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \right| \left(\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial z} \right) \quad (2.4)$$

Si definimos la "longitud de mezclado" como $L^2 = c(\Delta z)^2$ (la cuál es una medida de la capacidad de la turbulencia para producir mezclado) la ecuación (3.4) se transforma en $\overline{w'\xi'} = -L^2 \left| \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \right| \left(\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial z} \right)$, lo cuál es análogo a la expresión (3.3) si aceptamos que:

$$K = L^2 \left| \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \right| \quad (2.5)$$

Hay que remarcar que la teoría K sólo es aplicable cuando la velocidad media \bar{U} varía en forma aproximadamente lineal dentro de las dimensiones de los remolinos turbulentos. Por esta razón se trata de una técnica aplicable exclusivamente a remolinos pequeños.

$$\text{Si la ecuación (2.3) se aplica a } \xi = u \text{ obtenemos } \langle w'u' \rangle = -K \frac{\partial \bar{U}}{\partial z}.$$

Esta expresión nos permite hacer una analogía con la tensión viscosa (que representa un transporte de momento a nivel molecular). La tensión viscosa puede escribirse como $\tau = \rho \nu \frac{\partial u}{\partial z}$ donde ρ es la densidad de masa, ν es el coeficiente de viscosidad molecular y u es la velocidad macroscópica (o "hidrodinámica"). Desde luego, esta fórmula es válida sólo para los llamados "fluidos newtonianos". Por su lado, la "tensión de Reynolds" τ_R (que representa un flujo turbulento de momento aunque no es propiamente una "tensión") es igual a $\tau_R = \rho K \frac{\partial \bar{U}}{\partial z}$. Como se ve aquí K es algo así como un "coeficiente de viscosidad de turbulencia".

Dado que la turbulencia es mucho más eficaz que la viscosidad molecular para producir mezclado lo que se expresa en que K sea de un valor de un orden de magnitud enormemente más grande que ν (El valor típico de ν es de alrededor de $10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ mientras que K varía aproximadamente entre $10^{-1} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ y $10^3 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$). Hay además una diferencia fundamental entre ambos "coeficientes de viscosidad": ν depende exclusivamente de la naturaleza del fluido en cuestión (su composición química y su estado termodinámico) mientras que K (como se desprende de la ecuación 2.5) es una función del flujo que requiere ser parametrizada a su vez en términos de otras variables meteorológicas.

2.3 EL PERFIL LOGARÍTMICO DE VELOCIDADES.

En general, para analizar el transporte y dispersión de contaminantes en la capa frontera planetaria un factor muy importante que debe ser conocido es el perfil de la velocidad media del viento con la altura (aquí estamos suponiendo que la velocidad media del viento es en una dirección horizontal). En realidad esta información es indispensable para muchos otros problemas prácticos: por ejemplo, para el diseño de la estructura de edificios, puentes o máquinas diseñadas para explotar al viento como fuente de energía.

En este párrafo vamos a analizar brevemente el perfil de velocidades en la capa superficial típica. Desde luego es en la capa superficial donde pasamos la mayor parte de nuestra vida, donde son emitidos la mayoría de los gases contaminantes y donde las mediciones meteorológicas son más frecuentes y más confiables.

Debido al contacto con la superficie terrestre en el fondo de la capa superficial la velocidad media se anula. La velocidad es cero hasta aproximadamente una altura z_0 (la "longitud de rugosidad") que depende del tipo de terreno (así por ejemplo los valores típicos de z_0 en zonas dominadas por el hielo son de un orden de magnitud de aproximadamente 10^{-5} m mientras que los correspondientes a los centros de las grandes ciudades son de alrededor de 1 metro). Para alturas mayores que z_0 con respecto a la superficie terrestre la velocidad media se incrementa en forma continua. Para distancias considerables de la tierra el viento está dominado por las fuerzas producidas por diferencias de presión con las regiones vecinas. Bajo condiciones "normales" el perfil de velocidades resultante es prácticamente logarítmico. (como el que se muestra en la figura 2.5).

Una manera de derivar esto es mediante la teoría K que analizamos en el párrafo anterior.

Si en la ecuación (2.4) sustituimos $L^2 = \nu(\Delta z)^2$ por $k^2 z^2$ (donde k es la constante de von Karman y z la distancia a la superficie terrestre) para tomar en cuenta que la presencia de la tierra limita el tamaño de

los remolinos turbulentos podemos escribir: $\overline{w'u'} = -k^2 z^2 \left[\frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \right] \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \right)$.

Ahora bien, $\overline{w'u'}$ representa la "tensión de Reynolds" por unidad de masa y podemos suponer que es aproximadamente igual a lo largo de la capa superficial. Por tanto, $\overline{w'u'} = \overline{w'u'}(z = z_0) = -u_*^2$ donde u_* es la llamada "velocidad de fricción" (nótese que efectivamente tiene dimensiones de velocidad).

Podemos entonces escribir: $u_*^2 = k^2 z^2 \left[\frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \right] \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial z} \right)$ lo cual implica que $\frac{\partial \bar{U}}{\partial z} = \frac{u_*}{kz}$.

Integrando desde z_0 hasta z obtenemos que $\bar{U} = \left(\frac{u_*}{k} \right) \text{Ln} \left(\frac{z}{z_0} \right)$ que representa precisamente el *perfil de velocidades logarítmico*.

Es importante destacar que este resultado sólo es válido si la atmósfera tiene condiciones de estabilidad neutras dado que este es el rango de aplicación de la teoría K. Un análisis más general del problema puede realizarse mediante una combinación de la teoría de similitud y de información empírica.

La teoría de similitud estudia las propiedades dimensionales de las variables que intervienen en un problema físico cualesquiera. Las variables que determinan el comportamiento de un sistema físico son organizadas en una serie de "grupos adimensionales". Esto significa que las variables que en principio se consideran importantes para la resolución del problema pueden ser sustituidas por un grupo de cantidades adimensionales más reducido (el número de grupos adimensionales pertinentes es igual al número de "dimensiones fundamentales" donde las dimensiones fundamentales son aquellas que al mismo tiempo son independientes entre sí y combinadas generan las dimensiones de todas las "variables clave" del problema). Todo este procedimiento está fundamentado en el llamado Teorema Pi de Buckingham (el cual no será examinado aquí). Una vez obtenidos los grupos adimensionales relevantes en el problema las ecuaciones que los relacionan entre sí deben ser obtenidas mediante un estudio experimental (Generalmente para obtener estas relaciones se utiliza alguna "intuición física" o alguna técnica para seleccionar la forma que "parece mejor" dejando un grupo de coeficientes desconocidos a ser evaluados empíricamente). En resumen, la teoría de similitud proporciona una manera de organizar las variables para nuestra máxima ventaja.

En el problema del perfil de velocidades en la capa superficial pueden considerarse como las "variables clave" la propia velocidad media \bar{U} y la altura z además de la tensión superficial (que puede ser representada por la velocidad de fricción u_*) y la longitud de rugosidad z_0 . De cualquier manera una mala selección de las "variables clave" aparecería posteriormente a la luz dado que el propio método de la teoría de similitud nos informa del error. Mediante las variables seleccionadas arriba pueden crearse los dos siguientes dos grupos adimensionales: $\frac{\bar{U}}{u_*}$ y $\frac{z}{z_0}$. El resto del método es, por consiguiente, buscar relaciones empíricas entre ambas cantidades.

En la figura 2.5 se muestra una gráfica semi-log (se gráfica $\ln\left(\frac{z}{z_0}\right)$ vs. $\frac{\bar{U}}{u_*}$) obtenida experimentalmente [3]. Como puede verse, bajo condiciones de estabilidad neutra se obtiene una línea recta correspondiente al perfil de velocidades logarítmico que deducimos anteriormente. Bajo condiciones estables o inestables hay una ligera desviación del perfil logarítmico (la curva es ligeramente cóncava hacia abajo en el primer caso y cóncava hacia arriba en el segundo caso).

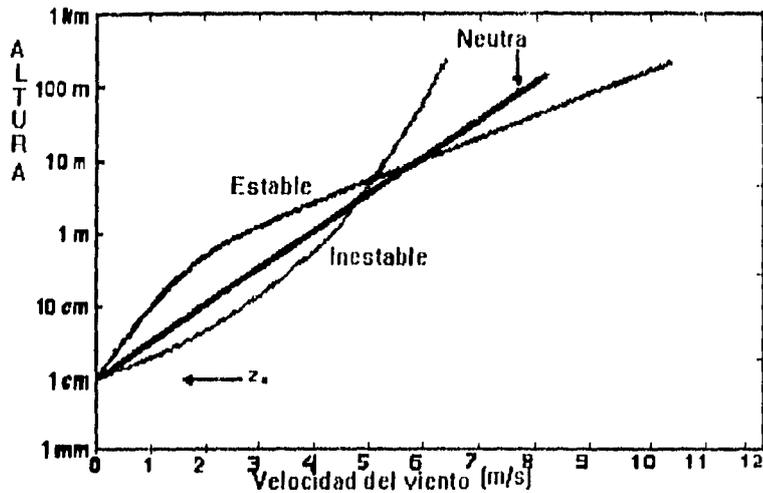


Figura 2.5. Perfil de la velocidad del viento en la capa superficial "típica" (en una escala semilogarítmica). La línea recta corresponde al perfil de la velocidad bajo condiciones neutras de estabilidad atmosférica. Las otras dos curvas corresponden a condiciones estables o inestables.

En general, para incluir el efecto de las condiciones de estabilidad sobre el perfil vertical de la velocidad del viento se introduce una función $\psi_M\left(\frac{z}{L}\right)$, modificando el perfil logarítmico a la forma:

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \psi_M\left(\frac{z}{L}\right) \right]$$

Hemos analizado y justificado con cierto detalle el perfil de velocidades logarítmico en la capa superficial debido a que su modelación resulta una importante prueba a la que someter los diversos modelos que intenten simular la dinámica de los sistemas micrometeorológicos. De hecho, como se verá posteriormente, los modelos de autómatas celulares diseñados para simular la dispersión de contaminantes atmosféricos fueron sometidos precisamente a esta prueba.

CAPITULO 3. BREVE RESUMEN DE MECÁNICA DE FLUIDOS Y TEORÍA CINÉTICA.

3.1. EL PUNTO DE VISTA DEL MEDIO CONTINUO.

Un fluido (concepto que abarca tanto a los líquidos como a los gases) se diferencia de un sólido en la facilidad con que puede ser deformado. Un fluido "simple" puede ser definido como un material tal que se puede producir un cambio significativo en las posiciones relativas de sus partes constituyentes mediante un cambio pequeño en las fuerzas que actúan sobre él. Los fluidos pueden ofrecer resistencia a las fuerzas de deformación pero esta resistencia no puede prevenir que la deformación ocurra. Tanto el aire como el agua, entre otros materiales comunes, se comportan muy aproximadamente como fluidos "simples".

Desde luego, los sistemas macroscópicos típicos contienen un número enorme de átomos o moléculas (del orden de magnitud del número de Avogadro, aproximadamente $N \sim 10^{23}$). Bajo estas condiciones, un análisis detallado del comportamiento microscópico del sistema no sólo es materialmente imposible sino incluso absolutamente inútil desde el punto de vista del estudio de los fenómenos macroscópicos involucrados. Una manera de superar este problema es ignorar la estructura discreta de la materia y considerarla como un *medio continuo*, es decir suponer que llena completamente la región del espacio que ocupa. El fluido se considera dividido en "pequeños elementos de volumen" a partir de cuyo comportamiento se describe al sistema. Estos "elementos de volumen" son suficientemente pequeños comparados con las dimensiones que caracterizan al fenómeno macroscópico pero al mismo tiempo suficientemente grandes como para contener un elevado número de moléculas en su interior. Este es también el sentido que tiene un "punto material del fluido". Una vez establecida esta hipótesis de continuidad, se describe a las sustancias materiales bajo consideración exclusivamente en términos de propiedades físicas que puedan medirse directamente en el laboratorio mediante los instrumentos apropiados (propiedades tales como la presión, la densidad, la temperatura, la velocidad hidrodinámica, etc).

Afortunadamente a pesar de la gran complejidad de los sistemas fluidos (y de la gran variedad de estos), cuando son observados desde el punto de vista molecular, su comportamiento macroscópico puede ser descrito generalmente en términos de las mismas leyes, ecuaciones diferenciales que expresan los principios de conservación de la masa, momento, energía, momento angular, etc. Así, por ejemplo, un líquido y un gas tienen una estructura microscópica radicalmente diferente: en los gases las moléculas prácticamente están libres de influencia mutua excepto en las raras ocasiones en que dos o más moléculas se aproximan demasiado, en el caso de los líquidos las moléculas están "empaquetadas" tan cerca unas de otras como las fuerzas de repulsión intermolecular lo permiten (en lo que respecta al orden de magnitud de tales fuerzas y de la separación promedio entre las moléculas un líquido está mucho más cerca de un sólido que de un gas). Y, sin embargo, ambos tipos de materiales tienen un comportamiento que puede ser descrito esencialmente por las mismas leyes macroscópicas.

El movimiento del fluido se describe tradicionalmente en términos del llamado campo de velocidades euleriano $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r}, t)$, el cual está definido como la velocidad del "punto material" que se encuentra de paso en la posición \vec{r} en el instante de tiempo t . Además son necesarias dos magnitudes termodinámicas que pueden ser, por ejemplo, la distribución de densidad y de presión sobre todo el espacio. (Dadas dos magnitudes termodinámicas independientes el resto de ellas están determinadas mediante una ecuación de estado). Los campos $\vec{v}(\vec{r}, t)$, $\rho(\vec{r}, t)$ y $p(\vec{r}, t)$ determinan completamente el estado del fluido para cualquier tiempo.

En el caso en que los esfuerzos cortantes (esto es, las fuerzas tangenciales ejercidas sobre la superficie de un "elemento de volumen" debidas a la fricción con el resto del fluido que le rodea) sean nulos, se puede demostrar que la presión es *isotrópica* (es decir, que su valor es el mismo en todas direcciones). En el caso en que los esfuerzos cortantes (es decir, la viscosidad) están presentes el tensor de esfuerzos (como será definido posteriormente) tendrá una forma en general más complicada.

En la mecánica de fluidos, el principio de conservación de la masa es expresado mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \, dV = - \int \rho \, \vec{v} \cdot d\vec{S}.$$

Cabe destacar que el término de la izquierda de la ecuación es la razón de cambio en la masa total contenida en un cierto volumen V del fluido mientras que el término de la derecha es el flujo de masa hacia dentro de dicho volumen a través de la superficie que lo contiene.

En su forma diferencial la ecuación puede escribirse como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.1)$$

Si consideramos que la única fuerza actuando sobre un elemento de fluido está representada por la presión superficial ejercida por los elementos de fluido vecinos puede ser deducida la siguiente ecuación diferencial (conocida como *la ecuación de Euler*):

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right] = -\nabla p,$$

(Como puede verse $-\nabla p$ representa la fuerza por unidad de volumen resultado de la acción de la presión sobre toda la superficie de un "elemento de volumen". Por su parte $\frac{d\vec{v}}{dt}$ es la derivada total de la velocidad respecto al tiempo, es decir el campo de aceleraciones euleriano).

Mediante la ecuación de continuidad de la masa y la ecuación de Euler puede deducirse una ecuación de conservación del momento lineal:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) = - \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}, \quad (3.2)$$

donde $\Pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k$ es el tensor de densidad de flujo de momento lineal (representa la componente i del momento que fluye por unidad de tiempo en un área unidad perpendicular al eje x_k).

La ecuación 3.2 representa una transferencia de momento completamente reversible debida simplemente al transporte de las partículas de un lugar a otro y a las fuerzas de presión que actúan en el fluido. Hay que añadir un término al tensor Π_{ik} que nos represente el efecto producido por la disipación de energía debida a la fricción interna del fluido (viscosidad). Así,

$$\Pi_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k; \quad \sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \sigma'_{ik}$$

donde σ_{ik} es el tensor de esfuerzos y σ'_{ik} es el término viscoso del tensor de esfuerzos.

Ahora bien, estos procesos de rozamiento interno se presentan debido al movimiento relativo entre las diferentes partes del fluido en contacto. Por esto, simplificando el problema pueden hacerse las siguientes suposiciones:

(1) El término viscoso del tensor de esfuerzos es una función lineal de los gradientes espaciales del campo de velocidades;

(2) Para un campo de velocidades uniforme, $\sigma'_{ik} = 0$;

(3) Para una rotación uniforme del fluido en su totalidad, el término viscoso del tensor de esfuerzos debe ser nulo también:

Supuesto esto, puede deducirse una forma general para este término viscoso:

$$\sigma'_{ik} = \eta \left[\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_m}{\partial x_m} \right] + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_m}{\partial x_m} \quad (3.3)$$

(η y ζ se conocen en la literatura como el coeficiente de viscosidad y el coeficiente de viscosidad volumétrica respectivamente. Ambos son cantidades independientes del campo de velocidades).

La ecuación 3.2 con el tensor de esfuerzos completado por el término viscoso dado por la expresión 3.3 es conocida como *la ecuación de Navier-Stokes*. En el caso relativamente sencillo de un flujo en el que la densidad es uniforme sobre todo el espacio la ecuación puede ser transformada en otra que sólo contiene al campo de velocidades (y no al campo de presiones), ecuación que determinaría en principio al campo de velocidades en todo tiempo a partir del campo de velocidades inicial. En el caso general, sin embargo, hay que completar las ecuaciones de Navier-Stokes con un análisis termodinámico del sistema.

CASO ESPECIAL: FLUJO A TRAVÉS DE CANALES PLANOS.

Vamos a estudiar un problema especial que puede ser resuelto en forma exacta mediante las ecuaciones de Navier-Stokes. Se trata del flujo bidimensional a través de un canal plano de tal manera que la pared superior se mueve con respecto a la pared inferior (*Flujo de Couette*). Este fenómeno resulta idóneo para ser simulado por un modelo de autómatas celulares como el que presentamos en este trabajo y es por esta razón que lo exponemos en esta sección.

Supongamos que se ha establecido una corriente de chorro a través de un canal cilíndrico largo de manera que la velocidad del fluido es completamente independiente de la distancia sobre el eje del cilindro (digamos, el eje X). El movimiento en el plano de la sección transversal del cilindro no podrá sostenerse debido a la disipación viscosa de la energía si no hay una fuente continua de energía proporcionada al fluido por tensiones tangenciales ejercidas en una porción de la frontera. Pero si la frontera es rígida y se mueve en la dirección del eje X esta tensión tangencial es nula y eventualmente el movimiento será estrictamente unidireccional en la dirección del eje X.

Una de las dificultades principales de la solución analítica de las ecuaciones de Navier-Stokes es la no-linealidad producida por el término de la razón de cambio convectiva de la velocidad $\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}$. En el caso simple que estamos disutiendo (como el vector velocidad tiene la misma dirección dondequiera y es independiente de la distancia en la dirección del flujo) este término es nulo y las ecuaciones de Navier-Stokes tienen una solución exacta sencilla. Para un fluido incompresible sujeto a todas las condiciones mencionadas arriba las ecuaciones de Navier-Stokes se reducen a la siguiente ecuación diferencial:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{\partial p}{\partial x} + \eta \left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right]$$

donde $\frac{\partial p}{\partial x} = -G(t)$ es independiente de la distancia en la dirección X. En los casos de flujo estacionario

$\frac{\partial u}{\partial t} = 0$, y $-G$ es un gradiente de presiones independiente del tiempo. La ecuación que determina el estado del flujo es, entonces:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = -\frac{G}{\eta}$$

Si tratamos con un flujo bidimensional a través de un canal plano con las mismas características del flujo tridimensional analizado arriba, la ecuación diferencial que describirá los estados estacionarios es la siguiente:

$$\frac{d^2 u}{dy^2} = -\frac{G}{\eta}$$

Si suponemos que el flujo toma lugar entre las líneas $y=0$ e $y=d$ (moviéndose las líneas respectivamente a las velocidades 0 y U) la solución exacta de esta ecuación es:

$$u = \frac{G}{2\eta} y(d-y) + \frac{Uy}{d} \quad (3.4)$$

Cuando las líneas rígidas no están en movimiento relativo tenemos un perfil de velocidades parabólico (*flujo de Poiseuille*); mientras que en el caso de que el gradiente de presiones G sea nulo tenemos un flujo muy simple con un perfil de velocidades lineal (*flujo de Couette*).

Finalmente hay que remarcar que la mayoría de los flujos estacionarios unidireccionales que son solución de las ecuaciones de la mecánica de fluidos son en la práctica inestables bajo ciertas condiciones. Para el flujo a través de canales planos como el que hemos analizado aquí los estados estacionarios son estables sólo si la velocidad de flujo es relativamente pequeña; a mayores velocidades el flujo evoluciona hacia un estado permanentemente no-estacionario y fuertemente irregular (situación característica del fenómeno de la turbulencia). Las condiciones de la estabilidad del estado de flujo estacionario no son conocidas con precisión, pero se utiliza generalmente el criterio de que para valores suficientemente pequeños del número adimensional Ud/η (el llamado *número de Reynolds*) estos flujos estacionarios son realizables (es decir, son estables). El valor crítico del número de Reynolds (estimado experimentalmente) a partir del cual el flujo se convierte en inestable es de alrededor de 6,400.

3.2 EL PUNTO DE VISTA DE LA TEORÍA CINÉTICA.

La Teoría cinética de la materia y la Física Estadística esencialmente no difieren de las teorías fenomenológicas (tales como la termodinámica o la hidrodinámica) en cuanto a sus objetos de estudio sino en cuanto a su enfoque metodológico. Al contrario de la fenomenología que parte de leyes empíricas que describen las propiedades de los sistemas macroscópicos, las teorías de la física estadística intentan recuperar estas propiedades deduciéndolas de hipótesis acerca de las leyes que gobiernan a los átomos y a las moléculas.

Como se vió en el párrafo anterior, la mecánica de fluidos supera el problema de analizar las propiedades macroscópicas de un sistema que consta de un número enorme de partículas haciendo la aproximación de considerar al fluido como continuo y olvidándose totalmente de su estructura molecular discreta. Una alternativa a este enfoque es, como ya dijimos, los métodos de la Mecánica Estadística y de la Teoría Cinética. Aquí no se abandona la imagen molecular sino que se estudia el sistema microscópico desde un punto de vista *probabilístico*, es decir estudiando el comportamiento *colectivo* (no detallado) de los átomos o moléculas del sistema.

La Teoría Cinética (que se distingue de la Mecánica Estadística por estudiar sistemas que están en general fuera del equilibrio termodinámico) ha dado sus mejores frutos en el estudio del estado gaseoso, especialmente cuando se trata de gases ligeros y diluidos. Por esto se la suele caracterizar como "Teoría Cinética de los Gases".

En principio el tratamiento estadístico requiere conocer más o menos precisamente la estructura o forma de las moléculas del gas, así como la naturaleza de las fuerzas intermoleculares. Sin embargo, esto no es muchas veces necesario debido al hecho notable de que el comportamiento *como un todo* del gas no depende en sus características más esenciales más que de algunas leyes simples de la dinámica de las moléculas en general (tales como la ley de conservación del momento lineal y la ley de conservación de la energía), característica que ya fue subrayada en el párrafo anterior. La estructura detallada de las moléculas y la naturaleza precisa de las fuerzas intermoleculares (más allá de requisitos vagos como el de ser "fuerzas de corto alcance") interviene generalmente en la especificación de los valores de los llamados "coeficientes de transporte" pero no en la forma general de las ecuaciones diferenciales que gobiernan el comportamiento del gas. Es notable que un modelo heurístico extremadamente sencillo como es el de considerar a las moléculas del gas como esferas rígidas moviéndose en todas direcciones sin cesar y colisionando elásticamente con las otras de cuando en cuando funciona (al parecer) en multitud de ocasiones [12][15].

Dado que en la modelación de dinámica de fluidos desarrollada en el presente trabajo utilizaremos un enfoque esencialmente *cinético*, vale la pena hacer un breve esbozo de los fundamentos de la Teoría Cinética de los Gases que es básicamente el contenido de este capítulo.

Para simplificar el problema, a lo largo de este capítulo vamos a considerar que las moléculas colisionan en forma completamente elástica, es decir que no consideraremos la energía de vibración de las moléculas sino exclusivamente la energía del centro de masa de cada una de ellas. Como la energía potencial de interacción es prácticamente nula (excepto en el momento mismo de la colisión entre las moléculas) consideraremos sólo dos términos de la energía: la energía cinética del centro de masa de cada molécula y la energía potencial externa (es decir, la energía potencial debida a algún campo de fuerzas externo).

En la introducción de este capítulo ya señalamos que consideraremos a un gas como un enorme conglomerado (digamos un número N muy grande) de moléculas que se mueven libremente en el vacío colisionando de vez en cuando unas con otras.

Un sistema microscópico de este tipo está completamente determinado en todo instante de tiempo por las coordenadas espaciales de cada una de las N moléculas (en total, $3N$ coordenadas) y por las 3 coordenadas de velocidad (o de momento) igualmente de cada molécula. (que son, en total, otras $3N$ coordenadas). Si conocemos estas $6N$ cantidades en un determinado instante (y conocemos asimismo el tipo de fuerzas intermoleculares que están en acción) podemos escribir las ecuaciones de movimiento que determinan el estado del sistema en cualquier tiempo. Podemos considerar entonces un microestado como un punto en un espacio de $6N$ dimensiones cuyos ejes representan las coordenadas espaciales y de velocidad de todas y cada una de las moléculas del gas. Definiremos a este espacio como el "espacio Γ ".

Supongamos que nosotros tenemos caracterizado un sistema macroscópico mediante algunas propiedades que puedan medirse en un laboratorio (por ejemplo, la energía total del gas y el volumen al que esta circunscrito). Desde luego existe una infinidad de microestados que serían congruentes con los valores de estas propiedades. Podemos, sin embargo, asignar mentalmente una distribución de probabilidad sobre los microestados en el espacio Γ determinada por el macroestado (o estado macroscópico) del sistema. Esta distribución sería construida idealmente imaginando un ensamble de sistemas macroscópicos con los mismos valores de las propiedades macroscópicas que nos interesan, identificando el microestado de cada uno de estos sistemas y asignando a cada región del espacio Γ una frecuencia correspondiente al número de veces que aparece un microestado de esta región en el ensamble.

Esta distribución de probabilidad así definida puede describirse en términos de una función densidad de probabilidad F dependiente de las posiciones y las velocidades de todas las moléculas. Podemos definir entonces el número probable de moléculas en una cierta posición y con una cierta velocidad como sigue:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = n \int F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N, t) d^3\vec{r}_1 \dots d^3\vec{r}_{i-1} d^3\vec{r}_{i+1} \dots d^3\vec{r}_N d^3\vec{v}_1 \dots d^3\vec{v}_{i-1} d^3\vec{v}_{i+1} \dots d^3\vec{v}_N$$

[Donde $n = n(\vec{r}, t)$ es la densidad de moléculas en la posición \vec{r}].

Con base en esta función podemos definir una serie de propiedades del sistema. Así, por ejemplo, el promedio *local* de una cierta propiedad dependiente de la velocidad molecular $\Phi(\vec{v}, t)$ estaría definido como:

$$\bar{\Phi}(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{n}\right) \int \Phi(\vec{v}, t) f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\vec{v} \quad (3.5)$$

En particular, la velocidad macroscópica (o *velocidad hidrodinámica*) sería definida como la velocidad molecular promedio:

$$\vec{u}(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{n}\right) \int \vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\vec{v} \quad (3.6)$$

De hecho, la mayoría de las propiedades macroscópicas que caracterizan al sistema pueden ser vistas como promedios de cantidades microscópicas mediante la función $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$.

Si suponemos que en un cierto intervalo de tiempo Δt no hay colisiones en el gas, es claro que podemos considerar a cada molécula del gas como si fuera un sistema completamente aislado, cuyo estado estaría caracterizado en todo instante por su posición y velocidad. Podemos imaginar un ensamble que represente a este sistema (el cuál podría ser el conjunto de las moléculas del gas) y asignar probabilidades a las regiones del espacio Γ correspondiente a una sola molécula (cuya distribución sería la función f definida arriba).

Debido a la inercia de su movimiento y a la acción de las fuerzas externas, las moléculas que ocupaban una región del espacio Γ en un tiempo t ocuparán otra diferente en un instante $t + \Delta t$. El teorema de Liouville (que es válido si no hay colisiones entre moléculas) afirma que el volumen de esta región del espacio Γ se conservará durante el proceso. Esto puede ser traducido en la siguiente ecuación:

$$\frac{Df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0; \quad (3.7)$$

[En esta ecuación D/dt significa "derivada total respecto del tiempo". Por su parte, \vec{F} representa el

campo de fuerzas externo]

Desde luego, en el caso de que se den colisiones en el gas $\frac{Df}{dt}(\vec{v}, \vec{v}, t)$ ya no será más igual a cero sino que será igual a un término que involucre el número de moléculas que adquieren la velocidad \vec{v} después de la colisión y el número de los que la pierden. La forma general de este término fué encontrada por L. Boltzmann y aquí la deduciremos para el caso especial de las esferas rígidas.

Supongamos que una esfera con velocidad \vec{v}_1 y otra con velocidad \vec{v}_2 colisionan en un momento dado, de manera que la línea que une los centros tiene la dirección del vector unitario \hat{n} . ¿Cuánto valen las velocidades resultantes de la colisión?

Por la ley de conservación de la energía tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{m}{2}(v_1)^2 + \frac{m}{2}(v_2)^2 &= \frac{m}{2}(v_1')^2 + \frac{m}{2}(v_2')^2 \\ \Rightarrow (v_1)^2 + (v_2)^2 &= (v_1')^2 + (v_2')^2 \end{aligned} \quad (3.8)$$

(Evidentemente, \vec{v}_1' y \vec{v}_2' son las velocidades resultantes de las moléculas colisionantes).

Del mismo modo, aplicando la ley de conservación del momento sabemos que:

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}_1' + \vec{v}_2' \quad (3.9)$$

Y, dado que estamos pensando en colisiones entre esferas duras incluímos la hipótesis adicional de que la fuerza va en la dirección de la línea de los centros dada por \hat{n} .

Así,

$$\vec{v}_2' - \vec{v}_2 = -(\vec{v}_1' - \vec{v}_1) = \lambda \hat{n}, \text{ para algún } \lambda \text{ real.} \quad (3.10)$$

Las ecuaciones 3.8, 3.9 y 3.10 constituyen un sistema de 7 ecuaciones con 7 incógnitas ($(\vec{v}_1', \vec{v}_2', \lambda)$) y, por lo tanto, tenemos una única solución.

Vamos a calcular ahora cuántas moléculas, de las que se encuentran en un instante dado en un elemento de volumen del "espacio de velocidades para una molécula" $d^3\vec{v}$ (llamémoslas "moléculas clase A"), salen de este volumen debido a una colisión perdiendo de este modo su velocidad. Supongamos que tenemos una molécula específica de esta clase, ¿Cuántas colisiones tendrá con moléculas de otra clase particular (digamos con aquellas que tienen su velocidad en el elemento de volumen $d^3\vec{v}_2$, "moléculas clase B") en un intervalo de tiempo dt de manera que la velocidad resultante esté asimismo en algún elemento de velocidad determinado $d^3\vec{v}'$? [Se entiende que se trata de una "expectativa" porque sólo puede sufrir una colisión antes de cambiar de velocidad]

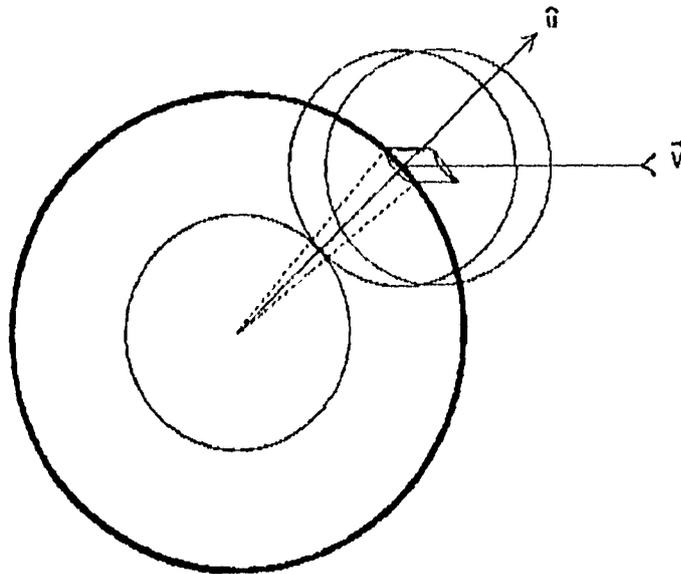


Figura 3.1.- Representación del cilindro donde el centro de la molécula B debe hallarse para que ésta colisione con nuestra molécula A durante el intervalo de tiempo dt.

