



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Modelo Hidrodinámico De Boltzmann En
Redes Con Simetría Axial

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
FÍSICO

PRESENTA:
GUSTAVO ALEJANDRO GUAYAQUIL SOSA

DIRECTOR DE TESIS:
DR. CARLOS MÁLAGA IGUÍÑIZ



2011



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.

1. Datos del alumno	2. Datos del tutor
Guayaquil Sosa Gustavo Alejandro 5513390277 Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 406000017	Dr. Carlos Málaga Iguñiz
3. Datos del sinodal 1	4. Datos del sinodal 2
Dr. AntonMaria Minzoni Allesio	Dr. Guillermo Ramírez Santiago
5. Datos del sinodal 3	6. Datos del sinodal 4
Dr. Ramón Gabriel Plaza Villegas	Dr. José Roberto Zenit Camacho

Datos del trabajo escrito
<i>Modelo hidrodinámico de Boltzmann en redes con simetría axial</i> 83p. 2011

Modelo hidrodinámico de Boltzmann en redes con simetría axial

GUSTAVO ALEJANDRO GUAYAQUIL SOSA

*Facultad de Ciencias
Universidad Nacional Autónoma de México*

**A mi mamá y mi papá por darme la vida
A Héctor y Fabricio por llenar mi vida de sentimientos**

*“-No le he hecho venir hasta aquí para perder el tiempo.
¿Cómo diablos se las ha arreglado el ordenador para hacer eso?
-No lo sé”
El juego de Ender.*

Agradecimientos

“Las verdades simples y perdurables son siempre una guía”

Louis Isadore Kahn

A lo largo de mi preparación académica han intervenido varias personas a las que deseo expresar mi agradecimiento. Primero que nada se encuentra mi mamá *Rosa Elisa Sosa Gómez* que ha sabido escucharme, darme ánimos, guiarme hacia un buen camino, enseñarme a ser responsable y hacerme entender todo el cariño que puede dar una persona a otra. También esta mi papá *Héctor Salomón Guayaquil Arias* que ha tenido la fortaleza para entender que una carrera profesional lleva tiempo, me ha apoyado en cada momento de mi vida y ha logrado enseñarme que el trabajo constante es la llave de toda puerta. A mi hermano mayor *Héctor Francisco Guayaquil Sosa* por haberme cuidado durante todo el tiempo que me llevó terminar la carrera de física, por ser la persona mas completa y entera que he logrado conocer y por ser tan buen modelo a seguir. A mi hermano quasi-mayor *Jesús Fabricio Guayaquil Sosa* por saber aconsejarme en momentos adecuados, tener el valor de afrontar todo problema sin temor y por estar también siempre al pendiente de mi vida. Ustedes son la semilla del árbol académico cuyo fruto es este trabajo, el cual se los dedico. Siempre serán mi inspiración y modelos a seguir.

También quiero dedicarlo a otros integrantes de mi núcleo familiar que son Candy, Mimi (aunque ya no este con nosotros), Elena y Sofia a las que les debo demasiado cariño incondicional y el tiempo que han gastado en verme crecer. Recientemente a Roedor por tener esa chispa de un nuevo integrante.

Quiero agradecer profundamente a la Dr. Ana Meda Guardiola y a Juan Martín Barrios Vargas por tener el tiempo para enseñarme, escucharme, aconsejarme, corregirme, preocuparse y motivarme a lo largo de mi aprendizaje universitario. Siempre estaré en deuda con ustedes por encender esta luz académica y mostrarme que en esta esfera social solo se necesita perseverancia.

CAPÍTULO 0. AGRADECIMIENTOS

Quiero mencionar a José Luis Pérez Mazariiego del laboratorio de Física Atómica y Molecular de la Facultad de Ciencias por darme mis primeras lecciones de física mas allá de un aula, agradecer a Ricardo Méndez Fragoso por la paciencia en dirigir mis primeros pasos en física computacional en el Instituto de Física, ayudarme a hacer trabajos para congresos nacionales mexicanos, poder dar clases junto a el, y mas que nada por convertirse en un buen amigo con el que puedo contar. A David Philip Sanders por dar tan buenas clases de física computacional, así como por enseñarme el gusto y buen sabor que deja esta rama de la física.

Agradezco mucho a mi tutor Carlos Malaga Iguñiz por enseñarme ideas y buenos consejos de como abordar y resolver el problema que aquí presentamos, incluyendo aprender todas las lagunas de física y matemáticas de fluidos que arrastre en la carrera. Por tener la paciencia de revisar este trabajo escrito corrigiendo mi gran falta de medida en la clasificación de la información así como el contenido de la misma. También agradezco su gran disposición de ayuda y el estar al tanto de que sucederá con mis próximos pasos en la física.

A mis sinodales, y en algunos casos ex-profesores, AntonMaria Minzoni, Ramón Plaza, Guillermo Ramírez y José Zenit por el gusto de las charlas acerca de este trabajo y las mejoras que observaron se podían hacer.