Si cada molécula tiene diámetro σ , está claro que para que colisionen un par de moléculas A y B el centro de la molécula clase B debe estar *sobre* una superficie esférica de radio σ centrada en la molécula clase A. Además, para que la velocidad resultante sea la deseada, el centro de la molécula clase B debe estar en una cierta área definida $\sigma^2 d\Omega$ de dicha superficie esférica.

Para que la colisión ocurra en el tiempo dt, el centro de la molécula clase B debe encontrarse dentro de un "cilindro" que se prolonga a partir del área $\sigma^2 d\Omega$ en la dirección contraria a la de la velocidad relativa $\vec{V} = \vec{v}_2 - \vec{v}$ (prolongación precisamente por una cantidad Vdt). Exclusivamente las moléculas clase B contenidas en este cilindro colisionarán con nuestra molécula en el tiempo dt, produciendo la velocidad resultante deseada (Ver figura 3.1).

El volumen del cilindro en cuestión es $(V \cos \Theta dt) (\sigma^2 d\Omega)$, donde Θ es el ángulo entre V y la dirección de la línea de centros \hat{u} . Podríamos decir que el número probable de colisiones de nuestra molécula clase A con moléculas clase B en el segmento de superficie $\sigma^2 d\Omega$ es igual a $f(\vec{v}_2) d^3 \vec{v}_2$ multiplicado por el volumen del cilindro ya referido. Es decir, igual a

$$(\sigma^2 d\Omega) f(\vec{v}_2) V^* \cos \Theta dt d^3 \vec{v} \quad (3.11)$$

Sin embargo, aquí estamos haciendo uso de una hipótesis muy sutil pero no auto-evidente, la llamada *Hipótesis de caos molecular*: estamos suponiendo que la probabilidad de hallar una molécula clase B en un cierto volumen es independiente de que este volumen haya o no sido elegido como una vecindad de una molécula clase A dada, es decir suponemos una total independencia estadística entre las moléculas clase A y las clase B.

Una vez hecha esta aclaración, encontramos que si el intervalo dt es suficientemente pequeño como para que cada molécula no colisione más de una vez entonces el número total de colisiones entre moléculas clase A y otro tipo cualesquiera de moléculas sería $dt d^3\vec{v} \iiint \sigma^2 f(\vec{v}) f(\vec{v}_2) \cos\Theta d^3\vec{v}_2 d\Omega$ [...(3.12)], lo cual sería interpretado como el total de moléculas clase A que colisionan y pierden su velocidad en el tiempo dt .

Mediante un método similar puede calcularse el número de moléculas que pasan a formar parte de la clase A después de una colisión en el período de tiempo considerado. Al resultado de esta operación se le resta la expresión 3.12 para obtener el cambio total en el número de moléculas clase A (en el tiempo dt) a causa de las colisiones. Finalmente, este cálculo (que no haremos aquí) nos lleva a una fórmula análoga a la ecuación 3.7 pero donde sí se toma en cuenta la existencia de colisiones binarias (es decir, entre dos partículas cada vez). Esta fórmula es la llamada *Ecuación de Transporte de Boltzmann*:

$$\frac{Df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \iiint \sigma^2 v \cos\Theta [f(\vec{v}') f(\vec{v}'_2) - f(\vec{v}) f(\vec{v}_2)] d^3\vec{v}_2 d\Omega \quad (3.13)$$

(Hay que aclarar que $f(\vec{v}_2)$ y $f(\vec{v}'_2)$ son en realidad funciones de $\vec{v}, \vec{v}', \Omega$ ya que las velocidades resultantes de la colisión \vec{v}_2, \vec{v}'_2 están determinadas exclusivamente por las velocidades originales y la dirección de la línea de los centros).

La ecuación de transporte de Boltzmann determina la evolución de la función de distribución de velocidades de las moléculas $f(\vec{r}, \vec{v})$ en el tiempo conocida dicha función (en su totalidad) para un tiempo determinado. Desgraciadamente se trata de una ecuación integro-diferencial no-lineal sumamente difícil de resolver excepto en casos muy simples y haciendo fuertes aproximaciones. En este trabajo, sin embargo, no nos preocuparemos por esta cuestión, dado que sólo nos interesa el enfoque metodológico de la teoría cinética (que será utilizado posteriormente en el análisis del modelo de Lattice Boltzmann, capítulo 5) además de ciertos resultados teóricos que se derivan de la ecuación 3.13.

A partir de la ecuación 3.13 pueden deducirse varios resultados importantes. Uno de ellos es que si $\phi(\vec{v})$ es una cantidad asociada a cada molécula que depende de su velocidad y que se conserva durante las colisiones entonces se sigue la siguiente ley de conservación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\bar{\phi}) + \text{div}(n\bar{\phi}\vec{v}) = \frac{n\vec{r}}{m} \cdot \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \vec{v}}\right). \quad (3.14)$$

(Evidentemente, $\bar{\phi}$ es el valor medio de ϕ obtenido mediante las funciones de distribución).

Si aplicamos la ecuación 3.14 para el caso en que ϕ sea la masa molecular, el momento lineal y la energía cinética respectivamente obtendremos la ecuación de continuidad de la masa, la ecuación de transporte de momento y la ecuación de transporte de energía:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad (3.15a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho \overline{v_i v_k}) = f_i \quad (3.15b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho}{2} \overline{v^2}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\rho}{2} \overline{v^2 v_k}\right) = \vec{f} \cdot \vec{u} \quad (3.15c)$$

donde $\rho = nm$, $\vec{f} = n\vec{F}$ son las densidades de masa y de fuerza respectivamente.

(En la ecuaciones 3.15b y 3.15c se hizo uso de la notación de Einstein para los índices repetidos).

De las ecuaciones 3.15 vemos que las cantidades medias $\overline{\rho v_i v_k}$ y $\frac{\rho}{2} \overline{v^2 v_k}$ representan los tensores de flujo de momento y energía respectivamente.

Definamos la siguiente propiedad local del gas: $H(\vec{r}, t) = \iiint f(\vec{r}, \vec{v}, t) \log f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{v}$ la cuál depende exclusivamente de la ley de distribución de las velocidades moleculares $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$. Algunos autores consideran esto como una definición de la entropía en la teoría cinética [$S = -kH$, donde k es la constante de Boltzmann]; otros la distinguen llamandola simplemente "función H de Boltzmann". De cualquier forma, dado que esta función está relacionada con la entropía local del sistema, conviene saber cómo varía con el tiempo.

Un segundo resultado teórico importante de la ecuación 3.13 es el "Teorema H de Boltzmann" que describe precisamente la variación temporal de la función H. Aunque no expondremos aquí la demostración del teorema, vamos a resumir el resultado mediante la siguiente expresión:

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \text{div} \vec{S} = G(\vec{r}, t) \quad (3.16)$$

donde $G(\vec{r}, t) = -\frac{\sigma^2}{8} \iiint \mathcal{V} \cos \Theta \left[\log f f_2 - \log f' f_2' \right] (f' f_2' - f f_2) d^3 \vec{v} d^3 \vec{v}_2 d\Omega$ (3.17)

mientras que $\vec{S} = \iiint \vec{v} f(\vec{v}) \log f(\vec{v}) d^3 \vec{v}$ es el vector de flujo asociado con H.

Desde luego, $f = f(\vec{v}), f' = f(\vec{v}'), f_2 = f(\vec{v}_2), f_2' = f(\vec{v}_2')$.

Ahora bien, la diferencia de logaritmos que aparece entre paréntesis cuadrados en la ecuación 3.14 tiene el signo opuesto que el término que aparece entre llaves debido a que la función logarítmica es monótona creciente. Esto implica que el argumento de la integral es, bajo cualquier circunstancia, negativo y por lo tanto también lo es siempre la función $G(\vec{r}, t)$. Se concluye, por lo tanto, que:

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \text{div} \vec{S} \leq 0, \quad (3.18)$$

Como se ve, esta ecuación tiene la forma de una ley de conservación excepto porque en este caso se trata de una *desigualdad*. Para un sistema aislado la ecuación implica que H puede fluir en una dirección o en otra dentro del sistema, pero en términos globales la función H es *monotonamente decreciente* para todo tiempo.

La desigualdad 3.18 sólo se transforma en igualdad si G=0, lo cual es sólo posible si la función de distribución cumple con la siguiente propiedad:

$$\log f + \log f' = \log f_2 + \log f_2' \quad (3.19)$$

Para un sistema aislado el flujo de H sería nulo y la función de distribución que cumpliera la ecuación 3.19 representaría claramente la correspondiente a una situación de *equilibrio local*.

Así pues, el logaritmo de la función de distribución es una cantidad dependiente de la velocidad que se conserva durante cualquier colisión en las condiciones de un estado de equilibrio (y a la inversa: si $\log f(\vec{v})$ es un invariante de colisión entonces el estado del sistema es de equilibrio). Es decir, es una cantidad que puede distribuirse entre las moléculas colisionantes pero que es tal que su suma total se mantiene inalterable después de la colisión. Conocemos cinco cantidades que se conservan durante las colisiones y que son independientes entre sí, la masa, la energía cinética y las tres componentes del momento lineal. Por tanto, el logaritmo de la función de distribución debe ser (bajo condiciones de equilibrio termodinámico) una combinación lineal de estas cuatro cantidades conservadas:

$$\log f = \alpha_1 \frac{m}{2} v^2 + \vec{\beta} \cdot (m\vec{v}) + \alpha_2 m \quad (3.20)$$

donde $\alpha_1, \vec{\beta}, \alpha_2$ son funciones únicamente de la posición y el tiempo (relacionadas, desde luego, con valores de propiedades macroscópicas).

La expresión 3.20 puede escribirse en la forma más conocida:

$$f = A \exp\{-h(\vec{v} - \vec{u})^2\} \quad (3.21)$$

donde A, h, \vec{u} son funciones de la posición y del tiempo. Se puede demostrar que estas funciones están directamente relacionadas con las cantidades conservativas globales. Así, \vec{u} es la velocidad macroscópica (es decir, el promedio de las velocidades moleculares). Por otra parte, $h = \frac{m}{2kT}$ y $A = \frac{\rho}{m} \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2}$ donde ρ es la densidad de masa, k la constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta.

La distribución de equilibrio obtenida en la ecuación 3.21 es conocida en la literatura como la distribución maxwelliana de velocidades moleculares. A partir de ella puede deducirse el Teorema de la equipartición de la energía según el cual la energía cinética promedio por grado de libertad es igual a $\frac{1}{2} kT$ donde k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura absoluta definida como: $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial(-kH)}{\partial E}$ [E es la energía interna local total por unidad de volumen: $E = n(r,t)e(r,t)$]. La distribución maxwelliana fue deducida en el caso de un equilibrio global del sistema pero puede utilizarse asimismo para describir un

estado de equilibrio *local* en donde los parámetros de la función (tales como \vec{u} y h) serían funciones del espacio y del tiempo

Finalmente cabe destacar que los momentos de la función de distribución maxwelliana son fáciles de determinar: Como se trata de una distribución simétrica con respecto al valor medio de la velocidad todos los momentos impares son nulos: $c_i = 0, c_j c_k = 0, etc.$, donde $c_i = v_i - u_i$. Por otro lado, como la distribución maxwelliana es invariante con respecto a reflexiones de espejo y rotaciones tenemos que:

$$\overline{c_i c_j} = \frac{p}{\rho} \delta_{ij}; \quad \overline{c_i c_j c_k c_l} = \frac{p^2}{\rho^2} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ji} \delta_{kl} + \delta_{kl} \delta_{ij}); \quad (3.22)$$

donde p es la presión y δ_{ij} es la función delta de Kronecker.

Mediante estos valores de los momentos de la distribución puede calcularse el flujo de momento "moléculas" (es decir, relativo al centro de masas local) visto desde el sistema de referencia del centro de masas local. Este flujo, considerado en sus diversas direcciones de propagación, constituye el tensor de esfuerzos definido en el párrafo 3.1 y corresponde en el enfoque cinético al valor promedio de las cantidades microscópicas $(u_i - v_i)(u_k - v_k)$ multiplicado por la densidad de masa ρ . Como se puede probar, en el caso de una distribución maxwelliana de velocidades (estado de *equilibrio local*) este tensor de esfuerzos es isotrópico e igual a $-p \delta_{ik}$ donde $p = \rho \frac{kT}{m}$. Esta situación corresponde a la del flujo de un "fluido ideal" cuyo comportamiento es descrito por las ecuaciones de Euler (ecuación 3.2). También se puede mostrar que el flujo de calor (dado por el promedio de la cantidad microscópica $\frac{1}{2}(\vec{v} - \vec{u})^2 (\vec{v} - \vec{u})$) multiplicado por la densidad de masa ρ es igual a cero en un estado de equilibrio local. Este es un estado de flujo "adiabático" (o isoentrópico) donde no hay transferencia irreversible de calor.

Finalmente hay que subrayar que la forma del tensor de esfuerzos de Navier-Stokes puede obtenerse a partir de la ecuación 3.13 añadiendo una pequeña "perturbación" a la función de distribución de las velocidades moléculas correspondiente al estado de equilibrio local (la maxwelliana)[12]. Hay que subrayar que un método análogo a éste será utilizado también en el modelo Lattice Boltzmann que será descrito en el capítulo 5.

CAPITULO 4. LOS MODELOS DE GASES EN REDES.

En el capítulo 1 (parágrafo 1.5) analizamos brevemente la filosofía detrás de los modelos de gases en redes y hablamos de sus ventajas y limitaciones. Aquí vamos a hacer una descripción más detallada de algunos modelos pertenecientes a esta corriente de investigación.

El antecedente más directo de los modelos de gases en redes fue uno propuesto por Hardy, de Pazzis y Pomeau en 1976. Éste, el llamado modelo HPP, era completamente determinístico y trataba ya con tiempo, posiciones y velocidades discretas. Fue introducido para analizar, en el marco más simple posible, cuestiones fundamentales de la mecánica estadística tales como la ergodicidad y la divergencia de los coeficientes de transporte en dos dimensiones. Era, por lo tanto, un modelo de objetivos puramente académicos. Aunque no simulaba una completa dinámica de fluidos aparecían ya en este modelo algunos elementos muy interesantes, como la presencia de ondas sonoras.

Frisch, Hasslacher y Pomeau superaron muchas dificultades del modelo HPP y presentaron en 1986 un modelo de gases en redes conocido en la literatura como modelo FHP. Éste es, de hecho, el más simple de los modelos de autómatas celulares que reproduce el comportamiento colectivo predicho por las ecuaciones de Navier-Stokes en dos dimensiones. Las partículas se mueven todas con la misma rapidez moviéndose en cada paso de tiempo a los sitios adyacentes sobre una red hexagonal bidimensional. En la actualidad este modelo es considerado como un sistema eficiente para la simulación de flujos viscosos para números de Mach moderados y bajo situaciones que involucren condiciones de frontera complejas. Pero el modelo FHP no puede ser utilizado para la consideración de efectos térmicos debido a que todas las partículas se mueven con la misma rapidez. Cabe destacar también que se ha conseguido extender el modelo FHP al caso tridimensional, lo cual fue realizado por d'Humières, Lallemand y Frisch [47].

El más sencillo de los modelos de gases en redes con propiedades térmicas es un modelo de nueve velocidades definido sobre una red cuadrada donde las partículas pueden estar en reposo o moviéndose hacia sus primeros o segundos vecinos en un paso de tiempo. El modelo ARIANNA, que fue mencionado en el parágrafo 1.5, es un modelo de éste tipo.

A continuación vamos a describir algunos de estos modelos con cierto detalle.

4.1. MODELO HPP (HARDY, DE PAZZIS Y POMEAU, 1976).

El modelo HPP consta de una red cuadrada (figura 4.1). Las partículas son de masa y de rapidez unidad y se localizan en los nodos de la red a tiempos enteros. La distancia entre un nodo y otro adyacente es también de una unidad y, por lo tanto, cada partícula se mueve en un paso de tiempo desde un sitio a alguno de sus primeros vecinos. Esto significa que cada partícula sólo puede tener una de cuatro posibles velocidades (señaladas en la figura 4.1 con los números 1, 2, 3 y 4).

Es importante señalar que se cumple un *principio de exclusión* que señala que *no más de una partícula se encuentra en un tiempo y un nodo determinado, moviéndose en una dirección determinada*. Este principio suele ser común a todos los modelos de gases en redes y tiene consecuencias de importancia en el comportamiento dinámico del sistema en su totalidad. Resumiendo, el estado de la red en cualquier sitio determinado \vec{r} en un instante de tiempo dado t puede representarse por cuatro variables booleanas

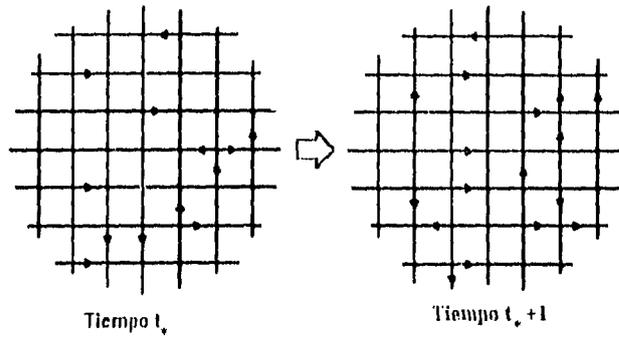


Figura 4.1a.- Representación de la red cuadrada del modelo HPP y de su evolución en el tiempo.

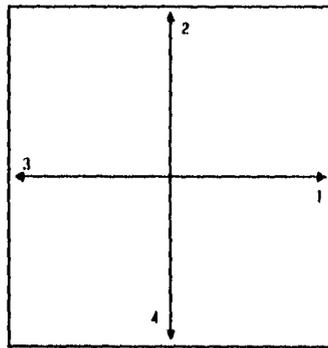


Figura 4.1b.- Un esquema de las velocidades permitidas para las partículas.

$n_i(\vec{r}, t)$ donde el subíndice i señala una de las cuatro velocidades posibles a las que denotaremos por \vec{c}_i . El valor de $n_i(\vec{r}, t)$ es igual a "1" si hay una partícula en el sitio \vec{r} al tiempo t moviéndose con la velocidad \vec{c}_i y es igual a "0" en caso contrario.

Cuando dos y *exactamente dos* partículas llegan a un nodo teniendo velocidades exactamente opuestas inmediatamente dejan el nodo con las otras dos direcciones posibles, previamente desocupadas. (figura 4.2).

Ésta es la única regla de colisión en el modelo HPP. Estas reglas de colisión obviamente conservan el número de partículas (o la masa) y el momento siendo, de hecho, estas reglas las únicas no-triviales con esta característica (También se conserva la energía cinética en las colisiones pero no es ésta una ley independiente sino una consecuencia trivial de la conservación del número de partículas).

La evolución del sistema consta de dos pasos. El primer paso es la *colisión* con la regla mencionada: si en cualquier sitio se presenta el estado $(1,0,1,0)$ es transformado en el estado $(0,1,0,1)$ y viceversa; todos los demás estados permanecen igual. El segundo paso es la *propagación* de cada partícula al vecino más cercano en la dirección que señala su velocidad: es decir, $n_i(\vec{r}, t + 1) = n_i(\vec{r} - \vec{c}_i, t)$. Ambos son aplicados en cada paso de tiempo entero.

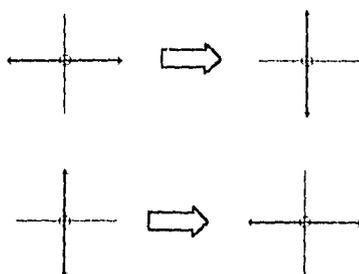


Figura 4.2.- Reglas de colisión en el modelo HPP.

Hay que señalar que, en este modelo, el momento a lo largo de *cada* línea (vertical u horizontal) de la red es conservado en las reglas de colisión y de propagación. Esto produce un verdadero exceso de cantidades conservadas para la modelación física.

La dinámica del modelo HPP es invariante bajo todas las transformaciones discretas que conservan la red cuadrada: traslaciones discretas, rotaciones por $\frac{\pi}{2}$, simetrías de espejo. Además, la dinámica es invariante bajo dualidad (esto es, intercambio entre partículas y "huecos").

4.2.- LOS MODELOS FHP. (FRISCH, HASSLACHER Y POMEAU, 1986).

Los modelos FHP son una variante del modelo HPP descrito arriba. Tenemos ahora una red hexágonal (hecho que, como se verá en el análisis del modelo Lattice Boltzmann del capítulo 5, puede tener importantes consecuencias en cuanto a la isotropía del sistema). Cada nodo está conectado a sus seis primeros vecinos mediante vectores unitarios \vec{c}_i (con i definido módulo seis). La red hexágonal y su evolución en el tiempo está representada en la figura 4.3, mientras que las velocidades permitidas \vec{c}_i están representadas en la figura 5.1 (capítulo 5).

El modelo tiene las mismas reglas que el HPP excepto en lo que concierne a las reglas de colisión. Para una colisión entre dos partículas con velocidades exactamente opuestas donde las direcciones de entrada son $(i, i + 3)$ hay dos posibles "velocidades de salida" de manera que se conserven la masa y el momento: estas son $(i + 1, i + 4)$ y $(i - 1, i - 4)$. Ambas posibilidades están representadas en la figura 4.4. Se puede decidir elegir bajo cualquier circunstancia alguna de las dos opciones. En este caso tendríamos una regla

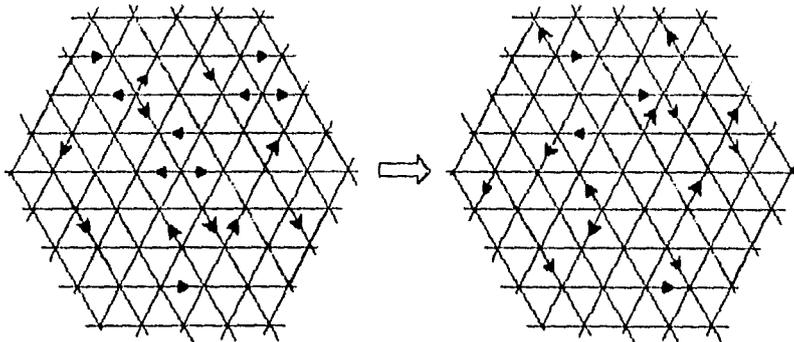


Figura 4.3.- Representación de la red hexagonal del modelo FHP y su evolución temporal.

determinística que tendría el inconveniente de no ser invariante bajo "simetrías de espejo". Como una alternativa, podemos hacer una elección aleatoria siempre que se presente la disyuntiva con iguales probabilidades para ambas opciones (restaurando de esta manera la simetría de espejo) o bien una elección pseudo-aleatoria dependiente, por ejemplo, de la paridad del tiempo.

Hay que señalar que nuevamente se presentan aquí *leyes de conservación espúreas*. Además del número de partículas se conserva la diferencia de números de partículas en cualquier par de direcciones opuestas $(i, i + 3)$. El momento es una combinación de estas últimas cantidades, no así el número de partículas. Por lo tanto, resulta un total de *cuatro* cantidades escalares conservadas. Esto significa que, además del momento y masa, hay una ley de conservación espúrea. Si esta ley no es removida el resultado será que la dinámica a gran escala del sistema diferirá drásticamente de la hidrodinámica ordinaria. Una forma de removerla es introduciendo colisiones triples (es decir, entre tres partículas). Las reglas de colisiones triples serían las siguientes: $(i, i + 2, i + 4) \Rightarrow (i + 1, i + 3, i + 5)$ regla que es ilustrada en la figura 4.4 (b)

Las reglas de colisión descritas hasta aquí no son invariantes bajo "dualidad" (intercambio de partículas y "huecos") pero pueden hacerse así si se les añaden los "dobles" de las colisiones binarias ya definidas

(Ver figura 4.4 (c)). Finalmente puede saturarse el conjunto de reglas de colisión añadiendo colisiones binarias con un "espectador" (es decir, una partícula que no interviene en la colisión) como es ilustrado en la figura 4.4 (d).

El modelo FHP-II es una variante del modelo FHP que incluye partículas "en reposo" que pueden encontrarse en el centro de cada hexágono. Además se añade una regla de colisión adicional que es la presentada en la figura 4.4 (e). Estas colisiones binarias que involucran partículas en reposo constituyen un medio más eficiente de remover las leyes de conservación espúreas, especialmente cuando se trabaja con "gases" a bajas densidades.

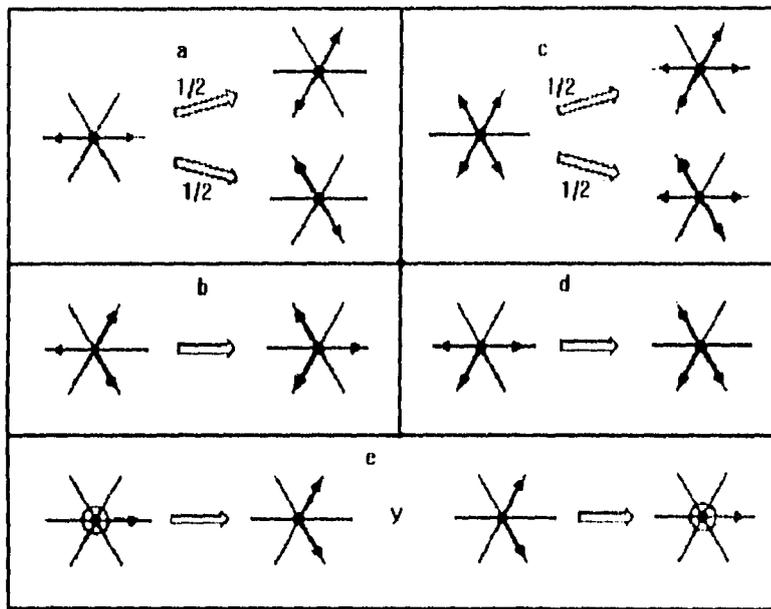


Figura 4.4.- Reglas de colisión del modelo FHP.

No hablaremos ahora de las versiones tridimensionales [46] del modelo FHP sino que nos concentraremos en el problema que lleva a la formulación de modelos del tipo de ARIANNA. Como ya hemos visto, tanto en el modelo HPP como en el FHP la conservación de la energía es una consecuencia trivial de la conservación del número de partículas (excepto en el modelo FHP-II donde las reglas de colisión *no* conservan la energía) y, de hecho, la energía cinética por partícula es siempre en todas partes y en todo tiempo la misma. Por estas razones, es imposible simular en estos modelos fenómenos termodinámicos como podría ser, por ejemplo, el de *la convección*. Si queremos aplicar modelos de gases en redes al estudio de la contaminación atmosférica o, en general, de cualquier fenómeno meteorológico tenemos que modificar el modelo de manera que las partículas puedan tener rapidezces diferentes y existan reglas de colisión que conserven la energía de un modo no-trivial.

4.3. EL MODELO ARIANNA. DESCRIPCIÓN.

El más sencillo de los modelos de gases en redes que permite simular fenómenos térmicos es un modelo de nueve velocidades definido sobre una red cuadrada, de manera que las partículas pueden tanto estar en reposo como moviéndose hacia sus primeros o segundos vecinos en un paso de tiempo [9][10]. Por estas razones, las partículas del "gas" pueden tener diversas velocidades y adquieren significado propiedades tales como la temperatura, la entropía o los calores específicos. El modelo de nueve velocidades fue presentado por S. Chen et al en el artículo "A Lattice Gas Model with Temperature" (1989). En el Instituto de Investigaciones Eléctricas (I.I.E.) ha sido desarrollado un modelo de diagnóstico de campos de vientos (denominado ARIANNA) inspirado en el modelo de nueve velocidades que cuenta con reglas específicas de implementación de las condiciones iniciales y de frontera, interacción diatérmica entre sistemas separados y otros mecanismos especiales.

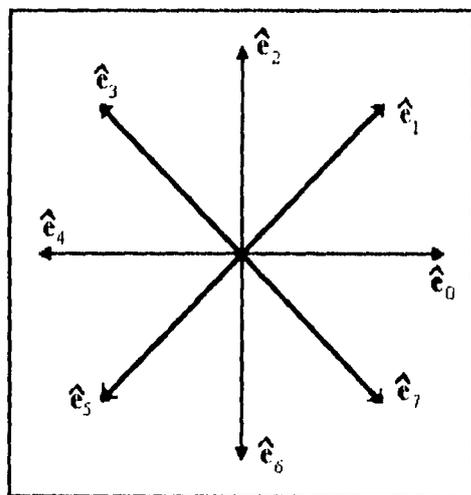


Figura 4.5.- Las direcciones permitidas para las partículas en el modelo ARIANNA.

Este modelo constituye un ejemplo de la aplicación de las técnicas de autómatas celulares al problema de la reconstrucción de campos de viento sobre terrenos complejos y, por estas razones, vamos a describirlo con cierto detalle a continuación. (De hecho, el grueso de este capítulo está dedicado a analizar tanto la teoría del modelo ARIANNA como las simulaciones realizadas con él).

El modelo de nueve velocidades consiste en un sistema de partículas indistinguibles de masa unitaria que se desplazan sobre una red cuadrada bidimensional, la cual contiene N_x sitios a lo largo del eje X del

sistema de coordenadas y N sitios a lo largo del eje Y . Las partículas pueden moverse en las siguientes direcciones (que son, por otro lado, las únicas permitidas):

$$\hat{e}_\alpha = \begin{cases} \cos\left(\alpha \frac{\pi}{4}\right)\hat{u}_x + \sin\left(\alpha \frac{\pi}{4}\right)\hat{u}_y, & \text{si } \alpha = 0,1,2,3,4,5,6,7 \\ 0 & \text{si } \alpha = 8 \end{cases}$$

donde \hat{u}_x y \hat{u}_y son los vectores unitarios en las direcciones de los ejes X e Y respectivamente. Es evidente que \hat{e}_8 representa la "dirección" de las partículas en reposo, mientras que la dirección indicada por el resto de los vectores \hat{e}_α está esquematizada en la figura 4.5.

Del mismo modo que en los modelos HPP y FHP se cumple un *principio de exclusión* que prohíbe que haya más de una partícula en un sitio dado en un tiempo determinado moviéndose en alguna dirección determinada \hat{e}_α .

Como ya dijimos, el tiempo está discretizado y en cada paso de tiempo las partículas se desplazan desde el centro del cuadrado en el que se encuentran al centro del cuadrado más próximo en la dirección \hat{e}_α que les corresponde. (Desde luego, esto ocurrirá sólo con las partículas que no están en reposo. Las partículas que se encuentran en la "dirección" \hat{e}_8 permanecerán en su lugar). Esto significa que las únicas magnitudes de la velocidad c_α y las únicas energías cinéticas ϵ_α permitidas a las partículas del "gas" son las siguientes:

$$c_\alpha = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha = 8 \\ 1 & \text{si } \alpha = 0,2,4,6 \\ \sqrt{2} & \text{si } \alpha = 1,3,5,7 \end{cases} \quad \epsilon_\alpha = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha = 8 \\ \frac{1}{2} & \text{si } \alpha = 0,2,4,6 \\ 1 & \text{si } \alpha = 1,3,5,7 \end{cases}$$

Para resumir, el estado del sistema en un instante cualquiera t puede representarse por nueve campos booleanos $S_\alpha(\vec{r}, t)$, ($\alpha = 0, \dots, 8$) que se definen de la manera siguiente: $S_\alpha(\vec{r}, t) = 1$ si en el sitio \vec{r} al tiempo t se encuentra una partícula moviéndose en la dirección \hat{e}_α (y, por lo tanto, con una rapidez c_α y con una energía cinética ϵ_α), mientras que $S_\alpha(\vec{r}, t) = 0$ si no hay una partícula en esa situación.