Y finalmente deseo agregar a los profesores y amigos que han logrado hacer que mi paso por la universidad sea amena e interesante: Eugenio y Marcos Ley-Koo, Eduardo Nahmad, Lorea Chaos, Miguel Alcubierre, Nicolas Palma, Edgar Vazquez, Arturo Olvera, María del Carmen Jorge y Jorge, Clara Garza, Andrea Valdés, Leonardo Faustinos, Enrique Isidoro, Laura, Josslyn, Mauricio, Rodrigo, Omar, Hugo, Rirri, Marquina, Zubi, Garrido, Gerado, Raxel, Echeverria, Leos, Santillan, Raspopov, Guillermina, Jazmin, Silvana, Isaura, Rebeca, Karla, Mario, Trenzas, Octavio y por que no Valentina.

Gustavo Alejandro Guayaquil Sosa
2011

Índice general

Agradecimientos	v
1. Introducción	1
2. El Método de Boltzmann en una malla	4
2.1. Modelo Cinético	5
2.2. Del modelo BGK a las ecuaciones de Navier–Stokes	6
2.3. Discretización	11
2.3.1. Esquema D2Q9	13
2.3.2. Esquema D3Q27	16
2.4. Del método de Boltzmann en una malla a las ecuaciones de Navier–Stokes	18
2.5. Condiciones de Frontera Computacionales	22
2.5.1. Rebote	23
2.5.2. Rebote a medio camino	23
2.5.3. Método de extrapolación	24
3. Método de Boltzmann en una malla con simetría axial	27
3.1. Fronteras Cilíndricas	30
3.1.1. Componente $e_{\alpha z} = 0$ (Dentro del plano de simetría)	31
3.1.2. Componente $e_{\alpha z} \neq 0$ (Fuera del plano de simetría)	32
4. Validación y Resultados	34
4.1. Flujo de Poiseuille	34
4.1.1. Solución Analítica	34
4.1.2. Simulación Numérica	36
4.1.3. Solución Analítica en un anillo	39

4.1.4. Simulación Numérica en un anillo	39
4.2. Flujo de Womersley	41
4.2.1. Solución Analítica	41
4.2.2. Simulación numérica	45
4.3. Flujo de Taylor–Couette	48
4.3.1. Antecedentes	48
4.3.2. Solución Analítica	48
4.3.3. Simulación Numérica	51
4.3.4. Primera Inestabilidad de Taylor	52
4.3.5. Observaciones numéricas (Parte I)	58
4.3.6. Observaciones numéricas (Parte II)	63
4.3.7. Observaciones numéricas (Parte III)	65
5. Conclusiones	67
X. Programa de Boltzmann en una malla con simetría axial	69
Bibliografía	72

En dinámica de fluidos la descripción de ciertos campos permite determinar el comportamiento local a todo tiempo. Dichos campos son las tres componentes de la velocidad \mathbf{u} y cualesquiera dos cantidades termodinámicas pertenecientes al fluido, por ejemplo la presión p y la densidad ρ . Para obtener estos campos es necesario resolver las ecuaciones que gobiernan al sistema hidrodinámico, las cuales, sin considerar la expresión para la energía y ecuaciones de estado son, conservación de masa, $\partial_t \rho = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})$ [25][pag.2], y balance de momento, $\partial_t (\rho \mathbf{u}) = -\nabla \cdot (p \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma}')$ [25][pag.44]. El término $\boldsymbol{\sigma}'$, denominado tensor viscoso de esfuerzos, proporciona la respuesta mecánica de distintos tipos de fluidos a través de las relaciones constitutivas. Si el tensor es proporcionalmente lineal a las derivadas espaciales de la velocidad se dice que son *fluidos Newtonianos*. Si además se considera un flujo incompresible entonces la ecuación de conservación de masa se reduce a $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ [25][pag.17]. Por su parte, con estas aproximaciones, la ecuación de balance de momento se transforma en $\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}$ [25][pag.46], las cuales reciben el nombre de *ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos incompresibles*. A μ se le conoce como viscosidad dinámica, o simplemente viscosidad, y mide la oposición interna a que un fluido se deforme [3][pag. 36].

Debido a la dificultad matemática que en la mayoría de los casos tienen estas ecuaciones para poder encontrar una solución analítica, es común hacer uso de un método computacional que proporcione con cierta precisión la solución. Los métodos convencionales, tales como diferencias finitas o elemento finito, aproximan directamente la ecuación que se desea resolver. También existe la alternativa conocida como *método de Boltzmann en una malla* [33] que simula flujos sin resolver las ecuaciones de Navier-Stokes. Este método calcula la función de distribución de la ecuación de Boltzmann de teoría cinética de gases y a través de promedios recupera las ecuaciones hidrodinámicas [42][pag.96].