La evolución del sistema se define mediante tres operadores locales que establecen el valor de los campos booleanos S_α en un sitio cualquiera al tiempo $t+1$ a partir del valor de estos mismos campos booleanos al tiempo t en una vecindad del sitio en cuestión que incluye tanto al propio sitio como a sus *primeros y segundos vecinos*. (Desde luego, se entiende por *primeros vecinos* aquellos sitios cuyo centro dista del sitio central por una distancia de 1 mientras que los *segundos vecinos* son aquellos que distan del punto central por una distancia de $\sqrt{2}$). Estos operadores (que se aplican consecutivamente uno tras otro para cada paso de tiempo) son el *operador de traslación de las partículas* (T), el *operador de colisiones de las partículas entre sí* (C) y, finalmente, el *operador de colisiones de las partículas con las fronteras sólidas* (B). La definición de los operadores locales es la siguiente:

(1) **Operador de traslación de las partículas (T).** El operador T representa, como su nombre lo indica, el desplazamiento "libre" de las partículas desde el sitio en que se encuentran hacia a_α el sitio vecino que indica la dirección \hat{e}_α asociada a la partícula. El proceso es el siguiente: en cada sitio i de la red, y a cada tiempo t , el operador T explora todos los sitios contenidos en su vecindad (que como ya se explicó incluye a sus primeros y segundos vecinos) y mueve hacia el sitio central a todas las partículas cuya velocidad apunte directamente hacia ese sitio. En símbolos, esta operación puede expresarse de la siguiente manera:

$$T: S_\alpha(\vec{r}, t) \rightarrow S_\alpha(\vec{r}, t+1) = S_\alpha(\vec{r} - c_\alpha \hat{e}_\alpha, t)$$

Colisiones de Dos Partículas	Colisiones de Tres Partículas

Figura 4.6.- Tabla de colisiones de dos y tres partículas que define al operador C.

(2) **Operador de colisiones de las partículas entre sí (C).** El operador C actúa siempre inmediatamente después del operador T (es decir, el operador C actúa sobre los campos booleanos S_α que resultaron de la aplicación del operador T). Cuando dos o más partículas han alcanzado el centro de un

mismo sitio colisionan entre sí de manera que se modifican sus velocidades respectivas pero no así el número de partículas ni el momento *total* de las partículas colisionantes ni su energía cinética *total*. Este es precisamente el proceso representado por el operador C. Este se implementa mediante una tabla de actualización en la que cada posible estado de entrada tiene asociado todos los posibles estados de salida que cumplen con las leyes de conservación de la masa, el momento y la energía cinética. La elección entre estos posibles "estados de salida" se lleva a cabo mediante un mecanismo aleatorio con idénticas probabilidades para todos ellos. En la figura 4.6 se muestra la tabla de colisiones para dos y tres partículas.

(3) **Operador de colisiones de las partículas con las fronteras sólidas (B).** A los campos booleanos $S_\alpha(\vec{r}, t)$ añadimos un campo booleano adicional no dependiente del tiempo $h(\vec{r})$ con el propósito de simular la presencia de obstáculos fijos (si se desea que las fronteras sólidas sean móviles, este campo booleano adicional *sí* tendría que depender del tiempo; es decir, tendría que ser actualizado a cada paso). El valor de $h(\vec{r})$ sería igual a "0" si el sitio señalado por \vec{r} pertenece a la frontera sólida que limita al gas, y sería igual a "1" en caso contrario. El operador B, que simula las colisiones de las partículas que componen el "gas" con las fronteras sólidas que lo rodean, hace uso precisamente del campo $h(\vec{r})$. La acción del operador B es la siguiente: cuando una partícula llega a algún sitio donde $h(\vec{r})=0$, sufre una colisión con el obstáculo sólido existente en ese sitio; el resultado es que *invierte su velocidad*. Este proceso conserva el número de partículas y la energía cinética pero no el momento. Este modelo de colisión con las "paredes" permite simular, a nivel colectivo, el efecto de adherencia del fluido a las paredes sólidas debido a la viscosidad (lo que en inglés se expresaría como "no-slip condition"). Reglas alternativas a la de la inversión de la velocidad son la *reflexión* de la dirección del movimiento de las partículas al entrar a un sitio que represente una frontera sólida (regla que permitiría simular, a nivel colectivo, deslizamiento del fluido por sobre las paredes), o bien también la *absorción* de la partícula al entrar en el sitio en cuestión (regla que permitiría la simulación del efecto de *deposición en el suelo* de las partículas del gas).

Las características "discretas" del modelo provocan que la información recibida por una única simulación no sea muy confiable y que las propiedades locales del sistema varíen bruscamente de un sitio a otro, dificultando el obtener relaciones cuantitativas continuas que sean sugeridas por los resultados del modelo y puedan ser comparadas fácilmente con los datos obtenidos en los monitores meteorológicos. Para "suavizar" los resultados de la simulación se necesita alguna clase de promedio sobre los datos obtenidos. Una manera de hacer esto (que requiere que la red tenga muy grandes dimensiones) sería el agrupar los sitios en "celdas" (por ejemplo, cada 9x9 sitios formarían una "celda") y promediar todas las propiedades microscópicas (momento, energía cinética, etc) de las partículas contenidas a un tiempo dado en una celda para obtener valores estimados de *variables macroscópicas*. Otra manera, que sólo tiene sentido si el flujo estudiado es *estacionario* (esto es, tal que las propiedades macroscópicas del fluido "casi" no cambian con el tiempo), sería realizar un promedio sobre el tiempo. Sin embargo, el procedimiento ideal es hacer promedios sobre una muestra de "experimentos" lo cual se llevaría a cabo de la manera descrita a continuación.

Supóngase que, bajo las mismas condiciones iniciales (macroscópicas) y de frontera se realiza un número grande, N, de simulaciones con el gas modelo, registrándose, para cada tiempo t y en cada sitio \vec{r} , el valor de los campos booleanos $S_\alpha(\vec{r}, t)$. Si denotamos por $S_\alpha^i(\vec{r}, t)$ el valor de $S_\alpha(\vec{r}, t)$ en el *i*-ésimo experimento (o simulación) entonces podemos definir el número promedio de partículas por sitio que se mueven en la dirección \hat{e}_α , en el sitio \vec{r} al tiempo t, como:

$$n_\alpha(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_\alpha^i(\vec{r}, t) \quad (4.1)$$

La función $n_\alpha(\vec{r}, t)$ es la llamada *función de distribución de las velocidades microscópicas* y con ella se pueden calcular todas las variables macroscópicas relevantes como promedios de alguna cantidad microscópica.

Cabe destacar que el promedio sobre una muestra de experimentos es sólo posible porque el modelo *no es determinista* sino que está provisto de diversos mecanismos aleatorios tales como la elección al azar entre los posibles resultados de una colisión (tal como está ilustrado en la tabla de colisiones de la figura 4.6) o como la determinación de las condiciones iniciales microscópicas a partir de las macroscópicas (lo cual puede ser también un procedimiento aleatorio).

A partir de la función de distribución se obtienen el número promedio de partículas por sitio $n(\vec{r}, t)$, la energía cinética promedio por sitio $e(\vec{r}, t)$ y la velocidad macroscópica (o "velocidad hidrodinámica") $\vec{u}(\vec{r}, t)$ de la siguiente manera:

$$n(\vec{r}, t) = \sum_{\alpha=0}^8 n_\alpha(\vec{r}, t) \quad (4.2)$$

$$e(\vec{r}, t) = \sum_{\alpha=0}^8 \epsilon_\alpha n_\alpha(\vec{r}, t) \quad (4.3)$$

$$\vec{u}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \sum_{\alpha=0}^8 \mathbf{e}_\alpha \hat{e}_\alpha n_\alpha(\vec{r}, t) \quad (4.4)$$

Antes de abordar brevemente un análisis termodinámico del modelo agreguemos que, además de las fronteras sólidas representadas por los sitios donde $h(\vec{r})=0$, podemos añadir *sitios de control* donde pueden fijarse condiciones estacionarias locales que permitan "forzar" al sistema para que cumpla ciertas condiciones especiales. Esto será tratado con mayor detalle cuando hablemos de las diversas pruebas a las que ha sido sometido el modelo ARIANNA.

ANÁLISIS TERMODINÁMICO DEL MODELO.

Obsérvese que, a consecuencia del principio de exclusión y del espectro limitado de la velocidad de las partículas, la energía promedio por sitio $e(\vec{r}, t)$ tiene una cota inferior, e_{min} , y otra superior, e_{max} , cuyos valores dependen del número promedio de partículas. Los valores de estas cotas son los siguientes:

$$e_{min} = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq n \leq 1 \\ \frac{(n-1)}{2} & \text{si } 1 \leq n \leq 5 \\ n-3 & \text{si } 5 \leq n \leq 9 \end{cases} \quad e_{max} = \begin{cases} n & \text{si } 0 \leq n \leq 4 \\ \frac{(n+4)}{2} & \text{si } 4 \leq n \leq 8 \\ 6 & \text{si } 8 \leq n \leq 9 \end{cases}$$

(4.5)

Las gráficas de e_{min} y e_{max} son presentadas en la figura 4.7. El área sombreada que se encuentra entre ambas curvas representa al conjunto de todos los estados permitidos al "gas".

Puede calcularse la entropía por sitio del sistema como función de las funciones de distribución n_α (que representa el número de posibles estados de una red que son compatibles con los valores dados de las funciones de distribución dividido por el número de sitios de la red). El resultado es la siguiente expresión:

$$s = -k \sum_{\alpha=0}^s [n_\alpha \ln(n_\alpha) + (1 - n_\alpha) \ln(1 - n_\alpha)] \quad (4.6)$$

(Para una demostración del resultado pueden verse las referencias [10][17]).

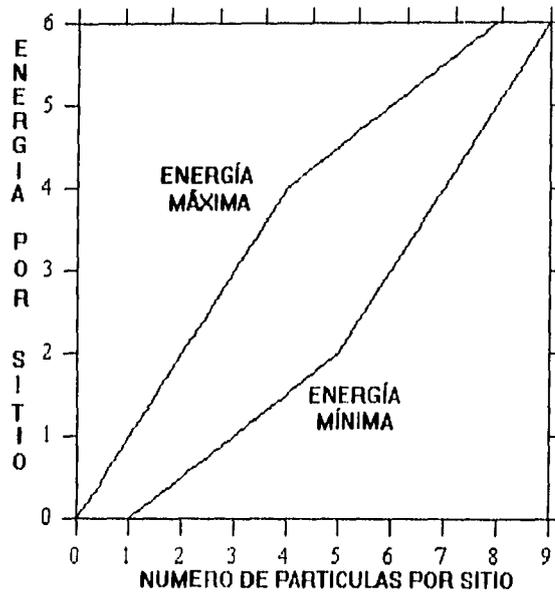


Figura 4.7.- Energías mínima y máxima en función del número de partículas por sitio.

Si queremos analizar las condiciones de equilibrio tanto mecánico como termodinámico debemos maximizar la expresión 4.6 sujeta a las restricciones 4.2 y 4.3 (y suponiendo que la velocidad macroscópica debe ser nula y, por lo tanto, el valor de la función de distribución para velocidades de la misma magnitud debe ser el mismo). No realizaremos estos cálculos aquí pero vamos a escribir sus resultados, que son las expresiones de equilibrio para las funciones de distribución y las ecuaciones de estado:

$$n_\alpha = \frac{1}{1 + \exp\left\{\frac{(\epsilon_\alpha - \mu)}{kT}\right\}}, \quad (4.8)$$

$$\frac{\mu}{T} = k \ln \left(\frac{n_s}{1 - n_s} \right), \quad (4.9)$$

$$\frac{1}{T} = \frac{k}{\epsilon_a} \ln \left(\frac{n_s(1 - n_a)}{(1 - n_s)n_a} \right), \quad \alpha \neq 8, \quad (4.10)$$

$$\frac{p}{T} = -k \sum_{i=0}^{\infty} \ln(1 - n_i), \quad (4.11)$$

donde μ , T y p son, respectivamente, el potencial químico, la temperatura absoluta y la presión del gas. k , la constante de Boltzmann, es aquí considerada igual a la unidad.

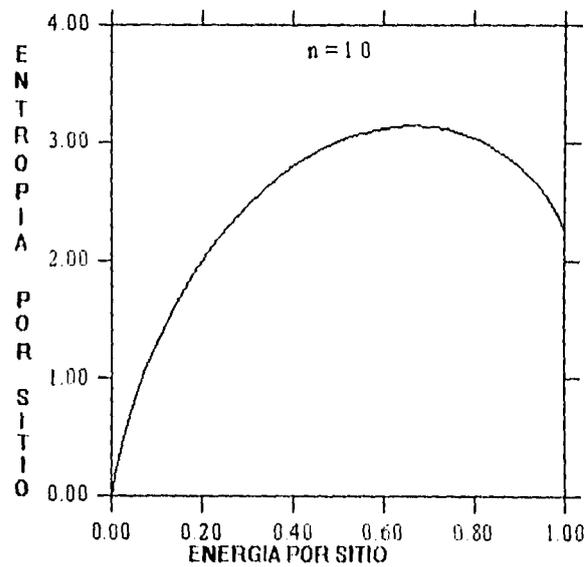


Figura 4.8 - Entropía promedio por sitio para $n=1$.

En condiciones fuera de equilibrio pueden utilizarse los mismos resultados suponiendo una perturbación alrededor de una situación de equilibrio local de manera que se satisfagan la condición de que la velocidad local sea la deseada.

En las figuras 4.8, 4.9 y 4.10 se muestran, respectivamente, las gráficas para la entropía por sitio, las funciones de distribución y la temperatura absoluta como funciones de la energía por sitio para el caso $n=1$. De gran interés son las gráficas 4.8 y 4.10 donde se muestra un comportamiento inusual de la entropía y de la temperatura absoluta. Como puede observarse en las figuras, la temperatura puede tomar valores no sólo positivos sino también *negativos* dado que la entropía decrece con la energía (para ciertos valores de la

energía) en lugar del típico comportamiento de crecimiento monótono con la energía que presenta la entropía en la enorme mayoría de los sistemas físicos. Estas propiedades "raras" pertenecen a todo el campo de los modelos de gases en redes y son una consecuencia de la naturaleza acotada de los espectros de energía de estos modelos y del principio de exclusión.

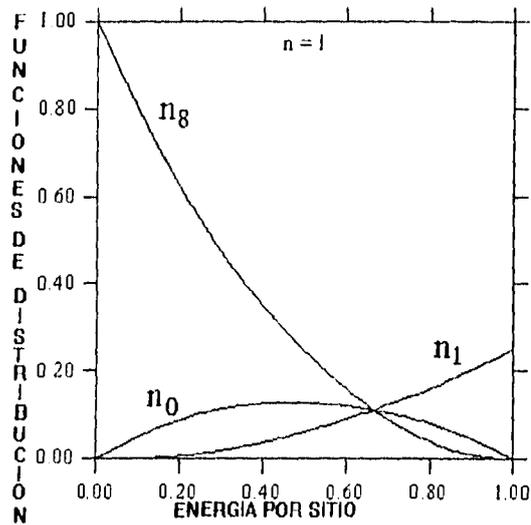


Figura 4.9.- Funciones de Distribución para $n=1$.

La presión, por su lado, también puede presentar valores positivos y negativos y presenta una discontinuidad infinita para $e = \left(\frac{2}{3}\right)n$. A pesar de este comportamiento atípico de la presión en el modelo, es importante destacar que a bajas densidades *el gas se comporta como cualquier otro gas; esto es, como un "gas ideal"*. Supongamos que tenemos un flujo del gas en condiciones de baja densidad. Como $n_a \ll 1$ podemos aproximar: $\ln(1 - n_a) \cong -n_a$ y la ecuación 4.11 se transforma en:

$$\frac{p}{T} = k \sum_{a=0}^s n_a \Rightarrow p = nkT$$

que es precisamente *la ecuación de estado del gas ideal*, lo cual sugiere que el gas modelo presentará un comportamiento termodinámico normal en el límite de bajas densidades y bajas energías.

Hay que aclarar que la temperatura dada por la expresión 4.11 está definida por la relación $\frac{1}{T} = \frac{\partial s}{\partial e}$ y *no* corresponde al promedio de la energía cinética por grado de libertad lo que, por otra parte, es evidente dado que puede tomar valores negativos. Por tanto, no se cumple el teorema de la equipartición de la energía.

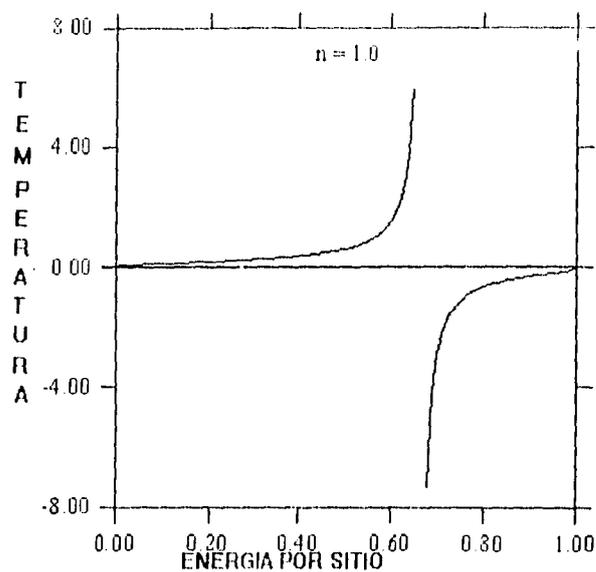


Figura 4.10.- Temperatura absoluta para $n=1$.

Es importante destacar que no hay en la actualidad una teoría termodinámica fuera de equilibrio para los modelos de gases en redes y no ha sido demostrado de manera rigurosa que las ecuaciones que gobiernan el comportamiento colectivo de los modelos de gases en redes se reduzcan (cuando menos en el caso límite de baja densidad) a las ecuaciones de Navier-Stokes. Como dijimos en el parágrafo 1.5, el mejor argumento en apoyo de estos modelos incluso para simular situaciones fuera de equilibrio es *la experimentación computacional*. El modelo ARIANNA ha demostrado ser capaz de reproducir fenómenos de flujo Newtoniano (bajo condiciones estacionarias y no estacionarias, así como laminares y turbulentas) para los cuales hay soluciones bien conocidas de tipo ya sea teórico o experimental, al menos en el límite de bajas densidades y bajas energías. (Es evidente que, al menos en condiciones en que puede tomar valores negativos, la temperatura del "gas modelo" no puede ser identificada directamente con la temperatura del sistema físico que se desea simular).

4.4.- EL MODELO ARIANNA. SIMULACIONES Y RESULTADOS.

Antes de describir algunas de las diversas pruebas a las que ha sido sometido el modelo ARIANNA hablemos un poco de la implementación de las condiciones iniciales en el modelo. Antes que nada son calculadas las funciones de distribución para una situación de equilibrio *local* mecánico y termodinámico mediante la resolución de las ecuaciones 4.8, 4.9, 4.10 y 4.11 (Evidentemente, los valores en cada sitio de la temperatura absoluta, de la presión y de la velocidad macroscópica son asignados por el usuario o calculados mediante algún otro algoritmo dependiendo del problema que se esté estudiando). Posteriormente se calculan las funciones de distribución fuera de equilibrio a partir de los valores de

equilibrio de estas funciones correspondientes a la misma presión y temperatura, utilizando un método de perturbaciones constraído por la velocidad local deseada.

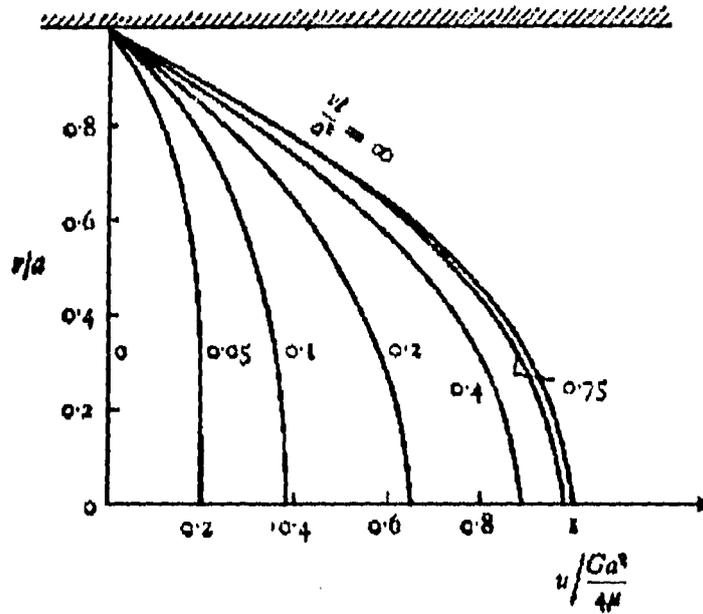


Figura 4.11.- Flujo de Poiseuille (solución analítica de las ecuaciones de Navier-Stokes). En el eje vertical se grafica el cociente de la distancia r al eje central del tubo entre la distancia a entre dicho eje y las paredes sólidas. En el eje horizontal se grafica $u/Ga^2/4\mu$, donde u es la velocidad correspondiente a la distancia r del eje central. G la diferencia de presiones en los extremos del tubo y μ el coeficiente de viscosidad del fluido. Cada curva corresponde a un valor diferente del cociente $\nu t/a^2$, donde t es el tiempo transcurrido y ν es el coeficiente de viscosidad cinemático.

El modelo ARIANNA ha sido sometido a pruebas de diversos tipos para su validación. Estas podrían ser agrupadas en dos conjuntos. Por una parte, las pruebas orientadas a mostrar que el modelo es capaz de reproducir situaciones de flujo (estacionarias y no estacionarias, laminares y turbulentas) que han sido bien estudiadas, sea mediante la solución analítica o numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes o sea mediante métodos experimentales. Por otro lado, las pruebas que intentan mostrar la utilidad práctica del modelo como herramienta en el diagnóstico de campos de viento en situaciones de importancia práctica (por ejemplo, dentro del estudio del transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera). Del primer tipo son las simulaciones de flujos planos de Poiseuille y Couette, tanto estacionarios como no-estacionarios.

así como la reconstrucción del perfil aproximadamente logarítmico que presenta la velocidad del viento en la capa superficial de la atmósfera a consecuencia de la turbulencia (Ver capítulo 2). Como pruebas del segundo tipo se consideró el problema de la reconstrucción del campo de vientos en la zona del Valle de México y sus alrededores. Los valores numéricos que se les asignan a las longitudes y tiempos naturales del modelo en términos de metros y segundos han sido elegidos, desde luego, en forma arbitraria con el fin de comparar los resultados del modelo con los sistemas físicos que se desea simular. A continuación una breve descripción de estas pruebas.

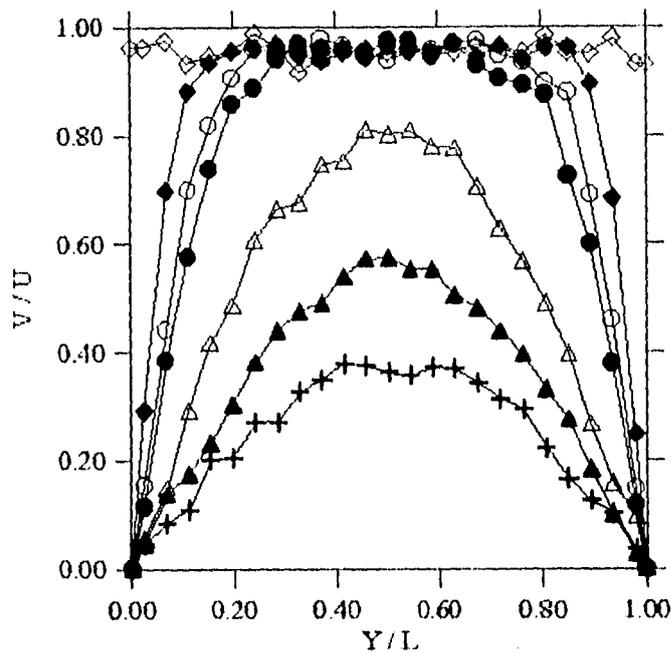


Figura 4.12.- Flujo de Poiseuille (simulación con el modelo ARIANNA). Se grafica $\frac{V}{U}$, donde Y es la altura y L la longitud del tubo bidimensional (la distancia entre las paredes), contra $\frac{Y}{L}$, donde V es la velocidad correspondiente a la altura Y mientras que U es la velocidad con que el fluido se mueve inicialmente.

FLUJO DE POISEUILLE. Hemos analizado brevemente este problema en el capítulo 3. Se trata de uno de los pocos problemas para los cuáles existen soluciones analíticas de las ecuaciones de Navier-Stokes, un flujo viscoso incompresible a través de un tubo plano que evoluciona desde el reposo debido a una diferencia de presiones entre los extremos del tubo. El flujo alcanza una condición estacionaria de manera que el perfil de la velocidad es parabólico y simétrico con respecto al eje del tubo (en realidad, durante todo el período transitorio no-estacionario esta es la forma del perfil de la velocidad). En la gráfica 4.11 se presentan perfiles de velocidad del flujo de Poiseuille a diferentes tiempos a partir del reposo al tiempo $t=0$.

(enque es introducida la diferencia de presiones). Estos perfiles fueron obtenidos *teóricamente* mediante la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes.

En la simulación con el modelo ARIANNA del flujo de Poiseuille, se consideró *una versión diferente del problema aquí planteado*, a saber: la relajación al equilibrio de un flujo (viscoso e incompresible) inicialmente uniforme moviéndose a lo largo de un tubo bidimensional recto con condiciones de frontera periódicas. No tenemos aquí una diferencia de presiones pero el perfil de velocidades debe ser igualmente parabólico dado que ello depende exclusivamente de la naturaleza newtoniana de los esfuerzos viscosos y de la simetría de las condiciones de frontera del sistema. Lo que debemos esperar aquí es lo siguiente: un flujo uniforme en el tiempo ($t=0$) que bruscamente se anula en los lados superior e inferior de la red (que representarán las paredes del tubo) debido a la adherencia del fluido en las paredes sólidas; gradualmente el perfil de velocidades se transformará en uno parabólico y simétrico con respecto al eje del tubo. Se llevó a cabo la simulación del problema inverso en vez del original debido a que, por un lado, su realización computacional resultaba considerablemente más simple y, por el otro, permitiría verificar un aspecto importante de los efectos disipativos de la viscosidad.

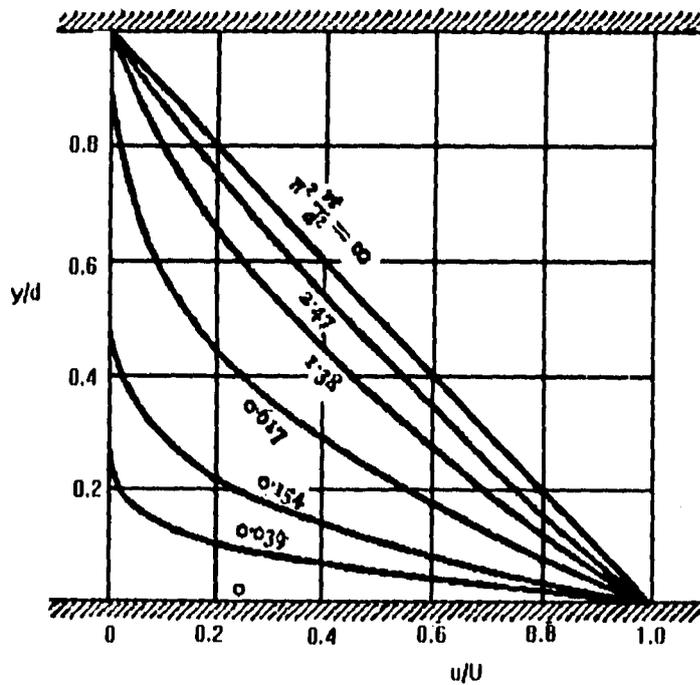


Figura 4.13.- Flujo de Couette (solución analítica de las ecuaciones de Navier-Stokes). Se grafica y/d (donde y es la altura mientras que d es la distancia entre las paredes) contra u/U (donde u es la velocidad correspondiente a la altura y mientras que U es la velocidad de la placa de arriba).

Características de la simulación: se utilizó una red de 207 x 207 sitios; se marcaron los lados superior e inferior de la red como fronteras sólidas estacionarias, mientras que en los lados izquierdo y derecho se fijaron condiciones de frontera periódicas; las funciones de distribución iniciales fueron calculadas suponiendo un flujo inicial uniforme de velocidad igual a 0.15, un número promedio de partículas por sitio igual a 2.5 y una temperatura igual a 10 (todo esto en las unidades naturales del modelo); para las mismas condiciones iniciales y de frontera se repitió la simulación 10 veces con una duración de 15000 pasos temporales cada una, registrándose los valores de las funciones de distribución sobre toda la red para los tiempos 0, 200, 600, 1000, 5000, 10000 y 15000; para los tiempos mencionados fueron calculados los promedios de las funciones de distribución sobre la muestra de simulaciones.

Resultados: El perfil de velocidades calculado mediante los promedios de las funciones de distribución sobre muestras de simulaciones aparece en la figura 4.12. Como se puede ver en la figura, la simulación reprodujo todas las características (cuando menos las cualitativas) del problema del flujo de Poiseuille tal como lo habíamos descrito más arriba.

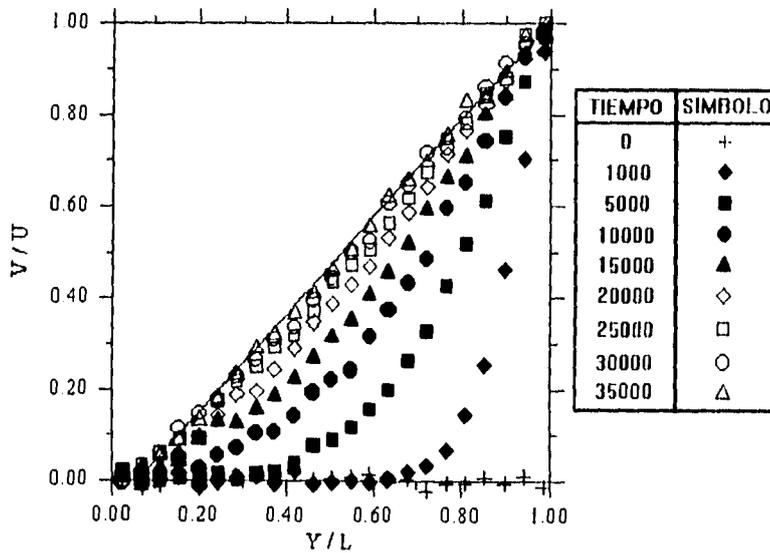


Figura 4.14.- Flujo de Couette (simulación con ARIANNA).