El método de Boltzmann en una malla se ha usado para simular fluidos turbulentos [16], químico–reactivos [9], así como separación de fases [39], transporte de calor [29], entre muchos otros. Una de las grandes ventajas que presenta es la simplicidad del algoritmo, además de que permite un paralelaje computacional. Aún cuando es un método sencillo de emplear para el caso de tres dimensiones se requiere de mucha más memoria RAM que otros métodos computacionales, por lo que puede resultar poco eficiente de emplear. Por ejemplo, un esquema tridimensional del método de Boltzmann en una malla requiere guardar 27 datos [28] en cada nodo para calcular la presión p y el campo de velocidades \mathbf{u} , mientras, por decir, el método de diferencias finitas sólo requiere de 4 datos para cada nodo. De igual modo, aunque el algoritmo de Boltzmann en una malla en tres dimensiones sigue siendo muy sencillo, el número de cálculos aumenta considerablemente. Existen métodos de Boltzmann en una malla que son tridimensionales y requieren menos datos [14] pero tales simplificaciones siguen siendo demandantes en comparación a la poca memoria de otros métodos. Una manera de optimizar este método para el caso tridimensional es emplearlo en flujos que tengan simetría axial de tal forma que se pueda reducir a un modelo bidimensional reduciendo la memoria a usar. Así pues, en este trabajo se presenta una modificación novedosa al modelo de Boltzmann en una malla para flujos que tengan simetría axial.

La idea consiste en hacer uso de un esquema tridimensional que necesita en general guardar 27 datos pero solo emplear 9 valores para guardar en memoria, los cuales pertenecen a información restringida al plano de simetría, y cuya evolución sigue el algoritmo usual del método de Boltzmann en una malla. Los 18 datos restantes necesarios para el cálculo de las cantidades macroscópicas y la evolución del sistema se obtienen a partir de una extrapolación y no requieren ser guardados en memoria. Existen otros modelos de Boltzmann en una malla para flujos con simetría axial [31, 26] que usan un esquema bidimensional y se basan en el trabajo de Halliday [21]. En estos se agregan términos fuente a la ecuación de evolución de Boltzmann en una malla. Los promedios de estos términos representan aceleraciones en la ecuación de balance de momento y se calculan para recuperar las ecuaciones de Navier–Stokes de un flujo con simetría axial en coordenadas cilíndricas. A diferencia, la propuesta aquí presentada aprovecha el método de extrapolación de Guo [19] para la simulación de flujos con simetría axial como son, por ejemplo, el flujo de Poiseuille, el flujo de Womersley, y el flujo de Taylor–Couette, así como la primera inestabilidad de Taylor.

El presente trabajo está dividido en la siguiente forma. En el capítulo 2 se presenta el método de Boltzmann en una malla comenzando por la ecuación de Boltzmann para un modelo cinético simplificado de un tiempo de relajación conocido como BGK. Con esto en mente se describe como llegar de las ecuaciones de teoría cinética a leyes de conservación para la densidad (ρ), momento lineal ($\rho\mathbf{u}$) y energía interna (ρe)

[42][pag.96]. En seguida se detalla como discretizar la ecuación de Boltzmann BGK mostrando dos esquemas, uno bidimensional que guarda 9 datos por nodo en memoria y uno tridimensional de 27 datos. Aquí mismo se trata una pequeña modificación a los esquemas de tal manera que se recupere la incompresibilidad del flujo [22]. Después se toma la ecuación del método de Boltzmann en una malla y se muestra cómo por medio de un desarrollo en serie de Taylor [37][pag.805] y una descomposición de Chapman–Enskog [18] se obtienen las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles. El capítulo termina describiendo algunos esquemas de condiciones de frontera [19, 41] para el método de Boltzmann en una malla.

En el capítulo 3 se presenta la modificación al método de Boltzmann en una malla para flujos con simetría axial y se especifica cómo colocar fronteras impenetrables al modelo axialsimétrico. En el capítulo 4 se valida la propuesta de modelo axialsimétrico a través de la simulación de tres flujos (Poiseuille, Womersley y Taylor–Couette) y para el ejemplo del flujo de Taylor–Couette aparte de la solución analítica se busca la primera inestabilidad de Taylor [15][pag.88] abordando detalles acerca de su número de Reynolds [36] y los *vórtices de Taylor* [4].

El objetivo general de este trabajo es proponer una modificación al modelo de Boltzmann en una malla para que use un esquema tridimensional pero que se limite a hacer operaciones en un plano, y de esta forma tener una herramienta computacional eficiente para simular flujos tridimensionales axialsimétricos sin necesidad de gran capacidad de cómputo en memoria RAM.

El Método de Boltzmann en una malla

En la última década el método computacional conocido como *Boltzmann en una malla* se ha propuesto como una alternativa en la simulación numérica de fluidos [22, 10]. Sus ventajas radican en la simplicidad de programación, y la facilidad para implementarse en geometrías complicadas [19, 17]. La idea principal de los métodos de Boltzmann en una malla es pasar de modelos cinéticos que incorporan parte de la física de procesos microscópicos, tales como colisiones entre partículas, a promedios relacionados con cantidades macroscópicas que satisfacen ecuaciones continuas. El fundamento de hacer uso de un modelo cinético es debido a que la dinámica macroscópica de un fluido es el resultado del comportamiento colectivo de muchas partículas microscópicas en el sistema, además de que la dinámica macroscópica no es sensible a detalles de la física microscópica. En este sentido se evita resolver una ecuación complicada como lo es la ecuación de Boltzmann, o seguir a cada paso de tiempo una partícula como se hace en simulaciones de dinámica molecular [10].