FLUJO DE COUETTE. También se habló en el capítulo 3 acerca del problema del flujo de Couette, para el que también existe solución analítica de las ecuaciones de Navier-Stokes. Tenemos aquí un flujo bidimensional laminar de un fluido viscoso incompresible entre dos placas paralelas, una de las cuales (digamos, la de abajo) se encuentra en reposo mientras que la otra se mueve con una velocidad constante U en dirección horizontal (digamos, hacia la derecha). El fluido está inicialmente en reposo y evoluciona hasta alcanzar una situación estacionaria en la cual el perfil de velocidades presenta una dependencia lineal en la

coordenada Y , con su valor mínimo en la placa en reposo y su valor máximo (igual a U) en la placa superior (En la figura 4.13 aparece graficada la solución analítica del perfil de velocidades en el flujo de Couette)

Características de la simulación – se utilizó una red de 207×207 sitios; las condiciones de frontera en los lados derecho e izquierdo se consideraron periódicas; el lado inferior ($Y = 0$), a diferencia del problema originalmente planteado, no se consideró perfectamente plano, sino que se incluyó una sucesión de pequeñas "torres obstáculo" con alturas elegidas al azar para simular una rugosidad superficial del 5% de la longitud de un lado de la red ($z_r \approx 10.35$); en el lado superior ($Y = 207$) se consideraron los primeros cinco renglones como sitios de control, imponiendo al gas una velocidad horizontal uniforme $U=0.3$ en esa frontera durante todo el tiempo de simulación; las funciones de distribución iniciales se calcularon suponiendo que todo el gas se encontraba en reposo con un número promedio de partículas por sitio de 2.5 y una temperatura igual a 10 (nuevamente expresadas todas las cantidades en las unidades naturales del modelo); para las mismas condiciones iniciales y de frontera se llevaron a cabo 10 simulaciones con un

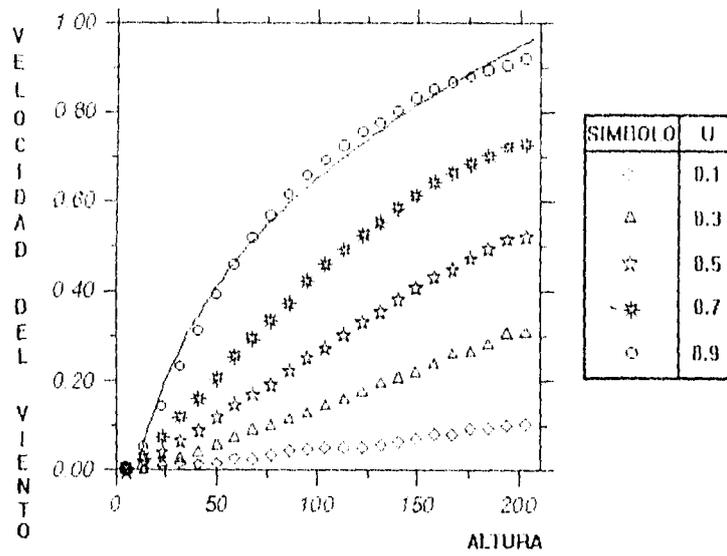


Figura 4.15 - Perfil Logarítmico de Velocidad del Viento.

duración de 35000 pasos temporales cada una de ellas, registrándose los valores de las funciones de distribución en toda la red para los tiempos 0, 1000, 5000, 10000, 20000, 25000, 30000 y 35000; se calcularon los promedios de las funciones de distribución sobre el ensamble de las 10 simulaciones y a partir de éstos se obtuvieron los perfiles transversales de la velocidad

Resultados En la figura 4.14 aparecen los perfiles de la velocidad obtenidos. Puede observarse que el sistema alcanza un estado estacionario, que el perfil de velocidades correspondiente al flujo estacionario es lineal y que la velocidad del viento se anula no en $Y=0$ sino muy cerca (para $\left(\frac{Y}{L}\right) = 0.058$) debido al efecto de la rugosidad superficial. Puede observarse además que la evolución del perfil de velocidades tiene el mismo comportamiento que el teórico (ilustrado en la figura 4.13).

PERFIL LOGARÍTMICO DE LA VELOCIDAD DEL VIENTO EN LA CAPA SUPERFICIAL ATMOSFÉRICA. Para probar la capacidad del modelo ARIANNA para simular el comportamiento turbulento que se presenta en la capa superficial atmosférica se eligió reproducir el perfil de velocidades logarítmico (o cuasi-logarítmico) en la capa superficial típica. Como se dijo en el capítulo 2, esta característica de la velocidad del viento en la capa superficial ha sido demostrada mediante métodos semi-empíricos, por otro lado, el perfil de la velocidad del viento es más aproximadamente logarítmico si las condiciones de estabilidad son aproximadamente neutras (es decir, si el gradiente de la temperatura es aproximadamente adiabático). El perfil de la velocidad del viento puede escribirse en general, de la siguiente manera:

$$u(z) = \frac{u_*}{k} \left[\text{Ln} \left(\frac{z}{z_0} \right) + \Phi_{M1} \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad (4.12)$$

donde u es la velocidad media del viento, u_* es la velocidad de fricción, k es la constante de von Karman, z es la altura sobre la superficie terrestre, z_0 es la longitud de rugosidad, L es la longitud de Monin-Obukhov, y Φ_{M1} es una función universal que toma en cuenta las correcciones al perfil logarítmico debidas a las condiciones de estabilidad atmosférica existentes.

Características de la simulación : Las simulaciones se efectuaron exactamente de la misma manera que en el caso del flujo de Conette, pero considerando diferentes valores para la velocidad horizontal constante U impuesta en los cinco renglones superiores. Los valores considerados fueron $U=0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$.

Resultados En la figura 4.15 aparecen los resultados de las simulaciones (perfiles de la velocidad para diversos valores de U y $t=35000$). Se puede observar en la figura que, a partir de $U=0.5$, el perfil de velocidades comienza a presentar desviaciones con respecto al comportamiento lineal (típico de la situación laminar) y que para $U=0.9$ se ha desarrollado un perfil de velocidad predominantemente logarítmico (típico de la situación turbulenta). Para propósitos de comparación fue dibujada una curva continua que corresponde a la ecuación 4.12, donde

$$\Phi_{M1} = -a(x - x_0) \text{Ln} \left[\frac{b(x-1)}{x+1} \right]$$

con $\left(\frac{u_*}{k}\right) = 0.299368$, $x_0 = 10.47$, $a = 0.200422$ y $b = 1.015957$.

DIAGNÓSTICO DEL CAMPO DE VIENTOS EN EL VALLE DE MÉXICO Y SUS ALREDEDORES. Como se expresó anteriormente, una de las principales ventajas que tienen los modelos de autómatas celulares frente a sus rivales en la simulación de fenómenos de dinámica de fluidos es la capacidad de tratar con gran facilidad con *condiciones de frontera complejas*. Precisamente esta característica sugiere su uso en la solución de problemas micrometeorológicos tales como el diagnóstico de campos de viento en una región

geográfica determinada. El problema del diagnóstico del campo de vientos puede ser planteado de la siguiente manera: *Considerese una red de monitoreo meteorológico establecida sobre una región geográfica de orografía compleja. Supóngase que la red consiste de N estaciones meteorológicas de superficie que registran, a intervalos regulares de tiempo, los valores de la presión atmosférica, la temperatura atmosférica y la velocidad del viento (en magnitud y en dirección). el problema es, entonces, estimar la velocidad del viento en los sitios "no-monitoreados" de la región de interés a una hora determinada, partiendo de la base de los datos experimentales obtenidos por las estaciones a esa misma hora, si hacemos la suposición de que el aire atmosférico se encuentra en una situación de flujo estacionario.*

Según el planteamiento clásico de la mecánica de fluidos, el problema arriba citado sería resuelto de la siguiente manera: se resolverían las ecuaciones de Navier-Stokes bajo las restricciones impuestas por la orografía compleja de la región estudiada, los valores de la velocidad del viento en las fronteras del dominio de cálculo y las condiciones temporales asintóticas definidas por los valores de la velocidad del viento medidos experimentalmente en las estaciones meteorológicas. Sin embargo, este no es el método utilizado realmente en la práctica. Generalmente se utilizan métodos matemáticos de muy pobre base física (en ocasiones, en ninguna). De estos modelos de diagnóstico de campos de viento ya se ha hablado brevemente en el capítulo 1. Un ejemplo muy sencillo es el modelo BMAG-2 (Ver parágrafo 1.4, capítulo 1). Ejemplos más sofisticados son ciertos algoritmos de interpolación y extrapolación que generan un primer campo de vientos que es, a continuación, sometido a un proceso de ajuste minimal, con la condición de incompresibilidad como restricción, para obtener un campo de vientos consistente con la conservación de la masa. Como ejemplo concreto de este tipo de modelos podría darse el modelo MATHFW desarrollado en el Lawrence Livermore National Laboratory de la Universidad de California [1].

El modelo ARIANNA ha sido utilizado en un intento de resolver problemas de diagnóstico de campos de viento en regiones de orografía compleja. En concreto ha sido utilizado para reconstruir la componente horizontal (a una altura de 2400 metros sobre el nivel del mar) de un campo de vientos *estacionario* correspondiente a la zona del valle de México y sus alrededores para los días 31 de julio y 26 de agosto de 1994 a las 9:00, 15:00 y 21:00 hrs.

Hay que hacer diversas aclaraciones acerca de la realización de esta simulación. Los datos topográficos introducidos en el modelo fueron obtenidos a partir de los modelos digitales de elevación distribuidos por la Dirección General de Geografía del INEGI. Esta institución proporciona los datos de elevación del terreno de una zona dada en archivos binarios correspondientes a un grado de latitud por un grado de longitud con una resolución espacial de tres segundos de arco. De estos datos se extraen las coordenadas horizontales de los obstáculos sólidos de la región considerada cuyas elevaciones son *mayores o iguales* a la altura por la que se está interesado (en este caso, 2400 metros SNM). Son las coordenadas de estos sitios las que, escaladas a las dimensiones de la red del gas modelo, definen en donde se encuentran las fronteras sólidas introducidas en la simulación. En la figura 4.18 aparece la ubicación de dichas fronteras sólidas dentro de una red de 594×468 sitios que representa una región bidimensional de 100 Km x 100 Km aproximadamente. Como estaciones meteorológicas se utilizaron las cuatro estaciones micrometeorológicas que el I.I.E. tiene instaladas en la ciudad de México (y que se encuentran en la ENEP-Iztacala, en el Vaso de Texcoco, en el Centro de Ciencias de la Atmósfera de la UNAM y en la UAM-Iztapalapa). Las ubicaciones de estas estaciones dentro de la red se presentan en la figura 4.16. Para las horas y fechas anotadas arriba, se registran los datos de presión, temperatura y velocidad del viento en dichas estaciones. En los sitios de la red que no representan ni estaciones meteorológicas ni fronteras de la red se calculan funciones de distribución correspondientes a una situación de equilibrio local (mecánico y térmico) utilizando valores promedio de la presión y la temperatura en la zona. Estas son las condiciones iniciales en dichos sitios. En los sitios que representan estaciones meteorológicas se instalan *sitios de control* donde los valores de las propiedades macroscópicas (presión, temperatura, velocidad del viento)

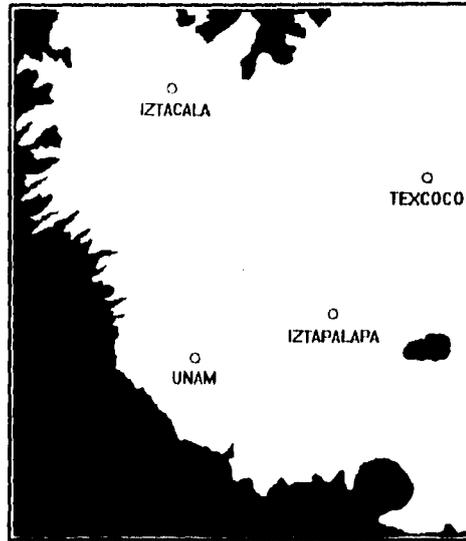


Figura 4.16.- Posiciones geográficas de las estaciones de control utilizadas para simular el campo de vientos en el valle de México.



Figura 4.17.- Posiciones geográficas de las estaciones de referencia utilizadas para comparar las velocidades del viento estimadas por ARIANNA.

permanecerán idénticos a lo largo de toda la simulación (iguales, desde luego, a los valores obtenidos experimentalmente en dichas estaciones). También en las fronteras no-sólidas de la red se necesitan instalaciones de control. Aquí, los valores de las funciones de distribución se determinan mediante datos históricos de presión, temperatura y velocidad del viento registrados en estaciones cercanas (si es que las hay); en caso de que no haya tales estaciones se utilizan los valores promedio de los datos disponibles en las estaciones de la red meteorológica de control. Una vez preparado bajo las condiciones iniciales ya descritas, se deja evolucionar al gas (sobre el cual actúan las acciones constructivas producidas tanto por las fronteras sólidas como por las condiciones impuestas en los sitios de control) hasta que se alcance un estado aproximadamente estacionario. *El resultado de la simulación será, en principio, un flujo estacionario limitado por las condiciones de frontera prescritas y que se ajusta a los valores del monitoreo meteorológico por que fue forzado a hacerlo.*

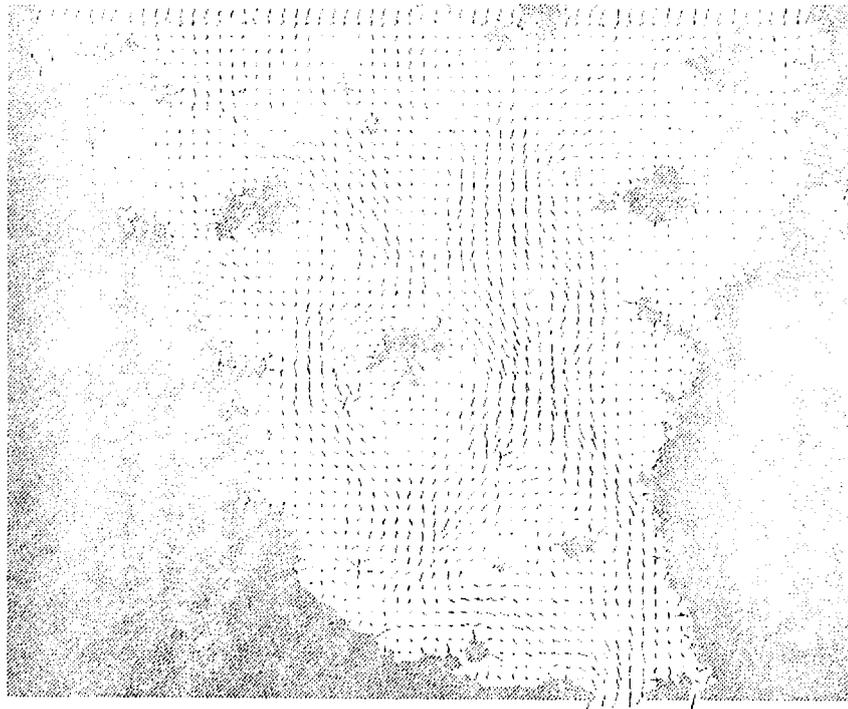


Figura 4.18.- Simulación del Campo de Viento en el valle de México y sus alrededores (Altura 2500 metros sobre el nivel del mar. Día: 26 de Agosto de 1994 a las 9:00 hrs).

La evolución del gas modelo a una situación de flujo estacionario requirió 5000 pasos temporales y una promediación de los resultados sobre cinco simulaciones en cada caso. El campo de velocidades obtenido (en cuanto a su dirección) para el día 26 de Agosto de 1994 a las 9:00 hrs. se muestra en la figura 4.18. Estos resultados se muestran físicamente razonables en términos cualitativos, mostrando claramente los efectos de la topografía modificando la dirección del viento y generando zonas de recirculación.

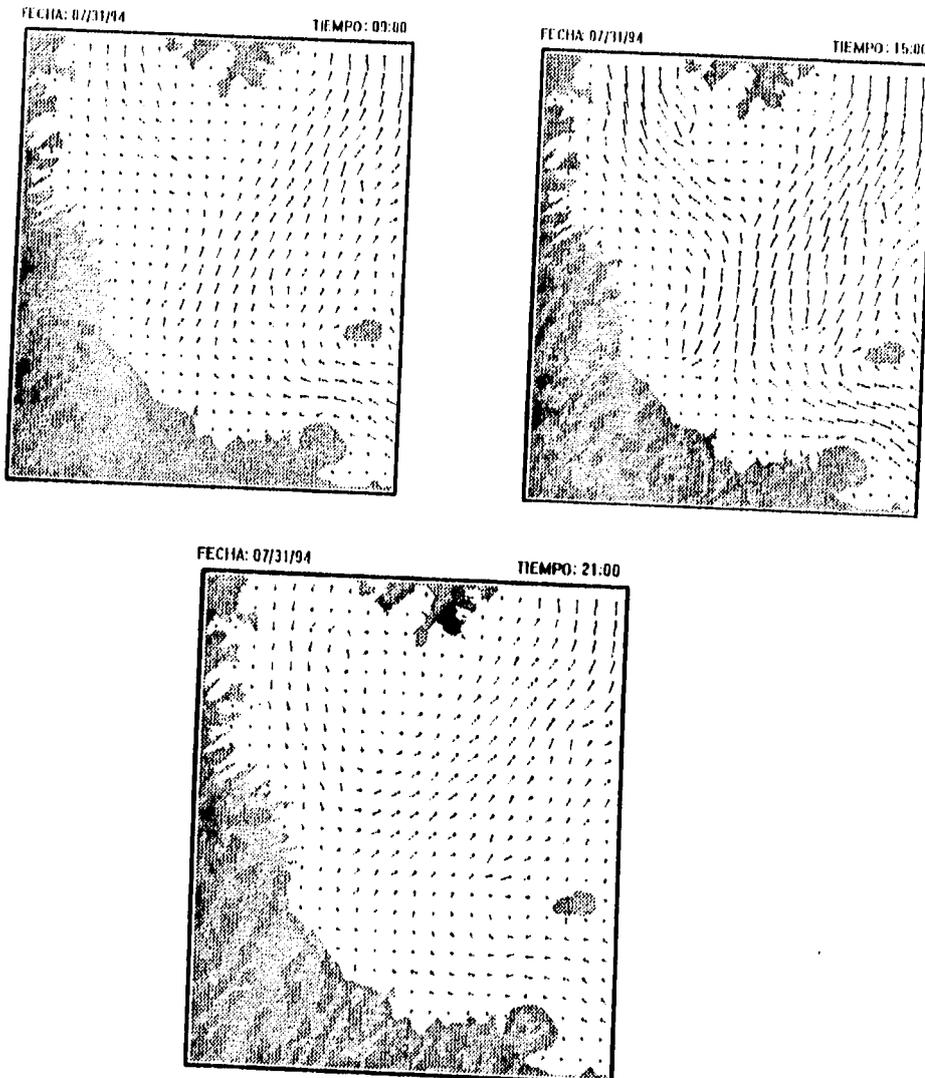


Figura 4.19.- Campo de vientos estimado por ARIANNA para el valle de México (31 de julio de 1994 a las 9:00, 15:00 y 21:00 hrs respectivamente: altura=2400 snm).

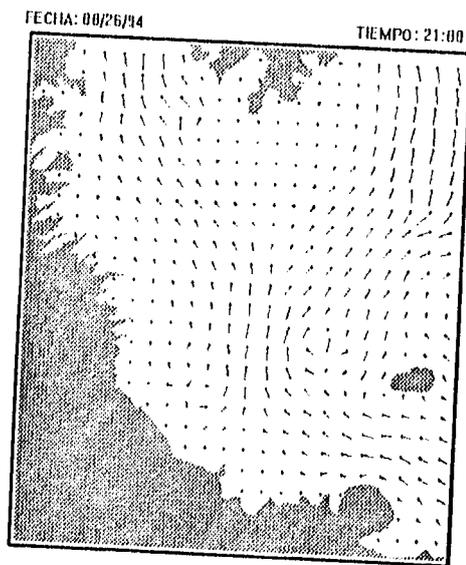
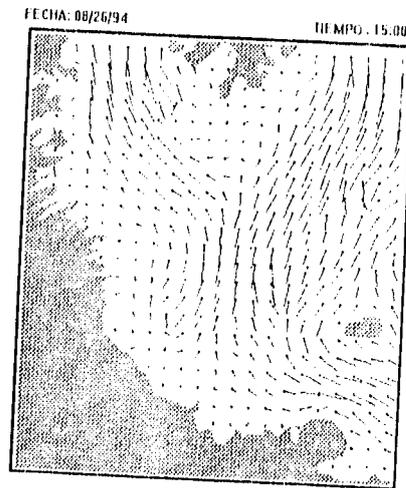
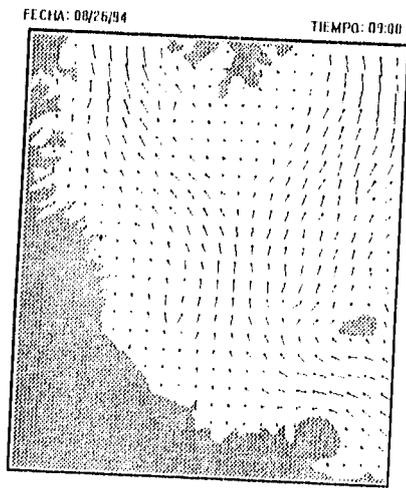


Figura 4.20.- Campo de vientos estimado por ARIANNA para el valle de México (26 de agosto de 1994 a las 9:00, 15:00 y 21:00 hrs respectivamente; altura=2400 snm).

Station	Experimental Data		Data Estimated by ARIANNA	
	vel (m/s)	dir (N)	vel (m/s)	dir (N)
IZTACALA	1.00	353	0.95	355
TEXCOCO	1.92	351	1.97	350
UNAM	0.97	5	1.00	3
IZTAPALAPA	0.71	4	0.78	9
TLANEPANTLA	1.55	313
Sn AGUSTIN	1.70	339	2.88	30
ACATLAN	1.21	300	0.88	305
TACUBA	0.38	297
HANGARES	1.70	324	2.53	24
C ESTRELLA	1.21	2	1.08	338
PLATEROS	1.16	352	0.97	21

Station	Experimental Data		Data Estimated by ARIANNA	
	vel (m/s)	dir (N)	vel (m/s)	dir (N)
IZTACALA	2.11	2	2.13	1
TEXCOCO	2.73	14	2.79	13
UNAM	1.64	1	1.75	2
IZTAPALAPA	1.63	53	1.68	52
TLANEPANTLA	2.59	17	2.90	323
Sn AGUSTIN	2.50	16	2.67	18
ACATLAN	2.19	41	2.03	334
TACUBA	2.41	359	1.70	398
HANGARES	2.82	36	1.82	21
C ESTRELLA	1.81	345
PLATEROS	1.56	329	1.35	351

Station	Experimental Data		Data Estimated by ARIANNA	
	vel (m/s)	dir (N)	vel (m/s)	dir (N)
IZTACALA	2.50	354	2.51	354
TEXCOCO	2.51	339	2.55	340
UNAM	1.33	8	1.34	8
IZTAPALAPA	2.23	47	2.30	47
TLANEPANTLA	4.13	318
Sn AGUSTIN	2.50	347	4.40	25
ACATLAN	3.53	32	2.19	334
TACUBA	2.16	326
HANGARES	4.10	15	3.30	14
C ESTRELLA	2.28	26	1.79	348
PLATEROS	2.37	352	1.24	31

Station	Experimental Data		Data Estimated by ARIANNA	
	vel (m/s)	dir (N)	vel (m/s)	dir (N)
IZTACALA	3.92	0	3.85	0
TEXCOCO	5.12	351	5.19	351
UNAM	2.03	351	2.01	353
IZTAPALAPA	4.29	6	4.41	6
TLANEPANTLA	4.87	30	5.11	324
Sn AGUSTIN	4.91	343	6.14	24
ACATLAN	3.84	72	2.67	340
TACUBA	3.62	343	2.69	311
HANGARES	6.09	9	4.68	22
C ESTRELLA	3.18	347
PLATEROS	2.37	353	2.20	12

Station	Experimental Data		Data Estimated by ARIANNA	
	vel (m/s)	dir (N)	vel (m/s)	dir (N)
IZTACALA	1.24	356	1.30	356
TEXCOCO	1.35	355	1.36	355
UNAM	0.45	25	0.49	24
IZTAPALAPA	1.79	71	1.83	70
TLANEPANTLA	1.05	192
Sn AGUSTIN	2.55	6	2.34	33
ACATLAN	3.40	200	1.52	170
TACUBA	1.23	153
HANGARES	2.41	216	2.00	40
C ESTRELLA	1.88	341	0.43	9
PLATEROS	2.41	311	1.00	45

Station	Experimental Data		Data Estimated by ARIANNA	
	vel (m/s)	dir (N)	vel (m/s)	dir (N)
IZTACALA	1.92	9	1.97	7
TEXCOCO	3.83	54	3.92	53
UNAM	1.19	208	1.23	207
IZTAPALAPA	1.89	193	1.95	193
TLANEPANTLA	2.91	20	2.02	320
Sn AGUSTIN	3.17	25	2.50	12
ACATLAN	2.95	49	1.27	324
TACUBA	2.91	321	1.07	315
HANGARES	3.13	44	1.36	35
C ESTRELLA	0.89	314
PLATEROS	1.52	243	0.46	25

Tabla 4.22 - Comparación entre las velocidades del viento medidas empíricamente y las estimadas por el modelo ARIANNA (las del lado izquierdo corresponden al día 31 de julio de 1994 a las 9:00, 15:00 y 21:00 hrs, mientras que las del lado derecho corresponden al día 26 de agosto de 1994 a las mismas horas).

En las figuras 4.19 y 4.20 se presentan las gráficas de la simulación en la región de especial interés que rodea a la ciudad de México para los días 31 de Julio y 26 de Agosto a las 9:00, 15:00 y 21:00 horas.

Para evaluar cuantitativamente los datos obtenidos de la simulación, se utilizaron datos obtenidos por una serie de estaciones meteorológicas de la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA) del Departamento del Distrito Federal (DDF). La ubicación de dichas estaciones se presenta en la figura 4.17.

La evolución del gas modelo a una situación de flujo estacionario requirió 5000 pasos temporales y una promediación de los resultados sobre cinco simulaciones en cada caso. El campo de velocidades obtenido (en cuanto a su dirección) para el día 26 de Agosto de 1994 a las 9:00 hrs. se muestra en la figura 4.18. Estos resultados se muestran físicamente razonables en términos cualitativos, mostrando claramente los efectos de la topografía modificando la dirección del viento y generando zonas de recirculación.

En las figuras 4.19 y 4.20 se presentan las gráficas de la simulación en la región de especial interés que rodea a la ciudad de México para los días 31 de Julio y 26 de Agosto a las 9:00, 15:00 y 21:00 horas.

Para evaluar cuantitativamente los datos obtenidos de la simulación, se utilizaron datos obtenidos por una serie de estaciones meteorológicas de la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA) del Departamento del Distrito Federal (DDF). La ubicación de dichas estaciones se presenta en la figura 4.17.

El análisis comparativo de los datos estimados por el modelo ARIANNA y los obtenidos experimentalmente por la RAMA se presenta en las tablas 4.21. La dirección de la velocidad del viento está expresada por el ángulo entre la dirección de proveniencia del viento con la dirección Norte. La comparación muestra un acuerdo razonable (al menos en el nivel cualitativo) entre ambos conjuntos de datos. Generalmente, las peores estimaciones en la velocidad del viento han ocurrido cerca de las fronteras sólidas, y pensamos que esto es debido a las condiciones de frontera que se han impuesto allí (las partículas que llegan a las fronteras sólidas simplemente invierten su dirección de movimiento). Se está actualmente explorando los efectos de otras posibilidades para las condiciones de frontera.

Para finalizar la descripción de las posibilidades del modelo ARIANNA, habría que decir que una ligera modificación de éste permite simular fenómenos de transporte y dispersión de contaminantes al menos desde el punto de vista *cualitativo*. Para realizar esto se utilizan dos especies de partículas las cuales se representan mediante *dos* campos booleanos correspondientes a cada dirección válida de movimiento de las partículas: uno de estos campos booleanos dirá si hay una partícula moviéndose en esa dirección y el segundo campo nos dirá a qué especie pertenece dicha partícula. Es necesario además añadir un cuarto operador (llamémosle F) a los operadores T, C y B descritos en el parágrafo 4.3. Este operador simulará efectos debidos a la gravedad y operará de la manera siguiente: para cada sitio de la red se calculará la diferencia, $\delta n = (n_0 - n_1)$, de las densidades de masa de las especies 0 (aire) y 1 (contaminante); si $\delta n > 0$ la componente vertical del momento en el sitio será incrementada por 1 con una probabilidad proporcional al valor absoluto de δn ; si, por el contrario, δn es negativa dicha componente será disminuida en la misma medida. Esta regla conduce a un comportamiento colectivo de las partículas que simula efectos de boyancia (al menos, cualitativamente). La figura 4.22 muestra una simulación de ascensión de una pluma contaminante mediante una red de 300 x 300 sitios. Las condiciones iniciales fueron prescritas asumiendo condiciones de estabilidad neutras (con una temperatura superficial igual a 295 K) y un perfil de velocidades dado por la fórmula:

$$v = v_0 \left(\frac{z}{z_0} \right)^{1/7}$$

donde $v_0 = 1.0 \text{ m/s}$ y $z_0 = 10 \text{ m}$. El paso temporal del autómata es equivalente a 0.5 segundos y la distancia entre dos sitios de la red es equivalente a 4.0 metros. Se permite evolucionar al sistema durante 500 pasos anteriores al comienzo de las emisiones. La altura de la chimenea es de 100.0 m, la velocidad de salida es de 7.0 m/s y la temperatura de salida de unos 423 K. La masa molar del contaminante fue 28. Se estableció un viento estacionario en el tope y el lado izquierdo de la red y los obstáculos sólidos fueron introducidos en el fondo simulando un terreno citadino.

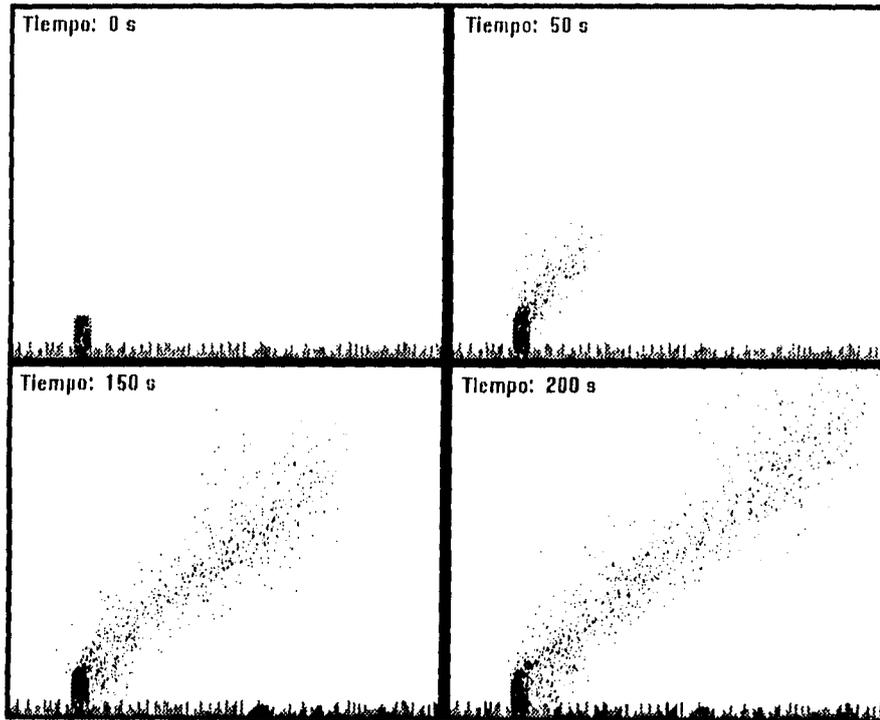


Figura 4.22.- Simulaciones de ascención y dispersión de una pluma contaminante.

CAPITULO 5.
ANÁLISIS DE LOS MODELOS DE LATTICE BOLTZMANN PARA LA SIMULACIÓN DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS.

5.1. ESBOZO DEL MODELO.

En este capítulo, analizaremos el modelo Lattice Boltzmann presentado por R.D. Kingdon, P.Schofield y L. White en el artículo "A Lattice Boltzmann model for the simulation of fluid flow" ([7], 1992) y presentaremos una serie de pruebas del modelo ante situaciones de flujo conocidas.

Para modelar el movimiento de un fluido en un espacio bidimensional, consideraremos una red de polígonos idénticos que cubren todo el plano (exactamente como en el caso del modelo Lattice Gas) y asociaremos al centro de cada polígono un determinado número de "partículas" (es decir un número real y no, como en el modelo Lattice Gas, una "variable booleana"). Estas partículas tienen una cierta velocidad que está restringida a un conjunto discreto y finito de valores posibles. Estas únicas velocidades posibles que denotaremos por c_i ($i = 0, \dots, N$) son, esencialmente, aquellas que necesita la partícula para trasladarse al centro de alguno de los polígonos vecinos en el siguiente paso de tiempo.

Vamos a suponer que todas las velocidades c_i ($i = 1, \dots, N$) de nuestra red de polígonos idénticos tienen exactamente la misma magnitud L (que necesitan las partículas en un sitio para trasladarse a alguno de sus "primeros vecinos" en el siguiente paso de tiempo). Como la red está formada por polígonos regulares, es natural suponer que las orientaciones de las c_i están igualmente espaciadas. En pocas palabras, podemos escribir los valores permisibles de las velocidades microscópicas de la siguiente manera:

$$c_i = L \cos\left[\frac{i2\pi}{N}\right] \hat{x} + L \sin\left[\frac{i2\pi}{N}\right] \hat{y}, \quad i = 1, \dots, N \quad 5.1$$

De lo dicho se desprende que el estado del fluido en un determinado "sitio" \vec{r} y en un determinado instante de tiempo t está completamente especificado por una función de distribución de velocidades $f_i(\vec{r}, t)$ que indique el número de partículas que se mueven con cada una de las velocidades permitidas c_i .

Está claro que si Δ es el área de cada uno de los polígonos, podemos definir la densidad de partículas en un "sitio" como la cantidad $\rho(\vec{r}, t)$ tal que:

$$\rho(\vec{r}, t)\Delta = \sum_{i=0}^N f_i(\vec{r}, t) \quad 5.2$$

Desde luego si consideramos que la masa de cada una de las partículas es $m=1$ (Hasta ahora estamos pensando en partículas idénticas), $\rho(\vec{r}, t)$ será a la vez la densidad de masa como función de la posición y del tiempo.

Del mismo modo podemos definir la velocidad macroscópica (o velocidad hidrodinámica) $\vec{u}(\vec{r}, t)$ y la energía media por partícula $E(\vec{r}, t)$ como las cantidades que cumplen lo siguiente:

$$\rho(\vec{r}, t)\vec{u}(\vec{r}, t)\Delta = \sum_{i=0}^N \vec{c}_i f_i(\vec{r}, t) \quad 5.3$$

$$\rho(\vec{r}, t)E(\vec{r}, t)\Delta = \sum_{i=0}^N \frac{c_i^2}{2} f_i(\vec{r}, t) \quad 5.4$$

[Evidentemente, para poder escribir la expresión 5.4 tenemos que despreciar cualquier tipo de energía potencial de interacción entre las partículas y considerar de hecho al sistema como una especie de "gas ideal". Sin embargo, si queremos añadir al modelo efectos debidos a algún campo externo, como el gravitacional, podríamos agregar otros términos a la expresión 5.4.]

Si en vez del número de partículas con velocidad c_i , consideramos a $f_i(\vec{r}, t)$ como la densidad de partículas con tal velocidad dentro del polígono correspondiente, podremos prescindir del área Δ en las ecuaciones 5.3 y 5.4.

El modelo, muy simple en principio, consiste sencillamente en esto: en cada paso de tiempo todas las partículas se trasladarán al sitio vecino indicado por sus correspondientes velocidades y, una vez allí, "interactuarán" de alguna manera con las demás partículas ubicadas en el mismo sitio, conservándose durante la interacción tanto el número de partículas como el momento y la energía (Aunque en el modelo más simple, el del artículo de R.D. Kingdon et al, la energía de hecho *no se conserva*). Esperamos además "forzar" al sistema para que en estas "interacciones entre partículas" se satisfagan las ecuaciones macroscópicas de la mecánica de los fluidos.

5.2 LA FORMA GEOMÉTRICA DEL MODELO.

En principio la velocidad macroscópica puede tener una dirección arbitraria y, dado que ésta representa un promedio de las velocidades de las partículas ubicadas en el sitio en cuestión, es conveniente que las velocidades c_i (que son las mismas en todas partes y en todo tiempo) no privilegien alguna dirección en particular.

Consideremos una función de distribución de velocidades (consideremosla momentaneamente como continua) $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ que sea simétrica con respecto al valor medio de la distribución (es decir, que tenga el mismo valor para $\vec{v} = \vec{u} - \vec{U}$, donde \vec{u} es la velocidad macroscópica, que para $\vec{v}' = \vec{u} + \vec{U}$). Supongamos que la función de distribución tiene propiedades de simetría más fuertes aún: que tiene tanto simetría de espejo (con respecto a los planos en el espacio de velocidades que pasan a través de la velocidad media) como simetría de rotación alrededor de tal valor medio. Estas propiedades limitan los valores posibles de los momentos de la distribución.

Si se trata de un espacio bidimensional los momentos de la distribución son de la forma:

$$\int (v_1 - u_1)^m (v_2 - u_2)^n f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^2 \vec{v}.$$

Debido a las simetrías a las que aludimos arriba, en el caso en que uno de los exponentes m y n (o ambos) sea impar el momento correspondiente será necesariamente nulo. Además el momento en que los exponentes sean n y m valdrá lo mismo que el momento en donde los exponentes sean m y n .

En el caso de la función de distribución maxwelliana (ecuación 3.21) los momentos tienen la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \overline{U_1} &= 0; & \overline{U_1 U_k} &= \frac{p}{\rho} \delta_{1k}; & \overline{U_1 U_k U_m} &= 0; \\ \overline{U_1 U_k U_m U_p} &= \frac{p^2}{\rho^2} \left[\delta_{1k} \delta_{mp} + \delta_{1m} \delta_{kp} + \delta_{1p} \delta_{km} \right]; \end{aligned} \quad 5.5$$

Supongamos que en algún punto \vec{r} de nuestra red discreta el número de partículas con cada una de las velocidades, $f_i(\vec{r}, t)$, es el mismo para todas ellas. Si los polígonos que constituyen la red son polígonos regulares, la velocidad hidrodinámica es nula y los momentos de la distribución son proporcionales a $\sum_{i=1}^N (c_i^{(1)})^m (c_i^{(2)})^n$ [Desde luego, en estas expresiones y en las que siguen $c_i^{(1)}$ y $c_i^{(2)}$ denotan las coordenadas horizontal y vertical respectivamente del vector \vec{c}_i]

Para que el comportamiento del fluido sea isotrópico en las condiciones de igual número de partículas en todas las direcciones permitidas se necesita que los momentos (cuando menos, los momentos de orden 1, 2, 3 y 4) estén dados por una expresión de la forma 5.5. [Es claro que la situación de igual número de partículas en todas las direcciones debería corresponder en nuestro modelo a un estado de equilibrio local de velocidad media nula y, por lo tanto, la función de distribución discreta debe tener propiedades de simetría semejantes a las de la maxwelliana]. Necesitamos entonces que:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N c_i^\alpha &= 0; \\ \sum_{i=1}^N c_i^\alpha c_i^\beta &= M \delta_{\alpha\beta}; \\ \sum_{i=1}^N c_i^\alpha c_i^\beta c_i^\gamma &= 0; \\ \sum_{i=1}^N c_i^\alpha c_i^\beta c_i^\gamma c_i^\delta &= R [\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}], \end{aligned} \quad 5.6a-d$$

[donde M y R son constantes numéricas]

Se puede ver fácilmente que si $N=3$ se cumplen 5.6a y 5.6b pero no 5.6c ni 5.6d. Si $N=4$ [es decir, si la red es una red cuadrada], se cumplen 5.6a-c pero no así 5.6d. Si $N=5$ o $N=6$ se cumplen todas las propiedades 5.6a-d.

Dado que no puede cubrirse el plano con pentágonos idénticos, el modelo más simple que podemos utilizar con propiedades "razonables" de isotropía es una red hexágona con seis velocidades "moleculares" permitidas:

$$C_i = L \cos\left[\frac{i\pi}{3}\right] \hat{x} + L \sin\left[\frac{i\pi}{3}\right] \hat{y}, \quad i = 1, \dots, 6 \quad 5.7$$

Adoptaremos entonces para el modelo una red hexágona pero añadiendo una séptima velocidad que represente a las partículas en reposo, $c_0 = 0$ [cuya introducción evidentemente no altera la isotropía del modelo]. Una ilustración de la red hexágona y de las velocidades permitidas para las partículas aparece en la figura 5.1.

En el párrafo anterior se habló de que en cada paso de tiempo el modelo realiza dos operaciones sobre los elementos de la red: se deja fluir libremente a las partículas y, luego, éstas interaccionan entre sí dentro de cada polígono. Esta "interacción" consiste en una recombinação de las velocidades de las partículas que modifica la función $f_i(\vec{r}, t)$ en cada sitio de modo que se cumplan ciertas propiedades físicas. La forma de la nueva función de distribución será deducida en el párrafo 5.3 y, como se verá entonces, no dependerá en cuanto a la forma geométrica de la red más que de las propiedades de simetría 5.6a-d. Es gracias a que se

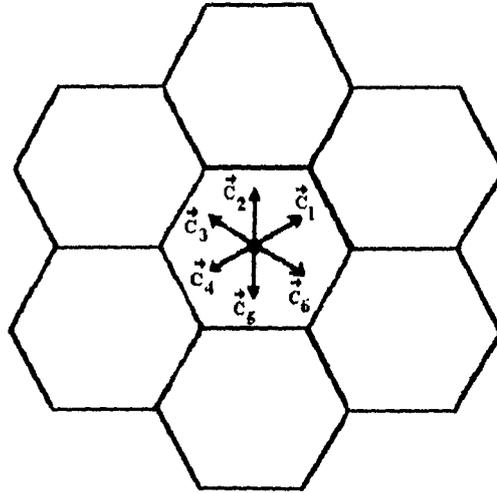


Figura 5.1.- Una de las celdas de la red hexagonal y su inmediata vecindad. En la ilustración aparecen todas las velocidades permitidas a las "moléculas" del "gas". En el centro del hexágono puede haber además una partícula en reposo (correspondiente a la velocidad $\vec{c}_0 = 0$).

cumplen estas ecuaciones que puede "forzarse" al tensor de esfuerzos correspondiente a una situación de equilibrio local (producida por colisiones) a satisfacer las propiedades de isotropía e invariancia galileana asegurando que el comportamiento "macroscópico" del "fluido discreto" sea una buena aproximación del movimiento de un fluido bidimensional descrito por las ecuaciones de Euler.

5.3. DESARROLLO TEÓRICO DEL MODELO.

En el párrafo 5.1 se definieron diversas funciones de la posición en la red y del tiempo (ambos variables discretas) tales como $\rho(\vec{r}, t)$, $\vec{u}(\vec{r}, t)$ y $E(\vec{r}, t)$.

Desde luego podemos pensar en todas ellas como funciones de variables continuas (la posición en el "espacio bidimensional continuo" y el "tiempo continuo"), pero evaluadas en puntos discretos especiales y en una sucesión de instantes de tiempo igualmente discreta. Tal interpretación nos permite hablar del gradiente y la derivada temporal de tales funciones.

Una aproximación razonable a la derivada temporal de una cierta función $\phi(\vec{r}, t)$ sería su incremento en

un paso de tiempo ya que estamos suponiendo pasos de tiempo unitarios. Así,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(\vec{r}, t) \cong \phi(\vec{r}, t+1) - \phi(\vec{r}, t) \quad 5.8$$

o, con la misma validez, $\frac{\partial \phi}{\partial t}(\vec{r}, t) \cong \phi(\vec{r}, t) - \phi(\vec{r}, t-1)$.

Una aproximación plausible de las derivadas espaciales podría ser obtenida con las siguientes relaciones:

$$c_i^\alpha \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha}(\vec{r}, t) \cong \phi(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - \phi(\vec{r}, t) \quad 5.9$$

(para todas las velocidades moléculares \vec{c}_i).

[Aquí el subíndice α señala la coordenada de que se trata y, siguiendo la notación de Einstein, su doble aparición en un mismo término indica la suma sobre todos los valores que puede tomar α].

Ahora bien, las relaciones 5.9 tienen el inconveniente de que no nos dan directamente las parciales $\frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha}(\vec{r}, t)$ además de que no son compatibles entre sí. Por esto conviene utilizar 5.9 para "deducir" lo siguiente:

$$\sum_{i=1}^6 c_i^\alpha c_i^\beta \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \cong \sum_{i=1}^6 c_i^\beta [\phi(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - \phi(\vec{r}, t)]$$

lo que nos conduce a:

$$\begin{aligned} 3 \frac{\partial \phi}{\partial x_\beta} &= \frac{6}{2} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \sum_{i=1}^6 c_i^\alpha c_i^\beta \cong \sum_{i=1}^6 c_i^\beta [\phi(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - \phi(\vec{r}, t)] \\ \Rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial x_\beta} &= \frac{1}{3} \sum_{i=1}^6 c_i^\beta [\phi(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - \phi(\vec{r}, t)] \end{aligned} \quad 5.10$$

la cuál es una expresión que ya no depende de alguna dirección particular elegida para su evaluación.

De lo dicho en el párrafo 5.1 está claro que las partículas en un "sitio" \vec{r} , al tiempo $t+1$ y con una velocidad \vec{c}_i son las mismas que estaban en el "sitio" $\vec{r} - \vec{c}_i$ al tiempo t con la misma velocidad excepto por una "modificación" debida a la interacción entre las partículas ubicadas en el mismo sitio. Si llamamos Δ_i a esta "modificación" podemos escribir la siguiente ecuación:

$$f_i(\vec{r}, t+1) = f_i(\vec{r} - \vec{c}_i, t) + \Delta_i \quad 5.11$$

De hecho, ésta es (en nuestro modelo) la ecuación análoga a la Ecuación de transporte de Boltzmann.

Dado que es necesario que se conserven el número de partículas, el momento total y la energía total durante las colisiones, evidentemente deben ser válidas todas las ecuaciones siguientes:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^6 f_i(\bar{r}, t+1) &= \sum_{i=0}^6 f_i(\bar{r} - \bar{c}_i, t) \\
\sum_{i=1}^6 c_i^a f_i(\bar{r}, t+1) &= \sum_{i=1}^6 c_i^a f_i(\bar{r} - \bar{c}_i, t) \\
\sum_{i=1}^6 \frac{c_i^2}{2} f_i(\bar{r}, t+1) &= \sum_{i=1}^6 \frac{c_i^2}{2} f_i(\bar{r} - \bar{c}_i, t)
\end{aligned}
\tag{5.12}$$

Estas ecuaciones (que deben cumplirse en nuestra modelación de las "colisiones moleculares") son aproximaciones a las ecuaciones generales de la mecánica de los fluidos, como se muestra a continuación:

De 5.12a se sigue que:

$$\sum_{i=0}^6 \{f_i(\bar{r}, t+1) - f_i(\bar{r}, t)\} + \sum_{i=0}^6 \{f_i(\bar{r}, t) - f_i(\bar{r} - \bar{c}_i, t)\} = 0
\tag{5.13}$$

El primer término de 5.13 puede claramente expresarse como:

$$\sum_{i=0}^6 f_i(\bar{r}, t+1) - \sum_{i=0}^6 f_i(\bar{r}, t) = \rho(\bar{r}, t+1) - \rho(\bar{r}, t) \equiv \frac{\partial \rho}{\partial t}(\bar{r}, t)$$

El segundo término puede reducirse a la siguiente forma:

$$\sum_{i=0}^6 \{f_i(\bar{r}, t) - f_i(\bar{r} - \bar{c}_i, t)\} \equiv \sum_{i=1}^6 c_i^r \frac{\partial f_i}{\partial x_r}(\bar{r}, t) = \frac{\partial}{\partial x_r} \sum_{i=1}^6 c_i^r f_i(\bar{r}, t) = \frac{\partial}{\partial x_r} (\rho u^r) = \nabla \cdot (\rho \bar{u})$$

Por tanto, la ecuación 5.12a es análoga a la ecuación de balance de masa $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0$

De 5.12b se sigue que:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^6 c_i^a \{f_i(\bar{r}, t+1) - f_i(\bar{r}, t)\} + \sum_{i=1}^6 c_i^a \{f_i(\bar{r}, t) - f_i(\bar{r} - \bar{c}_i, t)\} &= 0 \\
\Rightarrow \sum_{i=1}^6 c_i^a \frac{\partial f_i}{\partial t}(\bar{r}, t) + \sum_{i=1}^6 c_i^a c_i^r \frac{\partial f_i}{\partial x_r}(\bar{r}, t) &\equiv 0
\end{aligned}$$

Aplicando la ecuación de balance de masa podemos escribir:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\rho u^a) - u^a \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta}(\rho u^\beta) \right] + \left\{ \rho u^\beta \frac{\partial u^a}{\partial x_\beta} + u^a u^\beta \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} - u^\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta}(\rho u^a) \right\} + \dots \\
\dots + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \sum_{i=1}^6 c_i^a c_i^\beta f_i = 0 \\
\Rightarrow \rho \frac{\partial u^a}{\partial t} + \rho u^\beta \frac{\partial u^a}{\partial x_\beta} = - \frac{\partial}{\partial x_\beta} \sum_{i=1}^6 (c_i^a - u^a)(c_i^\beta - u^\beta) f_i(\bar{r}, t) \\
\Rightarrow \rho \frac{D}{Dt} u^a = \rho \left[\frac{\partial u^a}{\partial t} + u^\beta \frac{\partial u^a}{\partial x_\beta} \right] = - \frac{\partial}{\partial x_\beta} \sigma^{a\beta}
\end{aligned}$$

que puede ser interpretado como las ecuaciones de Navier-Stokes si "forzamos" al sistema para que:

$$\sigma^{\alpha\beta} = \sum_{i=0}^6 (c_i^\alpha - u^\alpha)(c_i^\beta - u^\beta) f_i(\vec{r}, t) \text{ sea igual al tensor de esfuerzos de Navier-Stokes:}$$

$$\sigma^{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta} + \eta(\nabla^\alpha u^\beta + \nabla^\beta u^\alpha - \delta_{\alpha\beta} \nabla^\gamma u^\gamma) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \nabla^\gamma u^\gamma.$$

Desde luego, como en la teoría cinética, $\sigma^{\alpha\beta}$ puede también ser interpretado como la componente β del "flujo de momento molecular en la dirección α ".

¿A que nos lleva la última ecuación, 5.12c?

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^6 \frac{c_i^2}{2} [f_i(\vec{r}, t+1) - f_i(\vec{r}, t)] + \sum_{i=0}^6 \frac{c_i^2}{2} [f_i(\vec{r}, t) - f_i(\vec{r} - \vec{c}_i, t)] = 0 \\ & \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=0}^6 \frac{c_i^2}{2} f_i + \frac{\partial}{\partial x_y} \sum_{i=0}^6 \frac{c_i^2}{2} c_i^y f_i \cong 0 \\ & \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_y} \sum_{i=0}^6 \frac{(\vec{c}_i - \vec{u})^2}{2} (c_i^y - u^y) f_i + \frac{\partial}{\partial x_y} \sum_{i=0}^6 \frac{c_i^2}{2} u^y f_i + \dots \\ & \quad \dots + u^\beta \frac{\partial}{\partial x_y} \sum_{i=0}^6 c_i^\beta (c_i^y - u^y) f_i \cong 0 \\ & \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + u^y \frac{\partial}{\partial x_y} (\rho E) + u^\beta \frac{\partial}{\partial x_y} \sigma^{\beta y} + \frac{\partial}{\partial x_y} \sum_{i=0}^6 \frac{(\vec{c}_i - \vec{u})^2}{2} (c_i^y - u^y) f_i \cong 0 \\ & \Rightarrow \frac{D}{Dt} (\rho E) \equiv \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + u^y \frac{\partial}{\partial x_y} (\rho E) \equiv -u^\beta \frac{\partial}{\partial x_y} \sigma^{\beta y} - \frac{\partial}{\partial x_y} \sum_{i=0}^6 \frac{(\vec{c}_i - \vec{u})^2}{2} (c_i^y - u^y) f_i \end{aligned}$$

5.15

El término de la izquierda es el cambio en el tiempo de la energía total (interna más cinética) para un "elemento de fluido". El primer término de la derecha es el flujo de energía molecular que se "traduce" macroscópicamente en el trabajo sobre el elemento de fluido realizado por sus alrededores. Finalmente, el último término es el flujo de calor.

Esta ecuación de balance de energía no es válida en el modelo que presentaron R.D. Kingdon et al (como veremos más tarde) dado que allí no se conserva la energía en las "interacciones moleculares". En nuestra extensión posterior tomaremos en cuenta la conservación de la energía, pero sólo tendremos un control muy

limitado sobre el vector flujo de calor $\sum_{i=0}^6 \frac{(\vec{c}_i - \vec{u})^2}{2} (\vec{c}_i - \vec{u}) f_i$.

[Desde el punto de vista de la teoría cinética este vector se interpreta como el flujo de energía térmica visto desde el sistema de referencia del centro de masas local].

Ahora bien, vamos a pensar que las funciones de distribución de velocidades moleculares que resultan de las "colisiones" se pueden escribir como la suma de dos términos: el primero de éstos representa la función

ESTA TESIS NO DEBE QUEDAR EN LA BIBLIOTECA

de distribución que tendríamos si el sistema alcanza un equilibrio local tras las colisiones; el segundo representa la desviación del estado de equilibrio local, el "término viscoso". [En el capítulo 3 mencionamos que en teoría cinética puede obtenerse una función de distribución f_i que describa efectos viscosos (recuperando las ecuaciones de Navier-Stokes) añadiendo una "perturbación" δf_i a la función de distribución correspondiente al estado de equilibrio local, la maxwelliana \bar{f}_i . Vamos a hacer algo muy semejante en el planteamiento teórico del modelo]. Así,

$$f_i = \bar{f}_i + \delta f_i.$$

Si hemos de forzar al sistema para que cumpla las ecuaciones de Navier-Stokes, está claro que debe cumplirse:

$$\begin{aligned} -\sum_{i=0}^6 (c_i^\alpha - u^\alpha)(c_i^\beta - u^\beta) \bar{f}_i &= -p \delta_{\alpha\beta}; \\ -\sum_{i=0}^6 (c_i^\alpha - u^\alpha)(c_i^\beta - u^\beta) \delta f_i &= \eta \left[\nabla^\alpha u^\beta + \nabla^\beta u^\alpha - \delta_{\alpha\beta} \nabla^\gamma u^\gamma \right] + \zeta \delta_{\alpha\beta} \nabla^\gamma u^\gamma; \end{aligned}$$

5.16

5.3.1. EL TÉRMINO DE EQUILIBRIO.

Antes que nada vamos a recordar que las "interacciones moleculares" que producen la modificación de las funciones de distribución se realizan en el interior de cada polígono y que de la forma geométrica de la red de polígonos no se utilizará en nuestros cálculos más que las ecuaciones 5.6a-d (párrafo 5.2). Para nuestra red hexágona (siendo la distancia entre los centros de los hexágonos igual a 1) las ecuaciones 5.6a-d se convierten en las siguientes:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^6 c_i^\alpha &= 0; & \sum_{i=0}^6 c_i^\alpha c_i^\beta &= 3\delta_{\alpha\beta}; \\ \sum_{i=0}^6 c_i^\alpha c_i^\beta c_i^\gamma &= 0; \\ \sum_{i=0}^6 c_i^\alpha c_i^\beta c_i^\gamma c_i^\delta &= \frac{3}{4} \left[\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \right]; \end{aligned}$$

El término de la función de distribución de velocidades que corresponde al estado de equilibrio local será propuesto como una maxwelliana de la siguiente forma:

$$\bar{f}_i(\vec{u}, \varepsilon) = \rho C(\vec{u}, \varepsilon) \exp\left\{-M(\varepsilon)(\vec{c}_i - \vec{u})^2\right\} \quad 5.17$$

donde $C(\vec{u}, \varepsilon)$ y $M(\varepsilon)$ son funciones idénticas para todas las velocidades permisibles.

Podemos escribir, entonces, evaluando 5.17 en $\vec{u} = 0$:

$$\bar{f}_i(0, \varepsilon) = \rho C(0, \varepsilon) \exp\left\{-M(\varepsilon)c_i^2\right\}$$

Está claro que $\bar{f}_i(0, \varepsilon) = \bar{f}(0, \varepsilon)$ es la misma función para todo $i \neq 0$ [Es decir, para todas las velocidades excepto $\vec{c}_0 = 0$] dado que cuando la velocidad macroscópica se anula todas las direcciones están en las mismas circunstancias. (esto se utilizó en el párrafo 5.2 para deducir las ecuaciones 5.6a-d)

Después de esto podemos escribir:

$$\bar{f}_i(\vec{u}, \varepsilon) = D(\vec{u}) \frac{C(\vec{u}, \varepsilon)}{C(0, \varepsilon)} \bar{f}(0, \varepsilon) \exp\{\vec{\gamma}(\vec{u}, \varepsilon) \cdot \vec{c}_i\}; \quad i \neq 0;$$

$$\bar{f}_0(\vec{u}, \varepsilon) = D(\vec{u}) \frac{C(\vec{u}, \varepsilon)}{C(0, \varepsilon)} \bar{f}_0(0, \varepsilon);$$

Vamos a trabajar con la función de distribución normalizada $\bar{n}_i(\vec{u}, \varepsilon) = \frac{\bar{f}_i(\vec{u}, \varepsilon)}{\rho}$ lo que nos permite escribir lo siguiente:

$$\bar{n}_i(\vec{u}, \varepsilon) = \frac{\bar{n}(0, \varepsilon) \exp\{\vec{\gamma}(\vec{u}, \varepsilon) \cdot \vec{c}_i\}}{\bar{n}_0(0, \varepsilon) + \bar{n}(0, \varepsilon) \sum_{i \neq 0} \exp\{\vec{\gamma}(\vec{u}, \varepsilon) \cdot \vec{c}_i\}}, \quad i \neq 0; \quad 5.18$$

$$\bar{n}_0(\vec{u}, \varepsilon) = \frac{\bar{n}_0(0, \varepsilon)}{\bar{n}_0(0, \varepsilon) + \bar{n}(0, \varepsilon) \sum_{i \neq 0} \exp\{\vec{\gamma}(\vec{u}, \varepsilon) \cdot \vec{c}_i\}};$$

En realidad, en el modelo de R.D. Kingdon et al no se considera en absoluto la energía interna e ya que no hay conservación de la energía en las colisiones moleculares. Por tanto, podemos simplificar la expresión 5.18:

$$\bar{n}_i(\vec{u}) = \frac{\bar{n}(0) \exp\{\vec{\gamma}(\vec{u}) \cdot \vec{c}_i\}}{\bar{n}_0(0) + \bar{n}(0) \sum_{i \neq 0} \exp\{\vec{\gamma}(\vec{u}) \cdot \vec{c}_i\}}, \quad i \neq 0;$$

$$\bar{n}_0(\vec{u}) = \frac{\bar{n}_0(0)}{\bar{n}_0(0) + \bar{n}(0) \sum_{i \neq 0} \exp\{\vec{\gamma}(\vec{u}) \cdot \vec{c}_i\}};$$

Ahora hagamos la suposición de que $|\vec{\gamma}(\vec{u}) \cdot \vec{c}_i| \ll 1$ (más tarde veremos que implicaciones tiene). Esto nos permitiría hacer la siguiente aproximación:

$$\exp\{\vec{\gamma} \cdot \vec{c}_i\} \cong 1 + (\vec{\gamma} \cdot \vec{c}_i) + \frac{(\vec{\gamma} \cdot \vec{c}_i)^2}{2}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \sum_{i \neq 0} \exp\{\vec{\gamma} \cdot \vec{c}_i\} &\cong 6 + \gamma^\alpha \sum_{i \neq 0} c_i^\alpha + \frac{\gamma^\alpha \gamma^\beta}{2} \sum_{i \neq 0} c_i^\alpha c_i^\beta = 6 + \frac{3}{2} \gamma^2 \\
\Rightarrow \bar{n}_i(\vec{u}) &\cong \frac{\bar{n} \left[1 + (\vec{\gamma} \cdot \vec{c}_i) + \frac{(\vec{\gamma} \cdot \vec{c}_i)^2}{2} \right]}{\left(1 + \frac{3}{2} \bar{n} \gamma^2 \right)} \\
\Rightarrow \bar{n}_i(\vec{u}) &\cong \bar{n}(0) \left[1 + (\vec{\gamma} \cdot \vec{c}_i) + \frac{(\vec{\gamma} \cdot \vec{c}_i)^2}{2} - \frac{3}{2} \bar{n}(0) \gamma^2 \right] \quad 5.19a
\end{aligned}$$

Un desarrollo absolutamente análogo nos permitiría escribir:

$$\bar{n}_0(\vec{u}) \cong (1 - 6\bar{n}(0)) \left[1 - \frac{3\bar{n}(0)}{2} \gamma^2 \right] \quad 5.19b$$

[En ambos desarrollos utilizamos el hecho de que $\bar{n}_i(0) + 6\bar{n}(0) = 1$, lo cual se sigue directamente de que $\bar{n}_i(\vec{u})$ es la función de distribución normalizada]

Ahora vamos a forzar a la distribución para que cumpla con dos condiciones:

(1) El promedio de las velocidades moleculares (desde luego pesadas por la función de distribución) nos debe dar por resultado precisamente el valor de la velocidad macroscópica \vec{u} anterior al momento en que las "colisiones entre las partículas" tienen lugar. En nuestro modelo esto es equivalente a que la velocidad media (y el momento medio, dado que se trata de partículas idénticas con masa=1) se conserve en las interacciones de las moléculas dentro de cada hexágono de la red.

(2) El "tensor de esfuerzos" debe ser isotrópico y, además, invariante de Galileo. [es decir, $\rho \sum_{i=0}^6 (c_i^\alpha - u^\alpha)(c_i^\beta - u^\beta) \bar{n}_i$ debe ser proporcional a ρ puesto que es una función de las velocidades relativas al centro de masas (recordamos aquí que nuestra función de distribución sólo depende de la velocidad macroscópica y de la densidad pero no de la energía interna)]. Estas son claramente las propiedades del tensor de esfuerzos correspondiente a una situación de equilibrio local que permita una aproximación del modelo a las ecuaciones de Euler.

Examinemos la primera condición. El promedio de las velocidades moleculares es $\sum_{i=0}^6 \vec{c}_i \bar{n}_i(\vec{u})$ y su resultado debe ser \vec{u} . Veamos:

$$\sum_{i=0}^6 c_i^\beta \bar{n}_i(\vec{u}) = \bar{n}(0) \left\{ \gamma^\alpha \sum_{i=1}^6 c_i^\alpha c_i^\beta + \frac{\gamma^\alpha \gamma^\delta}{2} \sum_{i=1}^6 c_i^\alpha c_i^\beta c_i^\delta \right\} = 3\bar{n}(0) \gamma^\beta$$

Esto debe ser igual a u^β y, por tanto, está claro que debe ocurrir:

$$\bar{\gamma}(\vec{u}) = \frac{\bar{n}}{3\bar{n}(0)}$$

5.20

Vamos a exigir ahora que la energía interna por partícula (o por unidad de masa, ya que la masa de cada partícula es unitaria) sea un invariante de Galileo.

El doble de esta energía interna media por partícula, $\langle (\vec{c}_i - \vec{u})^2 \rangle = \sum_{i=0}^6 (\vec{c}_i - \vec{u})^2 \bar{n}_i(\vec{u})$, es el promedio de una función de las velocidades relativas $U_i = (\vec{c}_i - \vec{u})^2$ de las moléculas respecto al centro local de masa. Dado que las velocidades no dependen del sistema de referencia elegido, tampoco debe depender de esto una función de tales velocidades relativas ni su promedio.

Ahora bien, en el caso en que $\vec{u} = 0$ sucede que $\langle (\vec{c}_i - \vec{u})^2 \rangle_{\vec{u}=0} = \langle c_i^2 \rangle_{\vec{u}=0} = \sum_{i=1}^6 c_i^2 \bar{n}_i(0) = 6\bar{n}(0)$ y, cómo se trata de un invariante de Galileo, $\langle (\vec{c}_i - \vec{u})^2 \rangle$ debe resultar *siempre* $6\bar{n}(0)$ independientemente de cual sea la velocidad macroscópica.