Históricamente el modelo de Boltzmann en una malla se origina de los modelos de gases en redes que describen la ocupación de una partícula en una red a través de un conjunto de variables *Booleanas* n_i , ($i = 1, \dots, M$). El índice i representa la dirección i -ésima de las velocidades de la partícula en cada nodo de la red. Para este caso la evolución de un gas está dada por la ecuación $n_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(n(\mathbf{x}, t))$ [10] donde Ω_i es el operador de colisión que describe la interacción entre las partículas y \mathbf{e}_i son las velocidades locales de la partícula. En el método Boltzmann en una malla se sustituye la variable Booleana n_i por la función de distribución f_i de una partícula de tal modo que se satisfaga $f_i = \langle n_i \rangle$ [10], i.e. la función de distribución sea el ensamble promedio de una partícula. Así pues, el valor de ocupación booleana n_i se transforma en un valor de distribución real. Esto último hace no tomar en cuenta el movimiento de una sola partícula.

De esta relación entre un modelo de gas en una red y un método de Boltzmann en una malla se realiza la simplificación de linealizar el operador de colisión asumiendo que la distribución es cercana a un equilibrio local [42][pag.94]. Comúnmente se utiliza un tiempo de relajación para modelar el término de colisiones, denominado en este caso modelo BGK, aunque esta simplificación presenta sus limitantes y defectos, tales como coeficientes de transporte incorrectos [5].

Antes de detallar el método se presenta la ecuación de Boltzmann y la aproximación de BGK.

2.1. Modelo Cinético

El estado dinámico de un sistema de partículas está dado por la posición \mathbf{x} y la velocidad $\boldsymbol{\xi}$ de cada una de ellas. En teoría cinética la descripción del estado del sistema se da a través de la función $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, denominada *función de distribución*, que determina la probabilidad de encontrar la posición y velocidad una partícula entre los valores $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ y $(\mathbf{x} + d\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi})$ a un tiempo t . Dejando fija la coordenada temporal la función f tiene dominio de 6 dimensiones, 3 para la posición \mathbf{x} y 3 para la velocidad $\boldsymbol{\xi}$, el cual comunmente se denomina *espacio fase de una partícula*. Haciendo uso de esta función, la ecuación de Boltzmann [42][pag.84] tiene la forma general de

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisiones}} \quad (2.1)$$

donde $\nabla_{\mathbf{x}}$ y $\nabla_{\boldsymbol{\xi}}$ son, respectivamente, el operador gradiente respecto a \mathbf{x} y $\boldsymbol{\xi}$. \mathbf{F} es una fuerza externa y m la masa de una partícula.

En el modelo cinético más simple el lado derecho de la Ec.(2.1), que representa la variación de la distribución f debido a colisiones binarias y se denomina operador de colisión, es aproximado por

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisiones}} = -\lambda (f - f_{\text{eq}})$$

donde λ es una razón constante en la que la función de distribución f se aproxima a su forma en equilibrio termodinámico dada por f_{eq} . En 1954 P.L. Bhatnagar, E.P. Gross y M. Krook (BGK) simplifican el modelo cinético al suponer que las colisiones entre partículas llevan al sistema a un estado de *equilibrio local* expresado por una distribución de Maxwell-Boltzmann [24][pag.83], dada por

$$f_{\text{eq}} = \rho \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{m}{2k_B T} \mathbf{v}^2} \quad (2.2)$$

para T la temperatura, ρ la densidad, k_B una constante, $\mathbf{v} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}$, con \mathbf{u} la velocidad macroscópica (fluido) y D la dimensión del espacio de posiciones \mathbf{x} .

La función f se define como la masa por unidad de volumen en el espacio fase de tal forma que integrar sobre todas las velocidades y sobre todas las posiciones da la masa total del sistema. Así, la densidad de masa y otros campos hidrodinámicos están relacionados con la densidad de masa del espacio fase a través de integrales sobre la velocidad, i.e., la densidad de masa, momento y energía interna son

$$\rho = \rho\langle 1 \rangle = \int f d\boldsymbol{\xi} \quad (2.3)$$

$$\rho \mathbf{u} = \rho\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \int \boldsymbol{\xi} f d\boldsymbol{\xi} \quad (2.4)$$

$$\rho e = \rho\langle \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \rangle = \int \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 f d\boldsymbol{\xi} \quad (2.5)$$

Debe notarse que la energía interna es definida por la energía cinética promedio de la velocidad de las partículas relativo a la velocidad local macroscópica. La temperatura local T es definida mediante el teorema de equipartición de la energía igualando la energía interna por unidad de volumen a $\frac{3}{2}nk_B T$, i.e. $\rho e = \frac{3}{2}nk_B T$.