Veamos:

$$\langle (\vec{c}_i - \vec{u})^2 \rangle = \langle c_i^2 \rangle - u^2$$

$$\text{Pero } \langle c_i^2 \rangle = \sum_{i=1}^6 c_i^2 \bar{n}_i(\vec{u}) = \sum_{i=1}^6 \bar{n}_i(\vec{u}) = 1 - \bar{n}_0(\vec{u}) = 1 - (1 - 6\bar{n}(0)) \left[1 - \frac{3\bar{n}(0)}{2} \gamma^2 \right]$$

$$\Rightarrow \langle c_i^2 \rangle = 6\bar{n}(0) + \frac{u^2}{6\bar{n}(0)} - u^2$$

$$\Rightarrow \langle (\vec{c}_i - \vec{u})^2 \rangle = 6\bar{n}(0) + u^2 \left[\frac{1}{6\bar{n}(0)} - 2 \right]$$

De dónde se sigue que para que $\langle (\vec{c}_i - \vec{u})^2 \rangle$ sea invariante de Galileo e igual a $6\bar{n}(0)$ debe ocurrir $\bar{n}(0) = \frac{1}{12}$ y, por tanto, $\bar{n}_0(0) = 1 - 6\bar{n}(0) = \frac{1}{2}$. (Y la energía interna media por partícula resulta ser igual a $\varepsilon = 3\bar{n}(0) = \frac{1}{4}$).

La función de distribución normalizada es (bajo estas condiciones) igual a:

$$\bar{n}_i(\vec{u}) = \frac{1}{12} \left[1 + 4(\vec{u} \cdot \vec{c}_i) + 8(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2 - 2u^2 \right], \quad \text{para } i \neq 0;$$

$$\bar{n}_0(\vec{u}) = \frac{1}{2} [1 - 2u^2] = \frac{1}{2} - u^2; \quad 5.21$$

Desde luego, como \bar{n} , es la función de distribución normalizada, la función que da la densidad de

partículas por cada velocidad molecular será $\bar{f}_i = \rho \bar{n}_i$.

Antes de mostrar el segundo término de la función de distribución de velocidades, el término viscoso, vamos a hacer algunos comentarios:

(Comentario A) La segunda condición que pedimos cumpliera $\bar{n}_i(\bar{u})$ era que el correspondiente tensor de esfuerzos fuera isotrópico e invariante de Galileo. Lo que hicimos en realidad fue "forzar al sistema" para que la energía interna fuera un invariante de Galileo. Es, sin embargo, fácil de mostrar que gracias a esta condición y a las ecuaciones (VI)a-d [propias de la forma hexagonal de la red] el tensor de esfuerzos efectivamente resulta invariante de Galileo e isotrópico.

Sólo necesita cumplirse que:

$$2\varepsilon^{(1)} = \sum_{i=0}^6 (c_i^{(1)} - u^{(1)})^2 \bar{n}_i(\bar{u}) = \sum_{i=0}^6 (c_i^{(2)} - u^{(2)})^2 \bar{n}_i(\bar{u}) = 2\varepsilon^{(2)}; \quad 5.22$$

$$\sum_{i=0}^6 (c_i^{(1)} - u^{(1)})(c_i^{(2)} - u^{(2)}) \bar{n}_i(\bar{u}) = 0; \quad 5.23$$

Es evidente que cumpliéndose 5.22 y 5.234 el tensor de esfuerzos resulta invariante de Galileo ya que las entradas del tensor son $\sigma^{12} = \sigma^{21} = \sum_{i=0}^6 (c_i^{(1)} - u^{(1)})(c_i^{(2)} - u^{(2)}) \bar{n}_i(\bar{u})$ [que por 5.23 es nulo y, por tanto, independiente de \bar{u}] y $\sigma^{11} = 2\varepsilon^{(1)} = 2\varepsilon^{(2)} = \sigma^{22}$ [Pero como $\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} = 2\varepsilon^{(1)} = 2\varepsilon^{(2)}$ y como ε es invariante galileano, se sigue que σ^{11} y σ^{22} también lo son].

La isotropía implica que si rotamos los ejes X e Y un ángulo Θ y expresamos las velocidades moleculares \vec{c}_i respecto de los nuevos ejes X' e Y' obtendremos exactamente el mismo tensor de esfuerzos.

Es fácil demostrar que ocurre esto. Si $c_i^{(1)'}$ y $c_i^{(2)'}$ son las coordenadas de \vec{c}_i respecto a los ejes X' e Y' respectivamente tenemos entonces que:

$$c_i^{(1)'} = c_i^{(1)} \cos\Theta + c_i^{(2)} \sin\Theta;$$

$$c_i^{(2)'} = -c_i^{(1)} \sin\Theta + c_i^{(2)} \cos\Theta;$$

De donde,

$$\left\langle (c_i^{(1)'} - u^{(1)'})^2 \right\rangle = \cos^2\Theta \left\langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})^2 \right\rangle + \sin^2\Theta \left\langle (c_i^{(2)} - u^{(2)})^2 \right\rangle + 2 \sin\Theta \cos\Theta \left\langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})(c_i^{(2)} - u^{(2)}) \right\rangle$$

Pero $\left\langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})(c_i^{(2)} - u^{(2)}) \right\rangle = 0$ y $\left\langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})^2 \right\rangle = \left\langle (c_i^{(2)} - u^{(2)})^2 \right\rangle$ por (1) y (2), de donde se concluye que:

$$\left\langle (c_i^{(1)'} - u^{(1)'})^2 \right\rangle = \left\langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})^2 \right\rangle$$

De modo absolutamente similar puede mostrarse que

$$\left\langle (c_i^{(1)'} - u^{(1)'}) (c_i^{(2)'} - u^{(2)'}) \right\rangle = \left\langle (c_i^{(1)} - u^{(1)}) (c_i^{(2)} - u^{(2)}) \right\rangle$$

Por lo tanto, si se cumplen las condiciones 5.22 y 5.23 el tensor de esfuerzos es isotrópico. Ahora vamos a comprobar que se cumplen estas condiciones cuando la función de distribución es la de la expresión 5.21.

$$(1) 2\varepsilon^{(1)} = \langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})^2 \rangle = \langle c_i^{(1)2} \rangle - u^{(1)2}$$

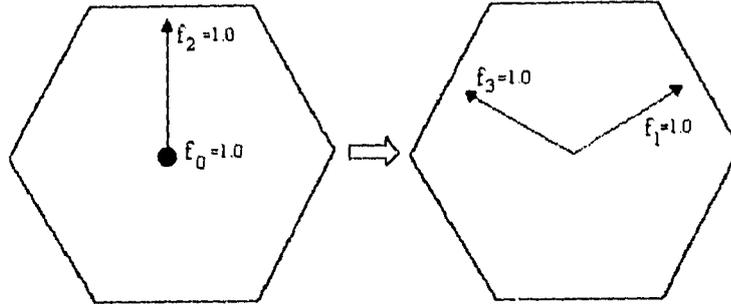


Figura 5.2

$$\begin{aligned} \text{Pero } \langle c_i^{(1)2} \rangle &= \sum_{i=1}^6 c_i^{(1)2} \bar{n}_i(\bar{u}) = \frac{1}{12} [1 - 2u^2] \sum_{i=1}^6 c_i^{(1)2} + \frac{8}{12} u^\alpha u^\beta \sum_{i=1}^6 c_i^{(1)2} c_i^\alpha c_i^\beta \\ &= \frac{1}{4} [1 - 2u^2] + \frac{u^\alpha u^\beta}{2} (\delta_{\alpha\beta} + 2\delta_{\alpha(1)} \delta_{\beta(2)}) = \frac{1}{4} [1 - 2u^2] + \frac{u^2}{2} + u^{(1)2} \\ &\Rightarrow 2\varepsilon^{(1)} = \left[\frac{1}{4} + u^{(1)2} \right] - u^{(1)2} = \frac{1}{4} = \varepsilon. \quad \text{Como } \varepsilon = \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)}, \text{ se sigue que} \\ \varepsilon^{(1)} &= \varepsilon^{(2)}. \end{aligned}$$

$$(2) \langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})(c_i^{(2)} - u^{(2)}) \rangle = \langle c_i^{(1)} c_i^{(2)} \rangle - u^{(1)} u^{(2)}$$

$$\begin{aligned} \text{Pero } \langle c_i^{(1)} c_i^{(2)} \rangle &= \sum_{i=1}^6 c_i^{(1)} c_i^{(2)} \bar{n}_i(\bar{u}) = \frac{8}{12} u^\alpha u^\beta \sum_{i=1}^6 c_i^{(1)} c_i^{(2)} c_i^\alpha c_i^\beta = u^{(1)} u^{(2)} \\ &\Rightarrow \langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})(c_i^{(2)} - u^{(2)}) \rangle = 0 \end{aligned}$$

De esto se puede concluir que efectivamente la función de distribución 5.21 da como resultado un tensor de esfuerzos isotrópico e invariante de Galileo.

(Comentario B). Cuando una serie de "moléculas" se reimen en un polígono, la energía media de dichas moléculas antes de entrar en acción las "interacciones moleculares" puede tener una gran variedad de valores posibles (de hecho, un continuo de valores posibles). El valor concreto de la energía media (por partícula), E, claramente no está determinado por la velocidad macroscópica, dado que hay muchas

configuraciones con la misma energía y diferente velocidad, y también a la inversa. Pensemos, por ejemplo en las dos configuraciones dibujadas en la figura 5.2. Estas configuraciones tienen la misma velocidad macroscópica y el mismo número de partículas pero tienen diferente energía media.

Sin embargo, una vez que han entrado en juego las "colisiones" y es válida la función de distribución 5.21, el valor de E está dado por la siguiente expresión:

$$2E = \langle c_i^2 \rangle = \langle (\vec{c}_i - \vec{u})^2 \rangle + u^2 = 2E + u^2 = \frac{1}{2} + u^2 \quad 5.24$$

donde E es la energía media después de las "colisiones" mientras que \vec{u} es la velocidad media *antes* de las colisiones (aunque se conserva durante éstas).

Así pues, la expresión 5.24 implica que la energía media de las partículas después de las colisiones no depende de su valor antes de las colisiones, sino exclusivamente del valor de la velocidad media. Por ejemplo, las dos configuraciones de la figura 5.2 evolucionarían *hacia una misma configuración tras las colisiones*. Está claro entonces que *no hay conservación de la energía en este modelo* y no es posible simular fenómenos térmicos mediante él.

(Comentario C). Para poder escribir las expresiones 5.19 se tuvo que aproximar una exponencial con un desarrollo en serie. Como ya dijimos entonces, para que esta aproximación sea válida necesitamos que se cumpla que $|\vec{\gamma}(\vec{u}) \cdot \vec{c}_i| \ll 1$. Como esto debe ser cierto para toda \vec{u} y toda \vec{c}_i , se sigue que debe ocurrir que $|\vec{\gamma}(\vec{u})| \ll 1$.

Ahora bien, por 5.20, $\vec{\gamma}(\vec{u}) = \frac{\vec{u}}{3\bar{n}(0)} = 4\vec{u}$. Por tanto, debe cumplirse que la velocidad macroscópica sea "bastante pequeña" $[|\vec{u}| \ll \frac{1}{4}]$ para que nuestro desarrollo tenga justificación. Se nos presenta aquí un problema: ¿Cómo lograr que se mantenga cierta esta condición durante el movimiento del "fluido" en la red?

(En nuestras simulaciones no utilizamos ningún mecanismo para asegurarnos de que esto se mantuviera cierto; sólo hicimos "suficientemente pequeñas" las velocidades medias implicadas en las condiciones iniciales y de frontera).

(Comentario D) Es necesario comprobar que efectivamente $\bar{n}_i(\vec{u}) \geq 0$ para todo i . Si ocurriera otra cosa, está claro que la expresión 5.21 no podría corresponder a una verdadera función de distribución de probabilidades. Esta propiedad no se sigue de las condiciones (1) y (2) y, por tanto, hay que examinarla aparte.

En el caso en que $i=0$, la propiedad es obvia: Como $u^2 < \frac{1}{8}$ (ver comentario C) se sigue que $\bar{n}_0(\vec{u}) \geq 0$ (de hecho $\bar{n}_0(\vec{u})$ debe ser siempre mayor que $\frac{3}{8}$).

Vamos ahora a demostrarlo para $i \neq 0$. Supongamos que $|c_i| |\cos \alpha| > \frac{1}{2}$, donde α es el ángulo entre \vec{c}_i y \vec{u} . Entonces, $8(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2 = 8u^2 |c_i|^2 |\cos \alpha|^2 > 2u^2 \Rightarrow 8(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2 > 2u^2$.

Además, $4|\vec{u} \cdot \vec{c}_i| \leq 4|\vec{u}| <$ dado que $|\vec{u}| \ll \frac{1}{4}$.

Esto implica que $+4(\vec{u} \cdot \vec{c}_i) + 8(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2 - 2u^2 > 0$ porque los términos que pueden ser negativos, $4(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)$ y $-2u^2$, son respectivamente menores en valor absoluto que los términos positivos 1 y $8(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2$. De aquí claramente $\bar{n}_i(\vec{u}) \geq 0$.

Si suponemos lo contrario (es decir que $|c_i \cos \alpha| \leq \frac{1}{2}$) entonces se sigue que:

$|4(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)| = 4|\vec{u}| |c_i \cos \alpha| \leq 2|\vec{u}| < \frac{1}{2}$ y, por otro lado, sabemos que $|2u^2| < \frac{2}{8} = \frac{1}{4}$. Como la suma de los valores absolutos de los términos que pueden ser negativos, $4(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)$ y $-2u^2$, es menor que $\frac{3}{4}$, está claro que $+4(\vec{u} \cdot \vec{c}_i) + 8(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2 - 2u^2 > 0 \Rightarrow \bar{n}_i(\vec{u}) \geq 0$.

De esto se concluye que la función de distribución será siempre positiva mientras se respete que $|\vec{u}| < \frac{1}{4}$.

5.3.2. EL "TÉRMINO VISCOSO".

Los efectos viscosos en la dinámica de nuestro fluido van a ser simulados mediante una "perturbación" de la función de distribución de velocidades moleculares correspondiente al estado de equilibrio local, la cuál fué obtenida en el parágrafo anterior.(5.3.1).

Significando los pasos de la exposición de R.D.Kingdon et al en el artículo de la referencia # 7, vamos a proponer un "término viscoso" de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \delta f_i &= A \nabla^\nu u^\nu + B c_i^\alpha c_i^\beta \nabla^\mu u^\alpha ; \\ \delta f_0 &= C \nabla^\nu u^\nu ; \end{aligned} \quad 5.25$$

Esta es una expresión que no depende de la velocidad macroscópica \vec{u} , sino exclusivamente de sus derivadas espaciales. A, B y C son constantes que serán encontradas después de imponer una serie de condiciones sobre δf_i que son las siguientes:

(1) Es necesario que la función de distribución completa $f_i = \bar{f}_i + \delta f_i$ esté normalizada a la densidad de partículas en la posición correspondiente (la cuál, desde luego, debe ser la misma antes que después de las colisiones). Es decir, debe cumplirse que $\sum_{i=0}^6 f_i = \rho$. Ahora bien, como impusimos la condición de

que $\sum_{i=0}^6 \bar{f}_i = \rho \sum_{i=0}^6 \bar{n}_i = \rho$ se sigue que debe cumplirse $\sum_{i=0}^6 \delta f_i = 0$. Utilizando las ecuaciones 5.25 tenemos que:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^6 \delta f_i &= 6A \nabla^\gamma u^\gamma + B \nabla^\beta u^\alpha \sum_{i=1}^6 c_i^\alpha c_i^\beta + C \nabla^\gamma u^\gamma \\ \Rightarrow \sum_{i=0}^6 \delta f_i &= (6A+C) \nabla^\gamma u^\gamma + 3B \delta_{\alpha\beta} \nabla^\beta u^\alpha = (3B+6A+C) \nabla^\gamma u^\gamma \end{aligned}$$

Como esto debe ser nulo cualesquiera que sea la velocidad \vec{u} como función de la posición en el plano (o en nuestra red discreta), se sigue que

$$6A+3B+C=0 \quad 5.26$$

(2) Necesitamos que el promedio de las velocidades moleculares para la función de distribución completa f_i sea \vec{u} , la velocidad macroscópica. Como ya exigimos esto último para \bar{f}_i , la función de distribución de equilibrio local, el término viscoso debe ser tal que $\sum_{i=0}^6 \bar{c}_i \delta f_i = 0$.

Pero $\sum_{i=0}^6 \bar{c}_i \delta f_i = A \nabla^\gamma u^\gamma + B \nabla^\beta u^\alpha \sum_{i=0}^6 \bar{c}_i c_i^\alpha c_i^\beta$, lo cual se anula sin necesidad de imponer ninguna condición adicional.

(3) Falta imponer la condición de que el tensor de esfuerzos tenga la forma del de Navier-Stokes. según mostramos al comienzo del parágrafo 4.3, esto significa que debe cumplirse:

$$-\sum_{i=0}^6 (c_i^\alpha - u^\alpha)(c_i^\beta - u^\beta) \delta f_i = \eta \left[\nabla^\alpha u^\beta + \nabla^\beta u^\alpha - \delta_{\alpha\beta} \nabla^\gamma u^\gamma \right] + \zeta \delta_{\alpha\beta} \nabla^\gamma u^\gamma$$

Por las condiciones (1) y (2),

$$\begin{aligned} -\sum_{i=0}^6 (c_i^\alpha - u^\alpha)(c_i^\beta - u^\beta) \delta f_i &= -\sum_{i=0}^6 c_i^\alpha c_i^\beta \delta f_i \\ \dots &= -3\delta^{\alpha\beta} A (\nabla^\gamma u^\gamma) - \frac{3}{4} B \nabla^\gamma u^\delta (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) \\ \dots &= -3\delta^{\alpha\beta} A (\nabla^\gamma u^\gamma) - \frac{3}{4} B \delta_{\alpha\beta} (\nabla^\gamma u^\gamma) - \frac{3}{4} B (\nabla^\alpha u^\beta + \nabla^\beta u^\alpha) \end{aligned}$$

Comparando lo anterior con el tensor de Navier-Stokes, queda claro que $B = -\frac{4}{3}\eta$ y que

$$\zeta - \eta = -\left[3A + \frac{3}{4}B \right]$$

Utilizando estas dos ecuaciones más la ecuación 5.26 encontrada al imponer la condición (1), podemos expresar las constantes A,B,C en términos de los coeficientes de viscosidad η y ζ :

$$A = \frac{1}{3}(\zeta - \eta); \quad B = -\frac{4}{3}\eta; \quad C = 2\zeta;$$

De donde, la forma del "término viscoso" de la función de distribución es:

$$\begin{aligned} \delta f_i &= \frac{1}{3}(2\eta - \zeta) \nabla^\gamma u^\gamma - \frac{4}{3}\eta c_i^\alpha c_i^\beta \nabla^\beta u^\alpha; \\ \delta f_0 &= 2\zeta \nabla^\gamma u^\gamma; \end{aligned} \quad 5.27$$

Es necesario hacer un comentario adicional. Como ya dijimos, la suma de todos los términos δf_i es nula. Esto implica que al menos algunos de estos términos son negativos, pero hay que recordar que δf_i representa una "desviación" de la función de distribución de velocidades f_i respecto a la correspondiente a una situación de equilibrio local \tilde{f}_i . Por lo tanto, hay que asegurarse de que los términos f_i continúan siendo positivos a pesar de esta modificación.

Consideremos todos los posibles valores de $\bar{n}_i(\vec{u})$ (obtenidos a partir de todas las opciones aceptables de \vec{c}_i y de \vec{u} y calculemos el valor mínimo. Para esto escribamos $\bar{n}_i(\vec{u}) = h(|\vec{u}|, \tau)$, donde $|\vec{u}|$ es la magnitud de \vec{u} mientras que τ es el producto de $|\vec{c}_i|$ por el coseno del ángulo formado por \vec{c}_i y \vec{u} . ($-1 \geq \tau \geq 1$).

$$\text{Así, } h(|\vec{u}|, \tau) = \frac{1}{12} [1 + 4|\vec{u}|\tau + 8|\vec{u}|^2\tau^2 - 2|\vec{u}|^3] \text{ si } i \neq 0.$$

$$\text{Como } \tau \geq -1 \text{ y } |\vec{u}| < \frac{1}{4} \text{ se sigue que } \frac{\partial h}{\partial \tau} = \frac{1}{12} [4|\vec{u}| + 16|\vec{u}|^2\tau] > \frac{|\vec{u}|}{3} [1 - 4|\vec{u}|] > 0$$

De donde $h(|\vec{u}|, \tau)$ es siempre creciente con τ y alcanza su valor mínimo (para cualquier velocidad) cuando $\tau = -1$.

$$\text{Ahora bien, } \frac{\partial h}{\partial |\vec{u}|}(|\vec{u}|, -1) = \frac{1}{12} [12|\vec{u}| - 4] = |\vec{u}| - \frac{1}{3} \geq 0 \text{ cuando } |\vec{u}| \geq \frac{1}{3}$$

Queda claro que el valor mínimo completo de $\bar{n}_i(\vec{u})$ es cuando $\tau = -1$ y $|\vec{u}| = \frac{1}{3}$ donde

$$\bar{n}_i(\vec{u}) = h\left(\frac{1}{3}, -1\right) = \frac{1}{36} \Rightarrow \tilde{f}_i(\rho, \vec{u}) \geq \frac{\rho}{36} \text{ para toda } \vec{c}_i \text{ y toda } \vec{u}.$$

Por lo tanto, para asegurarnos que no habrá valores negativos de la función de distribución convendría comprobar que $\frac{|\delta f_i|}{\rho} < \frac{1}{36}$ por lo menos para $i \neq 0$.

(δf_0 podría ser considerablemente más grande sin correr ese riesgo).

Como la de que $|\vec{u}| \ll \frac{1}{4}$, esta condición debe cumplirse no sólo en la inicialización de la red sino durante todo el movimiento del "fluido" (y tampoco para esta condición tenemos un mecanismo regulatorio para asegurarnos que en la evolución del sistema no pueda modificarse esta situación. Nos reducimos a considerar en las condiciones iniciales un término viscoso bastante menor que el término de equilibrio).

5.3.3 BREVE RESUMEN DEL MODELO.

A continuación se enumeran todos los pasos del algoritmo que realiza el modelo en cada paso de tiempo:

(1) Utilizando los datos del paso de tiempo anterior se calculan los valores de la densidad de partículas

$\rho(\vec{r}, t)$ y de la velocidad macroscópica $\vec{u}(\vec{r}, t)$ en cada hexágono de la red. Este cálculo se realiza utilizando las ecuaciones 5.2 y 5.3:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{i=0}^6 f_i(\vec{r}, t);$$

$$\rho(\vec{r}, t)\vec{u}(\vec{r}, t) = \sum_{i=0}^6 \vec{c}_i f_i(\vec{r}, t),$$

(2) Se calculan los gradientes de la velocidad macroscópica mediante la fórmula 5.10 deducida al comienzo del párrafo 5.3:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x}(\vec{r}, t) = \frac{1}{3} \sum_{i=0}^6 c_i^{(1)} [u_x(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - u_x(\vec{r}, t)];$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial y}(\vec{r}, t) = \frac{1}{3} \sum_{i=0}^6 c_i^{(2)} [u_x(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - u_x(\vec{r}, t)];$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial x}(\vec{r}, t) = \frac{1}{3} \sum_{i=0}^6 c_i^{(1)} [u_y(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - u_y(\vec{r}, t)];$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial y}(\vec{r}, t) = \frac{1}{3} \sum_{i=0}^6 c_i^{(2)} [u_y(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - u_y(\vec{r}, t)];$$

(3) se calculan las nuevas funciones $f_i(\vec{r}, t)$ y $f_0(\vec{r}, t)$ (resultante de las "interacciones moleculares" dentro de cada polígono) utilizando las ecuaciones 5.21 y 5.26:

$$f_i(\vec{r}, t) = \frac{\rho}{12} \left[1 + 4(c_i^{(1)} u_x + c_i^{(2)} u_y) + 8(c_i^{(1)} u_x + c_i^{(2)} u_y)^2 - 2(u_x^2 + u_y^2) \right]$$

$$+ \frac{1}{3} (2\eta - \zeta) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) - \frac{4}{3} \eta \left(c_{i,x}^2 \frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{i,x}^2 \frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{i,x} c_{i,y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \right);$$

$$f_0(\vec{r}, t) = \rho \left[\frac{1}{2} - (u_x^2 + u_y^2) \right] + 2\zeta \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right);$$

(4) Una vez calculadas las funciones de distribución $f_i(\vec{r}, t)$ se permite que las moléculas se trasladen al centro de alguna de los polígonos vecinos (dependiendo de cuál sea su velocidad molecular \vec{c}_i) en el siguiente paso de tiempo.

5.3.4.- SIMULACIONES Y RESULTADOS.

Antes de describir las pruebas a las que ha sido sometido el modelo Lattice Boltzmann que hemos descrito teóricamente en este capítulo, analicemos en términos generales el problema de la implementación de las condiciones iniciales y de frontera en el modelo.

Respecto a las condiciones iniciales en los sitios del dominio de cálculo que no pertenecen a la frontera no hay mucho más que añadir: el usuario asigna (ya sea a su gusto o mediante algún algoritmo adicional

ajeno al modelo propiamente dicho) los valores de las propiedades macroscópicas que determinan la función de distribución (esto es, las dos componentes de la velocidad macroscópica y la densidad de partículas o de masa) y, a partir de éstos, el modelo comienza a operar desde el paso 2 del parágrafo 5.3.3.

Por su parte, las fronteras sólidas son implementadas de manera más complicada que en el modelo ARIANNA (descrito en el capítulo 4). Del mismo modo que allí, los sitios que representan un obstáculo sólido (generalmente se considera que son los mismos a lo largo de la simulación, aunque esto no es una necesidad inherente al modelo) son señalados mediante un campo booleano $b(\vec{r})$. Si esta variable es igual a "1" en un sitio determinado, consideramos que en esa posición hay un obstáculo sólido, y si es igual a "0" se considera que se trata de un sitio "permitido al gas". Si analizamos la descripción resumida de la evolución del modelo que dimos en el parágrafo 4.3.3., podríamos decir que las reglas de colisión de las partículas en el modelo son "estadísticas" o "macroscópicas" mientras que las reglas de propagación son "microscópicas" (el camino libre medio parece ser considerablemente largo). También la acción de las fronteras sólidas en el modelo tiene este doble carácter. De la misma manera que en el modelo ARIANNA las partículas (o quizá sea más correcto decir en este caso las "corrientes de partículas") colisionan con las fronteras *invirtiendo completamente su velocidad*. Esto permitiría a un modelo "microscópico" (tal como los modelos de gases en redes) simular la adhesión del fluido a las paredes sólidas cuando se observa no el comportamiento individual sino el *colectivo* de las partículas. Sin embargo, en nuestro caso las "corrientes de partículas" deben corresponder ya a un sistema "macroscópico". Por esta razón debemos añadir un segundo efecto de las paredes sólidas: instalamos en los sitios adyacentes a las paredes que sí son permitidos al gas *celdas de control* donde las dos componentes de la velocidad macroscópica permanecen *invariantes* a lo largo de toda la simulación.

Finalmente, en las fronteras no-sólidas del dominio de cálculo pueden establecerse ya sea sitios de control o bien condiciones periódicas dependiendo del fenómeno que se desea modelar.

Se ha desarrollado un programa en lenguaje C que permite realizar simulaciones mediante el modelo que hemos descrito a lo largo de este capítulo. Los principales procedimientos de que está compuesto nuestro programa corresponden al flujo de las partículas, al cálculo de los términos de equilibrio y de "perturbación" viscosa de la función de distribución sobre toda la red y finalmente a la implementación de sitios de control desde los que es "forzado" el sistema a lo largo de la simulación. Hay que destacar que las colisiones de las partículas con las paredes (esto es, la inversión de las velocidades de las partículas que se "dirigen" en un momento dado hacia un obstáculo sólido) se incluyen en el procedimiento de flujo de las partículas y no se trata de dos procedimientos independientes (como en el caso del modelo ARIANNA con los operadores T y B). Otro aspecto problemático de nuestro programa de computación es la gran cantidad de memoria computacional que ocupa constantemente durante una simulación: a cada sitio de la red corresponden siete variables reales (este problema se complica con el modelo extendido presentado en el capítulo 6). Las simulaciones presentadas aquí fueron desarrolladas con redes muy pequeñas (en ambos casos, se utilizó una red de 1x400 sitios, que es de hecho una red *unidimensional*) obteniéndose a pesar de ello resultados de muy buena "resolución" que permiten concluir que el "gas" modelo es muy aproximadamente un sistema "macroscópico" que no presenta saltos bruscamente discontinuos en sus propiedades, de una celda a otra. Sin embargo, una simulación de tipo práctico (tal como las realizadas con el modelo ARIANNA en la reconstrucción del campo de vientos en el valle de México y sus alrededores) necesitaría una red considerablemente más grande. (Este problema de tipo estrictamente computacional está aún en estudio).

El modelo Lattice Boltzmann analizado en este capítulo fue sometido a dos pruebas para comprobar que es capaz de simular condiciones de flujo para las que existen soluciones analíticas de las ecuaciones de Navier-Stokes. Los resultados obtenidos mediante estas pruebas nos permiten afirmar que el modelo parece simular de manera adecuada situaciones de flujo laminar (tanto estacionarias como no-estacionarias). Aunque se han encontrado algunos problemas, no se han estudiado con suficiente detalle las posibilidades

del modelo para simular flujos turbulentos. Es posible que las dificultades encontradas se deban a la violación de la ley de conservación de la energía (la cual estamos intentando recuperar mediante la extensión del modelo que es expuesta en el capítulo 6). No hay que olvidar que en los modelos de autómatas celulares la turbulencia se ha presentado siempre de manera "espontánea" sin ser introducida "a priori" en la definición del modelo y que, por lo tanto, el procedimiento es (en gran medida) "experimental". Sin embargo, en vista de los muy buenos resultados obtenidos con respecto a la simulación de fenómenos turbulentos mediante el modelo ARIANNA y otros modelos de gases en redes (fuertemente emparentados con los modelos Lattice Boltzmann), nos permitimos ser optimistas. El problema espera aún ser analizado con detalle tanto teórica como empíricamente.

FLUJO DE POISEUILLE "A LA INVERSA" (ETA=10.0; FI=0.0; Velocidad uniforme original=0.18; Densidad=10000)

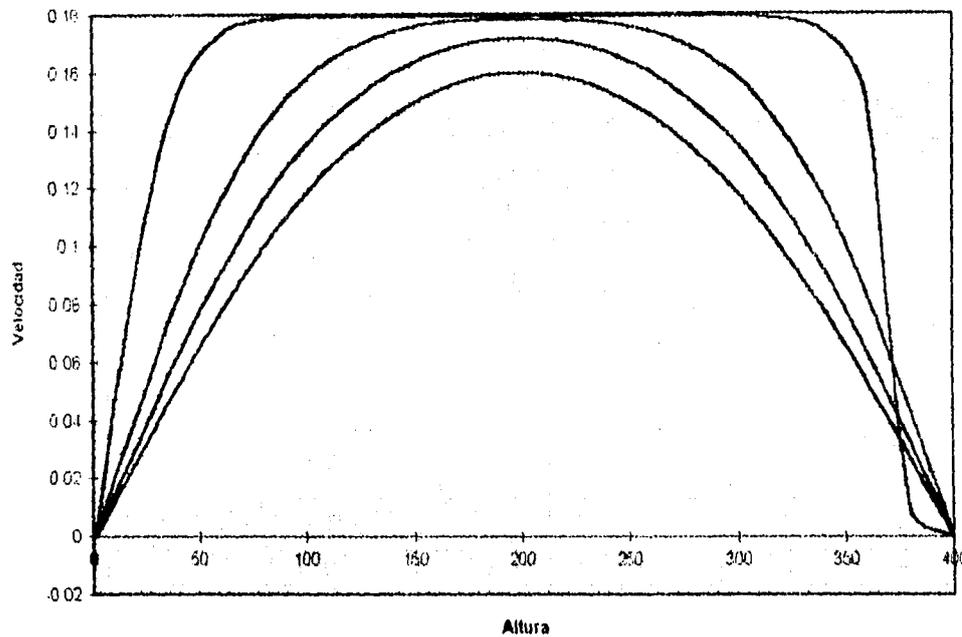


Figura 5.3.- Perfiles de velocidad resultantes de nuestra simulación para el flujo de Poiseuille.