El modelo BGK supone que los promedios de las cantidades macroscópicas también se pueden obtener de la distribución de equilibrio local

$$\langle 1 \rangle = \langle 1 \rangle_{\text{eq}} \quad \langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \langle \boldsymbol{\xi} \rangle_{\text{eq}} \quad \langle \mathbf{v}^2 \rangle = \langle \mathbf{v}^2 \rangle_{\text{eq}} \quad (2.6)$$

donde $\langle \rangle_{\text{eq}}$ hace referencia a usar la función de distribución de equilibrio, Ec.(2.2), en lugar de la función de distribución f en el cálculo de promedios.

Retomando la ecuación de un modelo cinético, Ec.(2.1), en ausencia de una fuerza externa \mathbf{F} se tiene que el modelo de Boltzmann BGK es

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = -\frac{1}{\tau} (f - f_{\text{eq}}) \quad (2.7)$$

donde se omite el subíndice del operador gradiente respecto a \mathbf{x} y $\tau = \frac{1}{\lambda}$ representa la razón constante de aproximación a la función de equilibrio local de la Ec.(2.2), esto es, representa el tiempo promedio entre colisiones y se denomina tiempo de relajación.

2.2. Del modelo BGK a las ecuaciones de Navier–Stokes

En esta sección se verá como pasar del modelo cinético BGK a las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles. Para ello se usa la Ec.(2.7) para determinar la evolución de los momentos de la distribución relacionados a cantidades hidrodinámicas.

Tomando la Ec.(2.7), multiplicándola por A e integrando sobre ξ se tiene

$$\frac{\partial \rho \langle A \rangle}{\partial t} = \int A \left[-\xi \cdot \nabla f - \frac{1}{\tau} (f - f_{\text{eq}}) \right] d\xi$$

Que se puede escribir como

$$\frac{\partial \rho \langle A \rangle}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \langle \xi A \rangle + \rho \langle \xi \cdot \nabla A \rangle - \frac{1}{\tau} \rho (\langle A \rangle - \langle A \rangle_{\text{eq}}) \quad (2.8)$$

La suposición del modelo BGK, Ec.(2.6), hace que el último término de la derecha de esta ecuación, Ec.(2.8), sea pequeño y se pueda despreciar.

Por lo tanto, cuando $A = \langle 1 \rangle$ se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.9)$$

Esta ecuación expresa que el cambio temporal de la masa contenida en un volumen es igual y de signo contrario al flujo que atraviesa la superficie que encierra al volumen [20][pag.110]. Se le conoce como *ecuación de continuidad* y si se desarrolla la derivada del segundo término se puede expresar como $D_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, donde el operador $D_t = (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla)$ se denomina *derivada material* y da la variación temporal para un elemento de volumen del fluido a lo largo del flujo.

Cuando se usa $A = \xi$ se obtiene

$$\frac{\partial \rho \langle \xi \rangle}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \langle \xi \xi \rangle$$

Que puede reescribirse notando que $\rho \langle \xi \xi \rangle = \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \rho \langle \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle$, pues $\rho \langle \mathbf{v} \mathbf{u} \rangle$ es cero¹. Por lo tanto se tiene

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} - \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{0} \quad (2.10)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$, el tensor de esfuerzos, está definido por

$$\sigma_{ij} := - \int v_i v_j f d\xi$$

La forma de las Ecs.(2.9)-(2.10) son características de leyes de conservación en ausencia de fuerzas externas ya que expresan la razón de cambio de una cantidad física en términos de un flujo [20][pag.173]. En este caso el flujo se compone de dos términos, $\rho \mathbf{u} \mathbf{u}$ que es el transporte de momento debido al movimiento de las partículas y $\boldsymbol{\sigma}$ que contribuye al cambio de momento debido a esfuerzos. Más adelante se explica

¹El cálculo es inmediato $\rho \langle \mathbf{v} \mathbf{u} \rangle = \int \mathbf{v} \mathbf{u} f d\xi = \int [\xi - \mathbf{u}] \mathbf{u} f d\xi = \rho \mathbf{u} - \mathbf{u} \rho = 0$

como llegar de la Ec.(2.10) a las ecuaciones de Navier–Stokes pero antes se muestra la ecuación de conservación de energía interna.

Colocando $A = \frac{1}{2}|\boldsymbol{\xi}|^2$ se tiene

$$\frac{\partial \rho \langle \frac{1}{2}|\boldsymbol{\xi}|^2 \rangle}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \langle \boldsymbol{\xi} \frac{1}{2}|\boldsymbol{\xi}|^2 \rangle$$

Ambos términos de esta ecuación se pueden expresar de otra forma cambiando la velocidad $\boldsymbol{\xi}$ por $\mathbf{u} + \mathbf{v}$. El lado izquierdo es

$$\frac{\partial \rho \langle \frac{1}{2}|\mathbf{u} + \mathbf{v}|^2 \rangle}{\partial t} = \frac{\partial (\rho e + \frac{1}{2}\rho \mathbf{u}^2)}{\partial t}$$

Mientras el lado derecho es

$$\begin{aligned} \rho \langle \boldsymbol{\xi} \frac{1}{2}|\boldsymbol{\xi}|^2 \rangle &= \frac{1}{2}\rho \langle (\mathbf{u} + \mathbf{v}) |(\mathbf{u} + \mathbf{v})|^2 \rangle \\ &= \langle \frac{1}{2}\rho |\boldsymbol{\xi}|^2 \rangle \mathbf{u} + \langle \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle \mathbf{u} + \rho \langle \mathbf{v} \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 \rangle \end{aligned}$$

En esta ecuación el primer término de la derecha corresponde a la densidad de energía interna, el segundo término al trabajo hecho por los esfuerzos y el último término esta relacionado con el flujo de calor el cual se puede expresar como

$$q_i := \int v_i \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 f d\boldsymbol{\xi}$$

Por lo tanto, la ecuación de conservación de energía interna es

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2}\rho \mathbf{u}^2 \right) + \nabla \cdot \left[\left(\rho e + \frac{1}{2}\rho \mathbf{u}^2 \right) \mathbf{u} - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{q} \right] = 0 \quad (2.11)$$

Nuevamente se tiene la razón de cambio de una cantidad igual a la divergencia un flujo.

Posteriormente se obtendrán las Ecs.(2.9)-(2.10) partiendo del método de Boltzmann en una malla que representa una discretización del modelo cinético BGK.

Para pasar de la Ec.(2.10) a las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles, la presión en un punto dado para un fluido en movimiento se define como

$$p = -\frac{1}{3} \sum_i \sigma_{ii} = -\frac{\rho}{3} \langle \mathbf{v}^2 \rangle \quad (2.12)$$

Con esto es posible separar el tensor de esfuerzos $\boldsymbol{\sigma}$ en una parte isotrópica, correspondiente enteramente a presiones, y una parte que estará relacionada con las tensiones

del fluido definida por $\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} + p\delta_{ij} = \rho\langle v_i v_j \rangle + \frac{\rho}{3}\langle \mathbf{v}^2 \rangle \delta_{ij}$.

En equilibrio el promedio del tensor viscoso $\boldsymbol{\sigma}'$ es cero. Esto significa que el tensor viscoso se rige en su totalidad por desviaciones del equilibrio.

Ahora bien, la Ec.(2.8) para el segundo momento $\boldsymbol{\xi\xi}$ es

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\langle \boldsymbol{\xi\xi} \rangle) + \nabla \cdot \rho\langle \boldsymbol{\xi\xi\xi} \rangle + \frac{\rho}{\tau} [\langle \boldsymbol{\xi\xi} \rangle - \langle \boldsymbol{\xi\xi} \rangle_{\text{eq}}] = 0 \quad (2.13)$$

Como $\rho\langle \mathbf{uv} \rangle = \rho\langle \mathbf{vu} \rangle = 0$ entonces $\rho\langle \boldsymbol{\xi\xi} \rangle = \rho\mathbf{uu} + \boldsymbol{\sigma} = \rho\mathbf{uu} - p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}'$, donde \mathbf{I} representa la matriz identidad. Con esto, el último término de la derecha en la Ec.(2.13) es $\rho\langle \boldsymbol{\xi\xi} \rangle - \rho\langle \boldsymbol{\xi\xi} \rangle_{\text{eq}} = \boldsymbol{\sigma}'$.

Para llegar a la relación constitutiva de un fluido Newtoniano se debe usar que el tercer momento $\rho\langle \boldsymbol{\xi\xi\xi} \rangle = \rho u_i u_j u_k + \rho u_i \langle v_j v_k \rangle + \rho u_j \langle v_i v_k \rangle + \rho u_k \langle v_i v_j \rangle + \rho \langle v_i v_j v_k \rangle$ aproxima rápidamente a su valor en equilibrio dado por

$$\rho\langle \xi_i \xi_j \xi_k \rangle_{\text{eq}} = \rho u_i u_j u_k - p(u_i \delta_{jk} + u_j \delta_{ik} + u_k \delta_{ij})$$

ya que $\rho\langle v_i v_j \rangle_{\text{eq}} = -p\delta_{ij}$ y $\rho\langle v_i v_j v_k \rangle_{\text{eq}} = 0$.

De esta forma, considerando un estado estacionario, despreciando términos no lineales y usando la parte de equilibrio del tercer momento en la Ec.(2.13) se llega a

$$0 = -p \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{1}{\tau} \sigma'_{ij} \quad (2.14)$$

la cual representa la relación constitutiva del tensor de viscosidad que se obtiene en medios continuos [3][pag.147] para la ecuación $\mu = \tau p = \frac{\rho k_B T}{m} \tau$, donde se usa la ecuación de estado $p = nk_B T$ con $n = \frac{\rho}{m}$.

Al ser incompresible la Ec.(2.9) resulta en

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.15)$$

por lo que el tensor viscoso, Ec.(2.14), se reduce a

$$\sigma'_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.16)$$

La Ec.(2.13) solo captura la viscosidad dinámica pues en el modelo cinético BGK la densidad es una constante a lo mas con pequeñas fluctuaciones, por lo tanto no hay viscosidad de bulto. Seguir el mismo procedimiento para la ecuación dinámica

del tercer momento $\xi\xi\xi$ lleva a encontrar el coeficiente de conductividad térmica κ y obtener la razón de coeficientes térmico viscoso (número de Prandtl) del modelo BGK como $\frac{\kappa}{\mu} = \frac{5}{2} \frac{k_B}{m}$ [42][pag.100].