FLUJO DE POISEUILLE.

Las condiciones impuestas para simular el flujo de Poiseuille se parecen en gran medida a las utilizadas en el modelo ARIANNA. De la misma manera que entonces, no simulamos el problema clásico de un fluido en un canal plano sometido a una diferencia de presiones fija entre los extremos del canal sino el problema *inverso* del relajamiento al equilibrio de un fluido inicialmente uniforme moviéndose a través de dicho canal plano (en ausencia de una diferencia de presiones entre los extremos). Desde luego, se espera que para el tiempo $t=1$ la velocidad se anule bruscamente en las paredes del canal. Con cierta rapidez el perfil de

velocidades debe transformarse en uno parabólico que se hará de dimensiones cada vez menores a medida que el flujo va "deteniéndose" lentamente debido a la fricción.

Comparación entre los resultados de la simulación y una parábola.

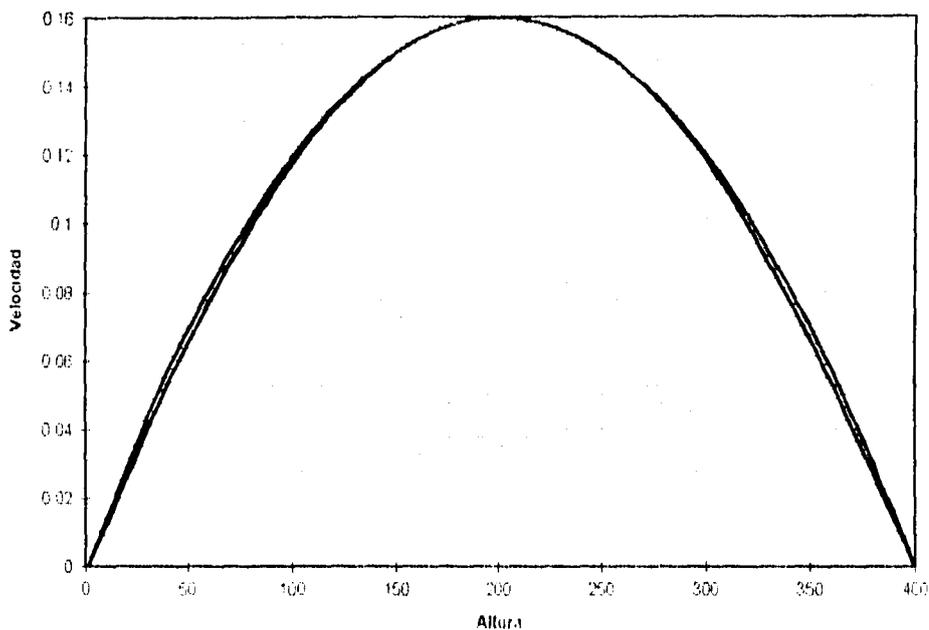


Figura 5.4 - (La línea inferior es el perfil de velocidad resultante para el flujo de Poiseuille al tiempo $t=35000$; la línea superior es una parábola ajustada).

Utilizamos una red de 1×400 celdas. Se trata, pues, de una red unidimensional, esto es de una *fila* vertical. Los sitios superior e inferior de la fila se consideran como obstáculos sólidos mientras que los sitios adyacentes son considerados como sitios de control donde la velocidad macroscópica es igual a cero. Se implantaron condiciones periódicas en las fronteras no-sólidas de la red. Las funciones de distribución iniciales se calcularon con una densidad de partículas igual a 10000, una velocidad horizontal a lo largo del canal igual a 0.18 y una velocidad vertical igual a 0.0. Estas condiciones son uniformes en el tiempo ($t=0$) sobre toda la red (excepto en los sitios de control superior e inferior). Se utilizaron los siguientes valores para los coeficientes de viscosidad: $\eta = 10.0$ y $\zeta = 0.0$.

Resultados de la simulación: En las figuras 5.3 y 5.4 se presentan los resultados obtenidos mediante la simulación. En la primera figura se presentan una serie de curvas que representan los perfiles de la velocidad obtenidos para diferentes tiempos de corrida: 5000, 15000, 25000 y 35000 pasos de tiempo respectivamente. La evolución del sistema es precisamente la misma que la predicha teóricamente (al menos en términos cualitativos). La primera curva (correspondiente al tiempo 5000) es todavía un flujo uniforme en el centro del canal que se va a cero sólo en la vecindad de las paredes. Poco a poco la curva se va transformando en un perfil parabólico (tal como era se esperaba). En la figura 5.4 se muestra una comparación entre la curva obtenida al tiempo 35000 y una parábola que le hemos ajustado. Se puede observar que el perfil obtenido por la simulación es muy aproximadamente parabólico.

FLUJO DE COUETTE.

La simulación del flujo de Couette (evolución a una situación de flujo estacionario a partir de una situación de reposo de un fluido que ocupa el espacio entre una placa inmóvil y otra móvil) se lleva a cabo también de manera muy semejante a la que hemos descrito en el capítulo 4 al hablar de las simulaciones con el modelo ARIANNA. Como entonces, esperamos que el sistema evolucione asintóticamente hacia una situación de flujo estacionario en la que el perfil de velocidades sea lineal (tal como es posible deducir analíticamente de la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes bajo las condiciones de frontera descritas). En la figura 5.4 se muestran las curvas teóricas obtenidas para diferentes valores del parámetro adimensional dependiente del tiempo $\pi^2 \frac{\eta t}{\rho d^2}$.

FLUJO DE COUETTE. (ETA=10.0; FI=0.0; Velocidad de la placa=0.18; Densidad=10000;). Tiempos de corrida= 10000, 50000, 150000, 350000 y 500000.

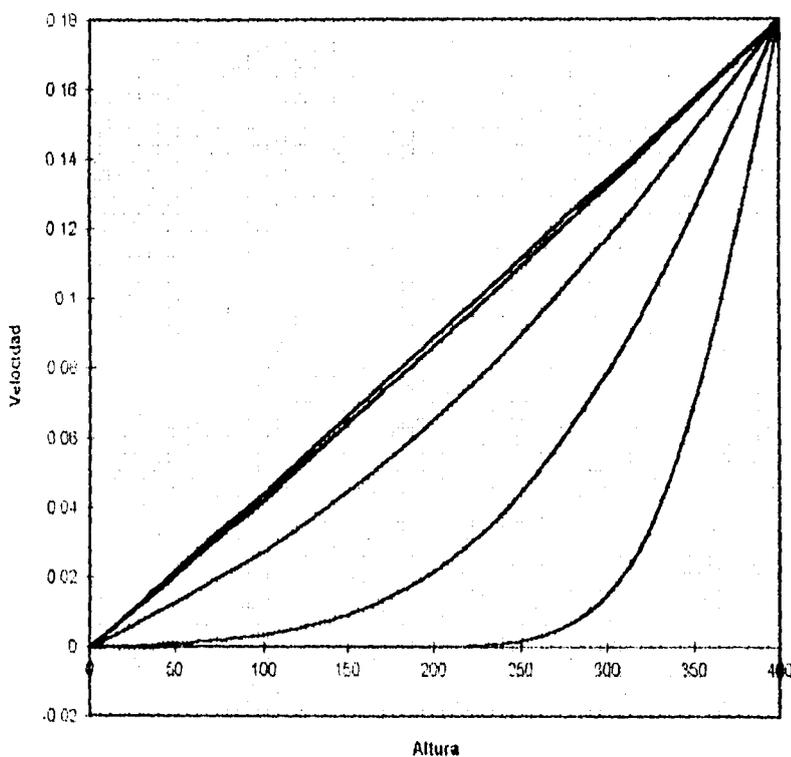


Figura 5.5.- Perfiles de velocidad resultantes de nuestra simulación con flujo de Couette

Para la simulación se utilizó una red de 1×400 dado que se trata de un problema unidimensional. Se consideran condiciones periódicas en los extremos del "canal". En el lado superior de la red ($y=400$) se coloca un obstáculo sólido donde la velocidad macroscópica se mantiene constante ("forzando" al sistema) a lo largo de toda la simulación (la componente horizontal es siempre igual a 0.18 mientras que la componente vertical es siempre nula). En el lado inferior ($y=1$) también colocamos un obstáculo sólido pero con ambas componentes de la velocidad macroscópica manteniéndose nulas en todo momento. Las funciones de distribución iniciales en las demás celdas son calculadas con una densidad de partículas igual a 10000 y con las dos componentes de la velocidad macroscópica iguales a cero.

Resultados de la simulación: En la figura 5.5 se muestran los perfiles de la velocidad obtenidos mediante la simulación a diferentes tiempos: 10000, 50000, 150000, 350000 y 500000 pasos de tiempo respectivamente. Como puede observarse, la evolución del sistema es exactamente la predicha al menos desde el punto de vista cualitativo.

Los resultados de las dos simulaciones descritas arriba nos permiten concluir que este modelo es un eficiente medio para estudiar flujos laminares (estacionarios y no-estacionarios) donde no se presenten efectos térmicos o de difusión, al menos desde el punto de vista cualitativo. Otro indudable mérito que hemos descubierto en nuestro modelo es que se comporta como un sistema "macroscópico" de manera casi perfecta: los resultados obtenidos varían suavemente en el espacio y el carácter discreto de la red sobre la que está modelado nuestro "gas" prácticamente desaparece en dichos resultados. No se han obtenido aún resultados semejantes a éstos en lo que respecta al comportamiento turbulento del fluido para valores grandes del número de Reynolds. En el modelo ARIANNA se obtuvo una buena aproximación al perfil logarítmico de la capa superficial realizando simulaciones del flujo de Couette aumentando progresivamente la velocidad de la placa de arriba. En nuestras simulaciones con el modelo Lattice Boltzmann hemos encontrado hasta el momento, incluso para velocidades grandes de la placa móvil (dentro de los límites permitidos por el modelo), un comportamiento predominantemente laminar. Hemos de señalar, sin embargo, que falta mucho trabajo por hacer en este aspecto y las posibilidades del modelo para simular flujos turbulentos está aún en estudio. Como señalamos anteriormente una de las posibles causas de las dificultades encontradas hasta el momento reside en la no-validez en nuestro modelo del principio de conservación de la energía (problema que esperamos corregir con la implementación de la extensión del modelo expuesta en el próximo capítulo, la cual ha sido desarrollada tan sólo en el terreno teórico).

En el capítulo 4 describimos las aplicaciones al problema de la reconstrucción del campo de vientos que se ha llevado a cabo con el modelo ARIANNA. Nuestro modelo Lattice Boltzmann está ya en condiciones para ser utilizado con este mismo propósito. El procedimiento a llevar a cabo sería completamente similar al realizado con el modelo ARIANNA. (Ver capítulo 4, parágrafo 4.4).

CAPÍTULO 6.

EXTENSIÓN DEL MODELO DE LATTICE BOLTZMANN PARA LA SIMULACIÓN DE FENÓMENOS TÉRMICOS.

Aunque no todas las consideraciones que estuvimos comentando en el capítulo anterior están presentes en el artículo de R.D. Kingdon et al (Referencia # 7) , el modelo que hemos expuesto hasta aquí (excepciones hecha de las simulaciones y sus resultados) está desarrollado en su parte fundamental en dicho artículo. Este modelo, como se mencionó en el capítulo 5, no toma en cuenta la conservación de la energía. Independientemente de cualesquiera condiciones, la energía interna por partícula (en una situación de equilibrio local) es siempre y en todas partes igual a 0.25. Esto significa que hay una conservación *global* de la energía interna. Sin embargo, las "interacciones moleculares" *no* conservan localmente la energía total. De esta manera, cada uno de los sitios se comporta ya sea como sumidero si la energía cinética promedio por partícula (correspondiente a las moléculas que entran al sitio en un momento dado) excede a 0.25, o como una fuente de energía si sucede lo contrario. Esto hace que el modelo sea inútil para la simulación de fenómenos en fluidos dentro de los cuáles las diferencias espaciales de la temperatura jueguen un rol importante. En particular no resulta útil para el estudio de fenómenos atmosféricos, que es lo que en última instancia nos proponemos abordar. Nuestro propósito será, pues, extender el modelo para que la energía interna por partícula sea uno más de los parámetros independientes (como la densidad ρ , la velocidad macroscópica \vec{u} y los coeficientes de viscosidad η y ζ) que determinen la nueva forma de la función de distribución de las velocidades "moleculares" f_y , después de las "interacciones moleculares". Otra motivación sumamente importante para llevar a cabo esta extensión es el estudiar si es posible, mediante la incorporación del principio de conservación de la energía, desarrollar simulaciones de flujos turbulentos en nuestro modelo.

Hay que remarcar que este modelo extendido ha sido desarrollado exclusivamente en el terreno teórico y que, por lo tanto, se presenta aquí sin haber sido aún implementado para el desarrollo de simulaciones de problemas de dinámica de fluidos.

Para poder llevar a cabo el objetivo que nos proponemos tenemos que permitir nuevos valores para las velocidades moleculares \vec{c}_i . En concreto, tendremos que añadir las velocidades necesarias para que en el siguiente paso de tiempo una molécula pueda transportarse al centro de alguno de sus *segundos vecinos* en la red.

Para poder trabajar mejor vamos a introducir la siguiente notación: a las velocidades moleculares correspondientes a viajes de las moléculas a primeros vecinos después de un paso de tiempo las denotaremos por \vec{c}_i ($i=1,\dots,6$) mientras que a las velocidades moleculares correspondientes a viajes de las moléculas a segundos vecinos después de un paso de tiempo los denotaremos por \vec{c}_k ($k=7,\dots,12$). En la figura 6.1 se ilustra la situación.

Hay que añadir que (además de las velocidades que aparecen en la figura 6.1) también está permitido que las "moléculas" tengan la velocidad $\vec{c}_0 = 0$.

Las velocidades \vec{c}_k ($k=7,\dots,12$) tienen todas la misma magnitud. Es fácil deducir que si la velocidad \vec{c}_i ($i=1,\dots,6$) es unitaria y es precisamente la necesaria para llegar al centro del polígono vecino en una unidad de tiempo entonces la correspondiente magnitud de las \vec{c}_k es $L = \sqrt{3}$. Es claro que las velocidades

\vec{c}_k son precisamente las \vec{c}_i , sólo que rotadas por un ángulo $= \frac{2\pi}{12} = \frac{\pi}{6}$ y multiplicadas por $L = \sqrt{3}$.

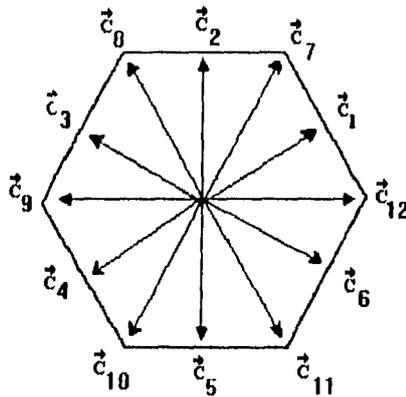


Figura 6.1.-Esquema de las velocidades permitidas a las partículas en el modelo Lattice Boltzmann extendido. Además de las velocidades que aparecen en la figura, las partículas pueden tener la velocidad $\vec{c}_0 = 0$.

En el párrafo 5.2 demostramos que un grupo de seis velocidades de la forma:

$$\vec{c}_i = L \cos\left(\frac{i2\pi}{6}\right) \hat{x} + L \sin\left(\frac{i2\pi}{6}\right) \hat{y} \quad (i=1, \dots, 6)$$

cumplan con una serie de propiedades (ecuaciones 5.1a-d) que consideramos necesarias para la isotropía del problema. Las velocidades \vec{c}_k son de este tipo pero rotadas por $\frac{\pi}{6}$. Veamos, sin embargo, que las propiedades no dejan de cumplirse porque:

si $\theta = \frac{2\pi}{N}$ y α es un ángulo constante entonces

$$\sum_{i=1}^6 \cos(i\theta + \alpha) = 0;$$

$$\sum_{i=1}^6 \sin(i\theta + \alpha) = 0;$$

$$\sum_{i=1}^6 \cos^2(i\theta + \alpha) = \sum_{i=1}^6 \cos^2(i\theta);$$

$$\sum_{i=1}^6 \sin^2(i\theta + \alpha) = \sum_{i=1}^6 \sin^2(i\theta);$$

etcetera...

Por lo tanto podemos concluir que la forma geométrica del modelo extendido también cumple con las propiedades de isotropía. Escribamos estas propiedades explícitamente para nuestro caso concreto:

$$\sum_{i=1}^6 c_i^a c_i^b = 3\delta_{ab}; \quad \sum_{i=1}^6 c_i^a c_i^b c_i^c c_i^d = \frac{3}{4}(\delta_{ab} \delta_{cd} + \delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc});$$

$$\sum_{k=7}^{12} c_k^a c_k^b = 9\delta_{ab}; \quad \sum_{k=7}^{12} c_k^a c_k^b c_k^c c_k^d = \frac{9 \times 3}{4}(\delta_{ab} \delta_{cd} + \delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc});$$

$$\sum_{i=1}^6 c_i^a = \sum_{k=7}^{12} c_k^a = \sum_{i=1}^6 c_i^a c_i^b = \sum_{k=7}^{12} c_k^a c_k^b = 0; \quad (6.1)$$

Vamos ahora a calcular la función de distribución correspondiente a una situación de equilibrio local \bar{f}_i con una densidad $\rho = \sum_{i=0}^{12} \bar{f}_i$, una velocidad macroscópica $\bar{u} = \sum_{i=0}^{12} \bar{c}_i \bar{n}_i$ y una energía interna por partícula $\varepsilon = \sum_{i=0}^{12} \frac{(\bar{c}_i - \bar{u})^2}{2} \bar{n}_i$

(Como antes, \bar{n}_i es la función de distribución normalizada: $\bar{n}_i = \frac{\bar{f}_i}{\rho}$).

Mediante un razonamiento absolutamente similar al llevado a cabo en el capítulo 5, podemos deducir que:

si $Z = \bar{n}_0(0, \varepsilon) + \bar{n}_1(0, \varepsilon) \sum_{i=1}^6 \exp\{\bar{\gamma}(\bar{u}, \varepsilon) \cdot \bar{c}_i\} + \bar{n}_k(0, \varepsilon) \sum_{k=7}^{12} \exp\{\bar{\gamma}(\bar{u}, \varepsilon) \cdot \bar{c}_k\}$ entonces:

$$\bar{n}_i(\bar{u}, \varepsilon) = \frac{\bar{n}_i(0, \varepsilon)}{Z} \exp\{\bar{\gamma}(\bar{u}, \varepsilon) \cdot \bar{c}_i\} \quad (i = 1, \dots, 6)$$

$$\bar{n}_k(\bar{u}, \varepsilon) = \frac{\bar{n}_k(0, \varepsilon)}{Z} \exp\{\bar{\gamma}(\bar{u}, \varepsilon) \cdot \bar{c}_k\} \quad (k = 7, \dots, 12) \quad (6.2)$$

$$\bar{n}_0(\bar{u}, \varepsilon) = \frac{\bar{n}_0(0, \varepsilon)}{Z};$$

(Aquí $\bar{n}_i \equiv \bar{n}_i(0, \varepsilon)$ es el mismo para toda $i = 1, \dots, 6$ mientras que $\bar{n}_k \equiv \bar{n}_k(0, \varepsilon)$ es el mismo para

para $k=7, \dots, 12$. También denotaremos $\overline{n}_i(0, \varepsilon)$ por \overline{n}_i .

Mediante la aproximación $|\vec{y}(\vec{n}, \varepsilon) \cdot \vec{c}_i| \ll 1$ podemos escribir:

$$\exp\{\vec{y} \cdot \vec{c}_i\} \cong 1 + (\vec{y} \cdot \vec{c}_i) + \frac{(\vec{y} \cdot \vec{c}_i)^2}{2}$$

$$\Rightarrow Z \cong (\overline{n}_0 + 6\overline{n}_1 + 6\overline{n}_k) + \overline{n}_1 \frac{\gamma^a \gamma^b}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_i^\alpha c_i^\beta + \overline{n}_k \frac{\gamma^a \gamma^b}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_k^\alpha c_k^\beta = 1 + \frac{3}{2} \{\overline{n}_1 + 3\overline{n}_k\} \gamma^2$$

Y finalmente podemos aproximar la función de distribución normalizada como:

$$\overline{n}_i(\vec{n}, \varepsilon) = \overline{n}_i \left[1 + (\vec{y} \cdot \vec{c}_i) + \frac{(\vec{y} \cdot \vec{c}_i)^2}{2} - \frac{3}{2} \{\overline{n}_1 + 3\overline{n}_k\} \gamma^2 \right] \quad (i=1, \dots, 6)$$

$$\overline{n}_k(\vec{n}, \varepsilon) = \overline{n}_k \left[1 + (\vec{y} \cdot \vec{c}_i) + \frac{(\vec{y} \cdot \vec{c}_i)^2}{2} - \frac{3}{2} \{\overline{n}_1 + 3\overline{n}_k\} \gamma^2 \right] \quad (k=7, \dots, 12)$$

$$\overline{n}_0(\vec{n}, \varepsilon) = \overline{n}_0 \left[1 - \frac{3}{2} \{\overline{n}_1 + 3\overline{n}_k\} \gamma^2 \right];$$

Utilizando el hecho de que debe ocurrir que cuando $\vec{n} = 0$ el promedio de c_i^2 valga 2ε se sigue que:

$$2\varepsilon = \sum_{i=1}^6 \overline{n}_i(0, \varepsilon) + \sum_{k=7}^{12} 3\overline{n}_k(0, \varepsilon) = 6\{\overline{n}_1 + 3\overline{n}_k\}. \quad (6.3)$$

Y con este resultado expresamos $\overline{n}_i(\vec{n}, \varepsilon)$ de la siguiente manera:

$$\overline{n}_i(\vec{n}, \varepsilon) = \overline{n}_i \left[1 + (\vec{y} \cdot \vec{c}_i) + \frac{(\vec{y} \cdot \vec{c}_i)^2}{2} - \frac{\gamma^2 \varepsilon}{2} \right] \quad (i=1, \dots, 6)$$

$$\overline{n}_k(\vec{n}, \varepsilon) = \overline{n}_k \left[1 + (\vec{y} \cdot \vec{c}_i) + \frac{(\vec{y} \cdot \vec{c}_i)^2}{2} - \frac{\gamma^2 \varepsilon}{2} \right] \quad (k=7, \dots, 12)$$

$$\overline{n}_0(\vec{n}, \varepsilon) = \overline{n}_0 \left[1 - \frac{\gamma^2 \varepsilon}{2} \right]; \quad (6.4)$$

Vamos ahora a imponerle a la función una serie de condiciones:

(1) Necesitamos que el promedio de las velocidades moléculares sea igual a la velocidad hidrodinámica \bar{u} . Utilizando las propiedades de isotropía (6.1):

$$\sum_{i=1}^6 c_i^\beta \bar{n}_i(\bar{u}, \varepsilon) = \bar{n}_i \gamma^a \sum_{i=1}^6 c_i^a c_i^\beta = 3\bar{n}_i \gamma^\beta ;$$

$$\sum_{k=7}^{12} c_k^\beta \bar{n}_k(\bar{u}, \varepsilon) = \bar{n}_k \gamma^a \sum_{k=7}^{12} c_k^a c_k^\beta = 9\bar{n}_k \gamma^\beta ;$$

Lo que implica que $\langle \vec{c}_i \rangle = (3\bar{n}_i + 9\bar{n}_k) \vec{\gamma} = \varepsilon \vec{\gamma}$. Por lo tanto, para que $\langle \vec{c}_i \rangle$ nos dé la velocidad macroscópica \bar{u} es necesario que

$$\vec{\gamma}(\bar{u}, \varepsilon) = \frac{\bar{u}}{\varepsilon} \quad (6.5)$$

(2) Necesitamos que el promedio del cuadrado de la velocidad molecular relativa al centro local de masas, $\langle (\vec{c}_i - \bar{u})^2 \rangle$ sea igual a 2 veces la energía interna por partícula ε y que sea, por tanto, un invariante

de Galileo.

$$\text{Veamos: } \langle (\vec{c}_i - \bar{u})^2 \rangle = \langle c_i^2 \rangle - u^2$$

$$\text{Pero } \langle c_i^2 \rangle = \sum_{i=1}^6 \bar{n}_i(\bar{u}, \varepsilon) + 3 \sum_{k=7}^{12} \bar{n}_k(\bar{u}, \varepsilon) = \dots$$

$$\dots = \bar{n}_i \left\{ 6 \left(1 - \frac{\gamma^2 \varepsilon}{2} \right) + \frac{\gamma^a \gamma^\beta}{2} \sum_{i=1}^6 c_i^a c_i^\beta \right\} + 3\bar{n}_k \left\{ 6 \left(1 - \frac{\gamma^2 \varepsilon}{2} \right) + \frac{\gamma^a \gamma^\beta}{2} \sum_{k=7}^{12} c_k^a c_k^\beta \right\}$$

$$\dots = 2\varepsilon - u^2 + \frac{u^2}{2\varepsilon} + 9\bar{n}_k \frac{u^2}{\varepsilon^2}$$

$$\Rightarrow \langle (\vec{c}_i - \bar{u})^2 \rangle = 2\varepsilon - 2u^2 + \frac{u^2}{2\varepsilon} + 9\bar{n}_k \frac{u^2}{\varepsilon^2}$$

(En este desarrollo se hizo uso de la ecuación 6.3).

Para que $\langle (\vec{c}_i - \bar{u})^2 \rangle$ valga 2ε independientemente de la velocidad macroscópica particular es necesario que $-2 + \frac{1}{2\varepsilon} + \frac{9\bar{n}_k}{\varepsilon^2} = 0$, lo cual a su vez implica que:

$$\bar{n}_k(0, \varepsilon) = \frac{(4\varepsilon^2 - \varepsilon)}{18} \quad (6.6)$$

$$\Rightarrow \bar{n}_i(0, \varepsilon) = \frac{\varepsilon}{3} - 3\bar{n}_k = \frac{(3\varepsilon - 4\varepsilon^2)}{6} \quad (6.7)$$

Finalmente, como $\bar{n}_i(0, \varepsilon)$ es la función de distribución normalizada debe ocurrir que:

$$\begin{aligned} \bar{n}_0(0, \varepsilon) + 6\bar{n}_i(0, \varepsilon) + 6\bar{n}_k(0, \varepsilon) &= 1 \\ \Rightarrow \bar{n}_0(0, \varepsilon) &= 1 - 6[\bar{n}_i + \bar{n}_k] = \frac{(8\varepsilon^2 - 8\varepsilon + 3)}{3} \end{aligned} \quad (6.8)$$

Utilizando las ecuaciones 6.4, 6.5, 6.6 y 6.7 podemos darle a la función de distribución una forma definitiva:

$$\begin{aligned} \bar{n}_i(\bar{u}, \varepsilon) &= \frac{(3\varepsilon - 4\varepsilon^2)}{6} \left[1 + \frac{(\bar{u} \cdot \bar{c}_i)}{\varepsilon} + \frac{(\bar{u} \cdot \bar{c}_i)^2}{2\varepsilon^2} - \frac{u^2}{2\varepsilon} \right]; \quad (i = 1, \dots, 6) \\ \bar{n}_k(\bar{u}, \varepsilon) &= \frac{(4\varepsilon^2 - \varepsilon)}{18} \left[1 + \frac{(\bar{u} \cdot \bar{c}_i)}{\varepsilon} + \frac{(\bar{u} \cdot \bar{c}_i)^2}{2\varepsilon^2} - \frac{u^2}{2\varepsilon} \right]; \quad (k = 7, \dots, 12) \\ \bar{n}_0(\bar{u}, \varepsilon) &= \frac{(8\varepsilon^2 - 8\varepsilon + 3)}{3} \left[1 - \frac{u^2}{2\varepsilon} \right]; \end{aligned} \quad (6.9)$$

Antes de escribir el término "viscoso" de la función de distribución δf_i , vamos a discutir diversas cuestiones acerca de la expresión 6.9:

(α) Es fácil comprobar que la fórmula 6.8 satisface las propiedades de isotropía e invariancia galileana del correspondiente tensor de esfuerzos.

$$\begin{aligned} \langle (c_i^{(1)})^2 \rangle &= \sum_{i=1}^6 (c_i^{(1)})^2 \bar{n}_i(\bar{u}, \varepsilon) + \sum_{k=7}^{12} (c_i^{(1)})^2 \bar{n}_k(\bar{u}, \varepsilon) \\ \Rightarrow \langle (c_i^{(1)})^2 \rangle &= \left(1 - \frac{u^2}{2\varepsilon}\right) \varepsilon + \frac{3}{4} \frac{(u^{(1)})^2}{\varepsilon^2} [\bar{n}_i + 9\bar{n}_k] + \frac{3}{8} \frac{u^2}{\varepsilon^2} [\bar{n}_i + 9\bar{n}_k] \end{aligned}$$

De la misma manera,

$$\langle (c_i^{(2)})^2 \rangle = \left(1 - \frac{u^2}{2\varepsilon}\right) \varepsilon + \frac{3}{4} \frac{(u^{(2)})^2}{\varepsilon^2} [\bar{n}_i + 9\bar{n}_k] + \frac{3}{8} \frac{u^2}{\varepsilon^2} [\bar{n}_i + 9\bar{n}_k]$$

Como $\bar{n}_i + 9n_k = \frac{(3\varepsilon - 4\varepsilon^2)}{6} + 9 \frac{(4\varepsilon^2 - \varepsilon)}{18} - \frac{4\varepsilon^2}{3}$ se sigue que:

$$\begin{aligned} \langle (c_i^{(1)})^2 \rangle - \langle (c_i^{(2)})^2 \rangle &= (u^{(1)})^2 - (u^{(2)})^2 \\ \Rightarrow \langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})^2 \rangle &= \langle (c_i^{(2)} - u^{(2)})^2 \rangle \end{aligned}$$

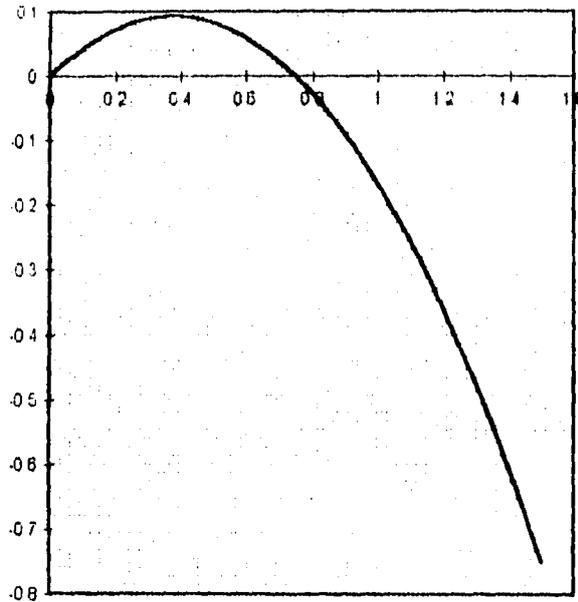


Figura 6.2.- Gráfica de $\bar{n}_i(0, \varepsilon) = \frac{(3\varepsilon - 4\varepsilon^2)}{6}$

Falta ver que $\langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})(c_i^{(2)} - u^{(2)}) \rangle = 0$ lo cual demostramos a continuación:

$$\langle c_i^{(1)} c_i^{(2)} \rangle = \sum_{i=1}^6 c_i^{(1)} c_i^{(2)} \bar{n}_i(\bar{u}, \varepsilon) + \sum_{i=1}^6 c_k^{(1)} c_k^{(2)} \bar{n}_k(\bar{u}, \varepsilon) = u^{(1)} u^{(2)}$$

$$\Rightarrow \langle (c_i^{(1)} - u^{(1)})(c_i^{(2)} - u^{(2)}) \rangle = 0$$

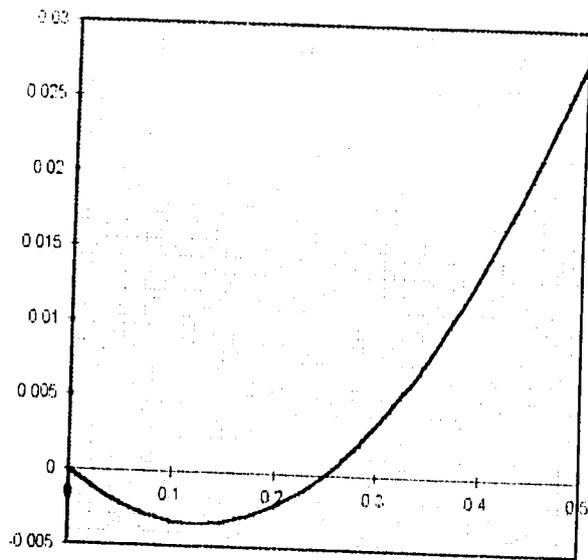
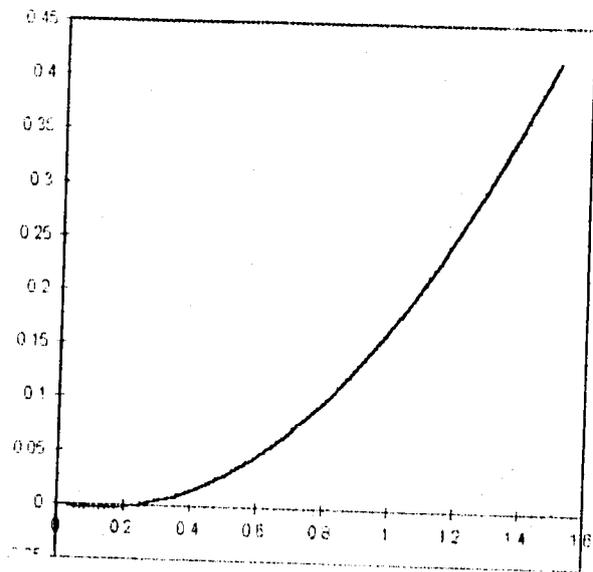


Figura 6.4.- Arriba, gráfica de la función $\bar{n}_k(0, \varepsilon) = \frac{(4\varepsilon^2 - \varepsilon)}{18}$. Abajo, detalle de esta misma gráfica.