A continuación hay que reemplazar el tensor $\boldsymbol{\sigma}$, con su respectiva relación constitutiva $\boldsymbol{\sigma}'$ de la Ec.(2.16), en la Ec.(2.10) y tomar ρ constante para obtener las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles. Por lo tanto, la Ec.(2.10) nos lleva a

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \mu\nabla^2\mathbf{u} \quad (2.17)$$

Desarrollando el lado izquierdo se obtiene $\rho\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\frac{\partial\rho}{\partial t} + [\nabla \cdot (\rho\mathbf{u})]\mathbf{u} + \rho\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u}$. Usando la ecuación de continuidad, Ec.(2.9), este término es $\rho D_t\mathbf{u}$.

Con esto, se llega a la ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles

$$D_t\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{u} \quad (2.18)$$

donde $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ se conoce como *viscosidad cinemática*.

El lado izquierdo de la Ec.(2.18) representa la aceleración del fluido. En el lado derecho el primer término indica efectos de presión que corresponden a esfuerzos normales, que están presentes incluso en ausencia de movimiento del fluido, y el segundo término representa los efectos de fricción debido a la viscosidad.

En el capítulo 4 se presentan los resultados de simulaciones de flujos con simetría axial en cilindros por lo que es necesario escribir las Ecs.(2.9) y (2.18) en coordenadas cilíndricas.

Por lo tanto, la ecuación de continuidad, Ec.(2.9), en coordenadas cilíndricas (r, ϕ, x) es

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(ru_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} + \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0 \quad (2.19)$$

Y las tres componentes de las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles [25][pag. 48], Ec.(2.18), son

$$\rho \left[\frac{\partial u_r}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) u_r - \frac{u_\phi^2}{r} \right] = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\nabla^2 u_r - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} - \frac{u_r}{r^2} \right] \quad (2.20)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u_\phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) u_\phi + \frac{u_\phi u_r}{r} \right] = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} + \mu \left[\nabla^2 u_\phi + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \phi} - \frac{u_\phi}{r^2} \right] \quad (2.21)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u_x}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) u_x \right] = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 u_x \quad (2.22)$$

donde

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla) g = u_r \frac{\partial g}{\partial r} + \frac{u_\phi}{r} \frac{\partial g}{\partial \phi} + u_x \frac{\partial g}{\partial x} \quad y \quad \nabla^2 g = \frac{\partial^2 g}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial g}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial x^2}$$

2.3. Discretización

En la sección anterior se ha usado el modelo de transporte de Boltzmann BGK para recuperar, por medio de integrales, las ecuaciones hidrodinámicas en su régimen incompresible. Aunque el origen de los métodos de Boltzmann en una malla son los gases en redes, el método Boltzmann en una malla se puede concebir como la versión discreta del modelo cinético de BGK.

En esta sección se deduce el método partiendo de la discretización de BGK. Escoger una discretización del espacio fase es lo que hace que este método se denomine *Boltzmann en una malla*. Hecho esto se detallan dos de los esquemas más usados y una modificación a estos para considerar la incompresibilidad del fluido en el método. Se termina deduciendo las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles partiendo de la ecuación de Boltzmann en una malla.

Dado que la función de distribución depende de la posición \mathbf{x} , la velocidad microscópica $\boldsymbol{\xi}$ y el tiempo t , i.e. $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, se debe discretizar el espacio fase de una partícula y el tiempo.

El lado izquierdo de la Ec.(2.7) se puede escribir

$$\partial_t f + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\Delta t} \right] \quad (2.23)$$

Aproximando el límite a primer orden en Δt se tiene

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - f_{\text{eq}}(t)] \quad (2.24)$$

La discretización del espacio físico que se usa en el método es que cada nodo en una malla represente un punto del fluido. Dado que la actualización de la función de distribución de la posición \mathbf{x} en un tiempo $t + \Delta t$ no es sobre la posición original \mathbf{x} , sino en la nueva posición $\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} \Delta t$, entonces para que un punto del fluido se represente por

un punto de la malla se tienen que considerar algunos valores de la velocidad ξ .

Para hacer la discretización del espacio de velocidades se introduce la cantidad discreta ξ_α de velocidades de tal forma que la función de distribución en la posición \mathbf{x} al tiempo t se escribe como $f_\alpha(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, \xi_\alpha, t)$.

Así, la Ec.(2.24) se transforma en

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \xi_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{\text{eq}}(t)] \quad (2.25)$$

Para entender esta ecuación es preferible escribirla en la forma $f_\alpha^+ = f_\alpha + \Omega(f_\alpha)$, donde $f_\alpha^+ = f_\alpha(\mathbf{x} + \xi_\alpha \Delta t, t + \Delta t)$ y $\Omega(f_\alpha) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{\text{eq}}(t)]$. De esta manera la Ec.(2.25) consiste de dos pasos, f_α^+ en donde la función de distribución se actualiza para el punto fluido en la dirección ξ_α , y $\Omega(f_\alpha)$ que representa el operador de colisión para el método de Boltzmann en una malla. Estos dos procesos reciben los nombres de flujo (*streaming*) y de colisión (*collide*) respectivamente.