(β) Como vimos en el parágrafo 4.3.1 (Comentario C) es necesario asegurarse de que $\bar{n}_i(\bar{n}, \varepsilon) \geq 0$ para toda \bar{n} y toda ε . Aseguremonos de esto primero en el caso $\bar{n} = 0$.

En la figura 6.2 presentamos una gráfica de $\bar{n}_i(0, \varepsilon) = \frac{(3\varepsilon - 4\varepsilon^2)}{6}$ como función de la energía cinética promedio por partícula ε . En ella se aprecia claramente que no es posible considerar valores de ε mayores que $\frac{3}{4}$ porque si lo hicieramos la fórmula 6.9 nos daría un valor negativo para $\bar{n}_i(0, \varepsilon)$.

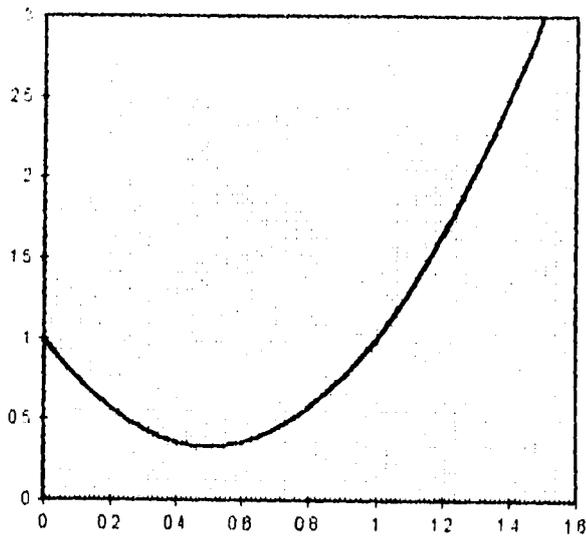


Figura 6.4.- Gráfica de la función $\bar{n}_0(0, \varepsilon) = \frac{(8\varepsilon^2 - 8\varepsilon + 3)}{3}$.

Mediante un método similar podemos encontrar las gráficas aproximadas de $\bar{n}_k(0, \varepsilon) = \frac{(4\varepsilon^2 - \varepsilon)}{18}$ y de $\bar{n}_3(0, \varepsilon) = \frac{(8\varepsilon^2 - 8\varepsilon + 3)}{3}$. Dichas gráficas están representadas respectivamente en las figuras 6.3 y 6.4.

Como se observa tampoco son permisibles los valores de \mathcal{E} menores que $\frac{1}{4}$ porque $\bar{n}_k(0, \mathcal{E})$ se vuelve negativa. Afortunadamente, $\bar{n}_i(0, \mathcal{E})$ no nos da problemas.

La conclusión es que aunque en principio la energía interna promedio por partícula cuando $\bar{u} = 0$ podría variar en el intervalo $\left[0, \frac{3}{2}\right]$, en la realidad tenemos que forzar al sistema para que \mathcal{E} varíe estrictamente dentro del intervalo $\left[\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right]$ si queremos que las expresiones 6.9 tengan algún significado. Esto nos plantea un problema porque el "flujo libre" en nuestra red hexagonal podría provocar que en algún polígono en algún instante tuvieramos una energía \mathcal{E} fuera del intervalo $\left[\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right]$. Tenemos la esperanza de que, bajo un rango amplio de condiciones iniciales y de frontera adecuadas, no se presentará este problema en nuestras simulaciones. Si esta esperanza está justificada o no tendría que resolverse entonces en el terreno empírico.

Ahora debemos comprobar que si $\left|\bar{v} \cdot \bar{c}_i\right| = \frac{|\bar{u} \cdot \bar{c}_i|}{\mathcal{E}} \ll 1$ (como supusimos para obtener nuestras ecuaciones 6.9) y si además la energía \mathcal{E} se mantiene dentro del intervalo $\left[\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right]$ entonces las $\bar{n}_i(\bar{u}, \mathcal{E})$ ($i=1, \dots, 12$) son todas ellas estrictamente positivas independientemente del valor particular de la velocidad macroscópica \bar{u} .

Pero antes que esto observemos que si es cierto que $\frac{|\bar{u} \cdot \bar{c}_i|}{\mathcal{E}} \ll 1$ para toda \bar{u} y toda \bar{c}_i , entonces es conveniente exigir $\frac{|\bar{u}|}{\mathcal{E}} \sqrt{3} \ll 1$ ya que $\sqrt{3}$ es el valor máximo que puede tener $|\bar{c}_i \cdot \cos \alpha|$ (donde α es el ángulo entre \bar{u} y \bar{c}_i). De esto se sigue que $\frac{|\bar{u}|}{\mathcal{E}} < \frac{1}{\sqrt{3}}$. Como \mathcal{E} está en $\left[\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right]$, el valor de la velocidad macroscópica \bar{u} debe ser en todo momento menor (en valor absoluto) que $\frac{\sqrt{3}}{4}$. (Esto involucra una dificultad semejante a la expresada arriba para la energía: ¿Cómo hacemos para que efectivamente se mantenga "suficientemente pequeña" la velocidad macroscópica durante el "flujo libre" en la red?).

Hagamos la suposición de que $|\bar{c}_i \cdot \cos \alpha| < \frac{\sqrt{3}}{2}$

Entonces, por un lado, $\frac{|\bar{u} \cdot \bar{c}_i|}{\mathcal{E}} = \frac{|\bar{u}| |\bar{c}_i \cdot \cos \alpha|}{\mathcal{E}} < \frac{|\bar{u}| \sqrt{3}}{\mathcal{E} \cdot 2} < \frac{1}{2}$.

Y, por el otro, $\left| \frac{u^2}{2\varepsilon} \right| = \frac{|\vec{u}|^2}{2\varepsilon} < \left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{3}} \right)^2 \frac{1}{2\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{6} < \frac{3}{4} \left(\frac{1}{6} \right) = \frac{1}{8}$

De donde $1 + \frac{(\vec{n} \cdot \vec{c}_i)}{\varepsilon} + \frac{(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2}{2\varepsilon^2} - \frac{u^2}{2\varepsilon} > 0$ porque los términos que pueden ser negativos, $\frac{(\vec{n} \cdot \vec{c}_i)}{\varepsilon}$ y $-\frac{u^2}{2\varepsilon}$, son tales que sus valores absolutos sumados nos dan menos que $\frac{5}{8}$.

Si, por el contrario, suponemos que $|\vec{c}_i \cos \alpha| > \frac{\sqrt{3}}{2}$ se sigue que:

$$\frac{1}{|\vec{c}_i \cos \alpha|^2} < \frac{4}{3} \Rightarrow \frac{\left(\frac{u^2/2\varepsilon}{(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2 / 2\varepsilon^2} \right)}{|\vec{c}_i \cos \alpha|^2} = \frac{\varepsilon}{|\vec{c}_i \cos \alpha|^2} < \frac{4}{3} \varepsilon < 1$$

$$\Rightarrow \frac{u^2}{2\varepsilon} < \frac{(\vec{n} \cdot \vec{c}_i)^2}{2\varepsilon^2}$$

Además $\frac{|\vec{u} \cdot \vec{c}_i|}{\varepsilon} < 1$. Por lo tanto se sigue que $1 + \frac{(\vec{n} \cdot \vec{c}_i)}{\varepsilon} + \frac{(\vec{u} \cdot \vec{c}_i)^2}{2\varepsilon^2} - \frac{u^2}{2\varepsilon} > 0$ lo cual implica claramente que las $\bar{n}_i(\vec{n}, \varepsilon)$ son estrictamente positivas. En el caso de $\bar{n}_0(\vec{n}, \varepsilon)$ es más claro aún porque:

$$\frac{u^2}{2\varepsilon} < \frac{|\vec{u}|}{2\sqrt{3}} < \frac{\sqrt{3}}{8\sqrt{3}} = \frac{1}{8}$$

$$\Rightarrow 1 - \frac{u^2}{2\varepsilon} > 0 \Rightarrow \bar{n}_0(\vec{n}, \varepsilon) \geq 0,$$

lo cual será cierto siempre que se cumplan las condiciones restrictivas sobre ε y sobre $|\vec{u}|$.

(γ) En general, el vector de flujo de energía puede escribirse como:

$$\left\langle \frac{c_i^2}{2} \vec{c}_i \right\rangle = \vec{n} \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) + u^\beta \left\langle (c_i^\beta - u^\beta) (\vec{c}_i - \vec{u}) \right\rangle + \left\langle \frac{(\vec{c}_i - \vec{u})^2}{2} (\vec{c}_i - \vec{u}) \right\rangle \quad (6.9)$$

El primer término, $\frac{u^2 \bar{u}}{2}$, representa el flujo de la energía cinética macroscópica. El segundo término, $\varepsilon \bar{u}$, representa el flujo de energía interna debido al movimiento macroscópico del fluido, lo que suele denominarse "flujo convectivo de energía". El tercer término, $u^a \langle (c_i^a - u^a) (\bar{c}_i - \bar{u}) \rangle$, es un flujo de energía molecular relacionado con lo que macroscópicamente se observa como el trabajo realizado por unas partes del fluido sobre otras. Finalmente, el cuarto término es el flujo de calor $\left\langle \frac{(\bar{c}_i - \bar{u})^2}{2} (\bar{c}_i - \bar{u}) \right\rangle$.

De acuerdo a las ecuaciones 6.8, el flujo de energía en nuestro modelo es:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle c_i^2 \bar{c}_i \rangle &= \sum_{i=1}^n \frac{c_i^2}{2} c_i^a \bar{n}_i + \sum_{k=1}^{12} \frac{c_k^2}{2} c_i^a \bar{n}_k \\ &= \frac{3}{2\varepsilon} u^a (\bar{n}_i + 9\bar{n}_k) = 2\varepsilon u^a \end{aligned}$$

De donde, el flujo de calor queda como:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{(\bar{c}_i - \bar{u})^2}{2} (c_i^a - u^a) \right\rangle &= 2\varepsilon u^a - \frac{u^2}{2} u^a - \varepsilon u^a - u^a \langle (c_i^a - u^a) (c_i^a - u^a) \rangle \\ \Rightarrow \left\langle \frac{(\bar{c}_i - \bar{u})^2}{2} (c_i^a - u^a) \right\rangle &= -\frac{u^2}{2} u^a \end{aligned} \quad (6.10)$$

Esta última relación nos introduce un problema. Como explicamos en el capítulo 5 cualquier función de las velocidades moleculares relativas al centro local de masas (y el flujo de calor es una función de este tipo) debería ser un invariante de Galileo. Pero como se ve en la fórmula 6.10 resulta que en nuestro modelo el flujo de calor sí es dependiente del sistema de referencia inercial elegido. Esta podría no ser una dificultad demasiado grave: Hemos estado suponiendo $|\bar{u}| \ll \frac{\sqrt{3}}{4}$ y el flujo de calor es del orden de magnitud de $|\bar{u}|^3$ por lo que podemos esperar que sea suficientemente pequeño para no afectar los resultados de nuestras simulaciones. En tal caso nuestro modelo serviría para simular fenómenos adiabáticos; esto es, fenómenos en los que el intercambio de calor no juegue un papel relevante. Podría ser útil fundamentalmente para estudiar el fenómeno de la convección.

Utilizando las ecuaciones 6.9 y 6.10 podemos escribir el flujo de energía de la siguiente manera:

$$\left\langle \frac{c_i^2}{2} \bar{c}_i \right\rangle = \varepsilon \bar{u} + u^a \langle (c_i^a - u^a) (\bar{c}_i - \bar{u}) \rangle \quad (6.11)$$

Una cuestión interesante acerca de la expresión 6.11 es que el término del flujo de la energía cinética macroscópica y el flujo de calor son exactamente iguales pero de signo contrario, desapareciendo

ambos de la expresión final para el flujo de energía. Los únicos términos que influyen entonces sobre el flujo de energía son el término de "trabajo" y el término de "flujo convectivo".

SOBRE EL TÉRMINO VISCOSO.

Volvamos a proponer una forma del término viscoso de la función de distribución similar a la propuesta en el modelo Lattice Boltzmann sin efectos térmicos analizado en el capítulo 5. De esta manera δf_i , el término viscoso de la función de distribución, puede escribirse como:

$$\begin{aligned}\delta f_i &= A(\nabla^\gamma u^\gamma) + Bc_i^\alpha c_i^\beta (\nabla^\beta u^\alpha); \\ \delta f_0 &= C\nabla^\gamma u^\gamma;\end{aligned}\tag{6.12}$$

donde A, B y C son constantes a determinar.

El término viscoso debe cumplir una serie de restricciones (a partir de las cuales podemos determinar los valores de A, B y C).

(1) En primer lugar puesto que $\sum_{i=0}^{12} \bar{f}_i = \sum_{i=0}^{12} \rho \bar{n}_i = \rho$ y, por otro lado, $\sum_{i=0}^{12} (\bar{f}_i + \delta f_i) = \rho$ se sigue que el término viscoso debe ser sólo una perturbación del término de equilibrio que sólo modifique el valor de la función de distribución total para cada velocidad admisible pero no el número total de partículas en el sitio en cuestión. Es, pues, necesario que $\sum_{i=0}^{12} \delta f_i = 0$.

$$\begin{aligned}\text{Pero } \sum_{i=0}^{12} \delta f_i &= C\nabla^\gamma u^\gamma + 12A(\nabla^\gamma u^\gamma) + B\nabla^\beta u^\alpha \left(\sum_{i=1}^6 c_i^\alpha c_i^\beta + \sum_{i=7}^{12} c_i^\alpha c_i^\beta \right) \\ &= (C + 12A + 12B)\nabla^\gamma u^\gamma \\ \Rightarrow \quad 12A + 12B + C &= 0\end{aligned}\tag{6.13}$$

(2) También el incremento en la velocidad macroscópica introducido por el término viscoso debe ser nulo (Es decir, $\sum_{i=0}^{12} c_i^\alpha \delta f_i = 0$).

Pero $A(\nabla^\gamma u^\gamma) \left[\sum_{i=1}^6 c_i^\alpha + \sum_{i=7}^{12} c_i^\alpha \right] + B(\nabla^\beta u^\gamma) \left[\sum_{i=1}^6 c_i^\alpha c_i^\beta c_i^\gamma + \sum_{i=7}^{12} c_i^\alpha c_i^\beta c_i^\gamma \right] = 0$ lo cual es siempre cierto independientemente de las constantes A, B y C.

(3) Queremos finalmente que el tensor de esfuerzos tenga precisamente la forma necesaria para que se cumplan las ecuaciones de Navier-Stokes. Necesitamos entonces que:

$$\begin{aligned}-\sum_{i=0}^{12} (c_i^\alpha - u^\alpha)(c_i^\beta - u^\beta) \delta f_i &= \eta \left(\nabla^\alpha u^\beta + \nabla^\beta u^\alpha - \delta_{\alpha\beta} \nabla^\gamma u^\gamma \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \nabla^\gamma u^\gamma \\ \text{pero } -\sum_{i=0}^{12} (c_i^\alpha - u^\alpha)(c_i^\beta - u^\beta) \delta f_i &= -\sum_{i=0}^{12} c_i^\alpha c_i^\beta \delta f_i\end{aligned}$$

$$\dots = -12A(\nabla^\nu u^\nu)\delta_{\alpha\mu} - \frac{15}{2}B(\nabla^\nu u^\nu)\delta_{\alpha\mu} - \frac{15}{2}B[\nabla^\alpha u^\mu + \nabla^\mu u^\alpha]$$

$$\Rightarrow \quad \eta = -\frac{15}{2}B \quad \Rightarrow \quad B = -\frac{2}{15}\eta$$

$$\text{Como } -\eta + \zeta = -12A - \frac{15}{2}B = -12A + \eta \quad \Rightarrow \quad A = \frac{(2\eta - \zeta)}{12}$$

$$\text{Y, por 6.13, } C = -12(A + B) = \zeta - \frac{2}{5}\eta$$

Estos son los valores de A, B y C que se deben utilizar en el modelo. Un análisis más detallado de las implicaciones de este término viscoso (por ejemplo, cómo es se modifica el vector flujo de calor debido a la introducción de este término) sería, desde luego, de gran importancia pero no se lleva a cabo en este trabajo de tesis.

RESUMEN DEL MODELO. CONCLUSIONES.

De manera análoga a como se hizo en el capítulo anterior, vamos a enumerar todos los pasos del algoritmo que realiza el modelo extendido en cada paso de tiempo.

(1) Utilizando los datos del paso de tiempo anterior se calculan los valores de la densidad de partículas $\rho(\vec{r}, t)$, de la velocidad macroscópica $\vec{u}(\vec{r}, t)$ y de la densidad de energía $E(\vec{r}, t)$ en cada hexágono de la red. Este cálculo se realiza utilizando las ecuaciones 5.2 y 5.3.

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r}, t) &= \sum_{i=0}^{12} f_i(\vec{r}, t); \\ \rho(\vec{r}, t)\vec{u}(\vec{r}, t) &= \sum_{i=0}^{12} \vec{c}_i f_i(\vec{r}, t); \\ \rho(\vec{r}, t)E(\vec{r}, t) &= \sum_{i=0}^{12} \frac{c_i^2}{2} f_i(\vec{r}, t); \end{aligned}$$

(2) Se calculan los gradientes de la velocidad macroscópica mediante la fórmula 5.10 :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_x}{\partial x}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{3} \sum_{i=0}^{12} c_i^{(1)} [u_x(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - u_x(\vec{r}, t)]; \\ \frac{\partial u_x}{\partial y}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{3} \sum_{i=0}^{12} c_i^{(2)} [u_x(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - u_x(\vec{r}, t)]; \\ \frac{\partial u_y}{\partial x}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{3} \sum_{i=0}^{12} c_i^{(1)} [u_y(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - u_y(\vec{r}, t)]; \\ \frac{\partial u_y}{\partial y}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{3} \sum_{i=0}^{12} c_i^{(2)} [u_y(\vec{r} + \vec{c}_i, t) - u_y(\vec{r}, t)]; \end{aligned}$$

(3) se calculan las nuevas funciones $f_i(\vec{r}, t)$ y $f_o(\vec{r}, t)$ (resultante de las "interacciones moleculares" dentro de cada polígono) utilizando las ecuaciones 6.9 y 6.12

$$f_i(\vec{r}, t) = \rho \frac{(3\varepsilon - 4\varepsilon^2)}{6} \left[1 + \frac{1}{\varepsilon} (c_i^{(1)} u_x + c_i^{(2)} u_y) + \frac{1}{2\varepsilon^2} (c_i^{(1)} u_x + c_i^{(2)} u_y)^2 - \frac{1}{2\varepsilon} (u_x^2 + u_y^2) \right] + \frac{1}{12} (2\eta - \zeta) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) - \frac{2}{15} \eta \left(c_{i,x}^2 \frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{i,y}^2 \frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{i,x} c_{i,y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right);$$

(i=1,...,6)

$$f_k(\vec{r}, t) = \rho \frac{(4\varepsilon^2 - \varepsilon)}{18} \left[1 + \frac{1}{\varepsilon} (c_k^{(1)} u_x + c_k^{(2)} u_y) + \frac{1}{2\varepsilon^2} (c_k^{(1)} u_x + c_k^{(2)} u_y)^2 - \frac{1}{2\varepsilon} (u_x^2 + u_y^2) \right] + \frac{1}{12} (2\eta - \zeta) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) - \frac{2}{15} \eta \left(c_{k,x}^2 \frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{k,y}^2 \frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{k,x} c_{k,y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right);$$

(k=7,...,12)

$$f_o(\vec{r}, t) = \rho \frac{(8\varepsilon^2 - 8\varepsilon + 3)}{3} \left[1 - \frac{1}{2\varepsilon} (u_x^2 + u_y^2) \right] + \left(\zeta - \frac{2}{5} \eta \right) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right);$$

(4) Una vez calculadas las funciones de distribución $f_i(\vec{r}, t)$ se permite que las moléculas se trasladen al centro de alguno de los polígonos vecinos (dependiendo de cuál sea su velocidad molecular \vec{c}_i) en el siguiente paso de tiempo.

El modelo que hemos presentado en este capítulo no ha sido todavía implementado computacionalmente. Nos parece, sin embargo, muy importante destacar que la energía ahora sí se conserva y además juega un rol importante en la dinámica del modelo. Es de esperar, por lo tanto, que sea capaz de simular fenómenos térmicos en forma bastante aproximada. Puede verse en el análisis teórico presentado aquí que, por ejemplo, se cumple en el modelo la ley de equipartición de la energía. Esto no es sorprendente puesto que la función de distribución de las partículas es una buena aproximación de la distribución maxwelliana. Pero nos muestra que el comportamiento termodinámico del "gas modelo" es en alguna medida "normal". Algo que sí puede producir serios problemas en la evolución computacional del modelo es el rango limitado de valores que puede tomar la energía para que las funciones de distribución de las partículas se mantengan positivas. Como ya mencionamos, esperamos que este problema no se presente en nuestras simulaciones si las condiciones iniciales y de frontera están elegidas adecuadamente.

Hay que señalar también que el modelo no es capaz de simular fenómenos de conducción de calor puesto que el flujo de calor es despreciable y se anula exactamente con el término de flujo de la energía cinética macroscópica. Sin embargo, esperamos que permita reproducir transporte convectivo de energía que es el motor fundamental de la evolución térmica de los sistemas meteorológicos.

CONCLUSIONES.

A lo largo de este trabajo hemos descrito los modelos de gases en redes (tanto de autómatas celulares como de tipo "Lattice Boltzmann") e intentado explorar la posibilidad de aplicar estos modelos para el estudio de la contaminación atmosférica y de problemas relacionados (en especial, la reconstrucción de campos de viento). En ocasiones nuestro análisis ha sido teórico basado en la definición de los propios modelos, otras veces ha sido puramente práctico (esto es, basado en simulaciones realizadas con implementaciones computacionales de los modelos). Vamos a tratar ahora de resumir los resultados más destacables de nuestra exploración.

En el capítulo 4 analizamos con algún detalle los modelos de autómatas celulares, en especial el modelo ARIANNA. Respecto a este modelo en particular podemos hacer los siguientes comentarios:

(a) ARIANNA ha demostrado ser capaz de reproducir situaciones bien conocidas de flujos laminares y turbulentos, estacionarios y no-estacionarios. En particular, es de destacar que reproduce el perfil cuasi-logarítmico de la velocidad del viento en la capa superficial típica. Aunque sólo sean preliminares, estos resultados sugieren que ARIANNA podría ser útil como modelo micrometeorológico alternativo.

(b) Las simulaciones que reproducen el campo de vientos bidimensional en el valle de México (para horas tanto del día como de la noche) están en razonable acuerdo con los datos experimentales de la RAMA. Con estas simulaciones se muestra también una de las principales ventajas de los modelos de autómatas celulares que es la capacidad de tratar con condiciones iniciales y de frontera complejas. Hay que decir, sin embargo, que el modelo aún está en la etapa de validación y calibración.

(c) Hay que señalar que para que ARIANNA pueda funcionar como un modelo meteorológico realista debe ser extendido a tres dimensiones (para tomar en cuenta, por ejemplo, el perfil vertical de temperatura).

(d) Como hemos recalado a lo largo del trabajo, hace falta aún una "teoría cinética" rigurosa y bien fundamentada de estos "gases de autómatas celulares". Teóricamente sabemos que existen ciertos problemas: estos sistemas no presentan isotropía ni invariancia galileana y el comportamiento termodinámico puede ser muy "anormal" bajo determinadas condiciones (Ver el análisis termodinámico de ARIANNA presentado en el capítulo 4). Además, lo que quizá es más importante, se trata de sistemas "microscópicos" que pretenden simular fenómenos "macroscópicos" (así, por ejemplo, lo que en los resultados es interpretado como un transporte turbulento de momento, energía, etc. es en realidad un transporte "molecular" realizado por las "moléculas" de nuestro "gas"). Sin embargo, no tenemos aún una idea suficientemente precisa de las consecuencias que pudieran tener estos problemas en los resultados computacionales de los modelos.

Hablemos ahora del modelo Lattice Boltzmann presentado en el capítulo 5, y de su extensión desarrollada en el capítulo siguiente.

Desde el punto de vista teórico (que es el que más ha sido desarrollado en este caso) podemos concluir de nuestro análisis del modelo Lattice Boltzmann del capítulo 5 que, gracias a su uso de un enfoque estadístico, el modelo aproxima suficientemente bien las ecuaciones macroscópicas de Navier-Stokes. Representa un sistema "macroscópico" en donde los parámetros físicos que se miden empíricamente (tales como los coeficientes de viscosidad) pueden ser introducidos sin referencia a tipos de colisión específicos. Es de destacar también que el tensor de esfuerzos presenta las propiedades de isotropía e invariancia galileana.

Encontramos, sin embargo, dos problemas en el plano teórico que nos parece importante exponer aquí. Por una parte, como insistimos reiteradamente en los capítulos 5 y 6, el modelo no conserva la energía (ni siquiera trivialmente como lo hacen los modelos HPP y FHP) y, por lo tanto, no es posible utilizarlo para simular fenómenos térmicos. Hemos intentado resolver esta limitación mediante la extensión del modelo presentada en el capítulo 6. Una segunda cuestión es que, a pesar de los aspectos "macroscópicos" del modelo, éste presenta aún características discretas importantes. Por ejemplo, el camino libre entre colisiones resulta notablemente grande comparado con la escala en la que ocurren los remolinos turbulentos de los fluidos reales. Es posible que para simular de manera efectiva fenómenos turbulentos sea necesario añadir una componente aleatoria al modelo. Este problema no ha sido aún estudiado.

Las simulaciones llevadas a cabo con el modelo muestran que éste es capaz de reproducir flujos laminares estacionarios y no-estacionarios con resultados en muy buen acuerdo con las soluciones analíticas de las ecuaciones de Navier-Stokes. Otro aspecto a destacar de dichas simulaciones es la "suavidad" o "continuidad" de los resultados experimentales que sugieren que efectivamente estamos tratando con un sistema "macroscópico". Aún cuando el modelo debe ser sometido aún a muchas pruebas, creemos que puede comenzar a ser aplicado al problema de la reconstrucción de campos de viento de un modo similar a como se ha hecho con ARIANNA.

El modelo Lattice Boltzmann extendido presentado en el capítulo 6 no ha sido aún implementado computacionalmente y sólo presentamos en este trabajo un análisis teórico de sus propiedades. En este modelo, la energía es un parámetro físico independiente que se conserva en las colisiones y esto nos permite esperar que permita simular fenómenos térmicos. Algo que puede producir serios problemas en la evolución computacional del modelo es el rango limitado de valores que puede tomar la energía para que las funciones de distribución de las partículas se mantengan positivas. Es posible que tenga que violarse la conservación de la energía en el caso de que, durante la evolución del "gas", la energía abandone este "rango permitido". Por otro lado, hay que decir que el modelo no puede simular conducción de calor puesto que el flujo de calor es de magnitud despreciable. Pero esperamos, sin embargo, que sea capaz de reproducir transporte convectivo de energía que es el motor fundamental de la evolución térmica de los sistemas meteorológicos.

Creemos finalmente que esta línea de investigación está bien justificada y que los modelos de gases en redes prometen ser una herramienta útil en el estudio de fenómenos micrometeorológicos relacionados con el transporte y dispersión de contaminantes en la atmósfera.

REFERENCIAS.

- 1.- P. Zanetti. "Air Pollution Modeling".
- 2.- Christian Seigneur. "Understand the Basics of Air-Quality Modeling". (Environmental Protection.) Chemical Engineering Progress.
- 3.- Roland B. Stull. "An Introduction to Boundary Layer Meteorology". Kluwer Academic Publishers.
- 4.- "Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations". Editado por Gary D. Doolen (Santa Fe Institute Editorial Board, febrero de 1989) que incluye, entre otros artículos:
 - (a) T. Shimomura, G.D.Doolen, B.Hasslacher, Castor Fu. "Calculations Using Lattice Gas Techniques" (1987).
 - (b) U. Frisch, B. Hasslacher, Y. pomeau. "Lattice Gas Automata for the Navier-Stokes Equation". (1986)
 - (c) Stephen Wolfram. "Cellular Automaton Fluids I: Basic Theory". (1986)
 - (d) U. Frisch, D. d'Humières, B. Hasslacher et al. "Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions".
- 5.- Brosl Hasslacher. "Discrete Fluids".
- 6.- F. J. Higuera, J. Jiménez. "Boltzmann Approach to Lattice Gas Simulations". Europhysics Letters (1989).
- 7.- R.D. Kingdon, P. Schofield, L.White. "A Lattice Boltzmann model for the simulation of fluid flow". Journal of Physics. (1992).
- 8.- D.O. Martinez et al. "Comparison of spectral method and lattice Boltzmann simulations of two-dimensional hydrodynamics". American Institute of Physics (1994)
- 9.- Alejandro Salcido. "Lattice gas model for transport and dispersion phenomena of air pollutants". (I.I.E). Computational Mechanics Publications. Elsevier Applied Science. Editores P. Zanetti, C. A. Brebbia, J.E. García Gardea y G. Ayala Milian.
- 10.- A. Salcido y R. Rechtman. "Equilibrium Properties of a Cellular Automaton for ThermoFluid Dynamics". Nonlinear Phenomena in Fluids, Solids and other Complex systems. (1991).
- 11.- A. Salcido. "Lattice gas simulation of wind fields in the Valley of Mexico". I.I.E.
- 12.- Arnold Sommerfeld. "Thermodynamics and Statistical Mechanics". Ed. Prentice Hall.
- 13.- G. K. Batchelor. "An Introduction to Fluid Dynamics". Cambridge University Press.
- 14.- Landau y Lifshitz. "Mecánica de fluidos". Ed. Reverté
- 15.- Sir James Jeans. "The Dynamical Theory of Gases". Dover Publications, Inc.
- 16.- Irving H. Shames. "La mecánica de los fluidos". De. McGraw Hill.
- 17.- R. Rechtman. "Termodinámica de Gases en Redes". (1995).