Como solo se usan unas cuantas velocidades ξ_α las integrales para el cálculo de los campos hidrodinámicos, Ecs.(2.3)-(2.4), se cambian por sumas de los términos α , i.e.

$$\rho = \int f d\xi \quad \rightarrow \quad \rho = \sum_\alpha f_\alpha \quad (2.26)$$

$$\rho \mathbf{u} = \int \xi f d\xi \quad \rightarrow \quad \rho \mathbf{u} = \sum_\alpha \xi_\alpha f_\alpha \quad (2.27)$$

Hasta aquí se tienen dos de los tres elementos que usa la evolución del método de Boltzmann en una malla, la ecuación discreta para la evolución temporal, Ec.(2.25), y la forma de calcular los campos macroscópicos, Ecs.(2.26)-(2.27). Falta poder expresar la función en equilibrio f_α^{eq} para que solo considere la cantidad discreta de velocidades ξ_α y decir cuales son los valores de estos vectores.

Tomando el número $M = \frac{|\mathbf{u}|}{c_s}$, con $c_s = \sqrt{RT}$, y desarrollando en serie de Taylor la función de equilibrio a segundo orden en M se tiene

$$f_\alpha^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} e^{\left[-\frac{\xi_\alpha^2}{2RT}\right]} \left[1 + \frac{(\xi_\alpha \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\xi_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2R^2T^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right] + \mathcal{O}(M^3) \quad (2.28)$$

Donde $R = \frac{k_B}{m}$. A M se le conoce como número de Mach y por tanto la aproximación de f_α^{eq} es para *Mach bajo* o velocidades pequeñas lo que corresponde a la aproximación de flujo incompresible.

La velocidad del sonido c_s se obtiene de su definición de mecánica clásica

$$c_s^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} \quad (2.29)$$

para la ecuación de estado de gas ideal que sigue el modelo de Boltzmann.

Como el modelo BGK supone las condiciones de las Ecs.(2.6), se requiere que respecto a la función de equilibrio se calculen exactamente los momentos relacionados a la densidad, la velocidad y la energía interna tomando en cuenta que se tiene un espacio discreto de velocidades. Esto es, se necesita poder evaluar la integral

$$\int \psi(\boldsymbol{\xi}) f_{\text{eq}} d\boldsymbol{\xi} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} \int \psi(\boldsymbol{\xi}) e^{\left[-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}\right]} \left[1 + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})^2}{2R^2T^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right] d\boldsymbol{\xi} \quad (2.30)$$

Donde ψ es un polinomio.

La Ec.(2.30) tiene estructura de una integral de la forma

$$\int e^{-x^2} \psi(x) dx$$

Por lo que se puede usar un método de cuadratura gaussiana para calcular su valor en términos del conjunto de velocidades discretas [13][pag.222]. Dependiendo del polinomio ψ que se use se tendrán distintas soluciones para la integral de arriba y esto es lo que da los distintos esquemas de redes que se pueden construir. A continuación se dan dos soluciones.

La notación usada para referirse a un esquema es la dimensión del espacio físico de la red y el número de velocidades en que se discretiza el espacio de velocidades $\boldsymbol{\xi}$. Por ejemplo la expresión D2Q9 es una red bidimensional con 9 velocidades o D3Q15 es una red tridimensional con 15 velocidades.

2.3.1. Esquema D2Q9

Considerese una red cuadrada inmersa en un sistema de coordenadas cartesianas bidimensional. De acuerdo a esto una forma general de expresar ψ es

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) = \xi_x^m \xi_y^n, \quad (2.31)$$

para m, n tomando valores $0, 1, 2, \dots$, y ξ_x, ξ_y las componentes de la velocidad $\boldsymbol{\xi}$ a lo largo de los ejes x, y respectivamente.

Tomando las ecuaciones

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u}) &= \xi_x u_x + \xi_y u_y \\ (\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})^2 &= \xi_x^2 u_x^2 + 2\xi_x \xi_y u_x u_y + \xi_y^2 u_y^2\end{aligned}$$

La integral de la Ec.(2.30) queda

$$\begin{aligned}\int \psi(\boldsymbol{\xi}) e^{\left[-\frac{\xi^2}{2RT}\right]} \bar{f}_{\text{eq}} d\boldsymbol{\xi} &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{m+n} \left[\left(1 - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right) J_m J_n \right. \\ &\quad + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{RT}} (u_x J_{m+1} J_n + u_y J_m J_{n+1}) \\ &\quad \left. + \frac{1}{RT} (u_x^2 J_{m+2} J_n + 2u_x u_y J_{m+1} J_{n+1} + u_y^2 J_m J_{n+2}) \right] \quad (2.32)\end{aligned}$$

Donde se define $\bar{f}_{\text{eq}} := \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} \left[1 + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u})^2}{2R^2 T^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right]$ y

$$J_k = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\zeta^2} \zeta^k d\zeta, \quad \zeta = \frac{\xi}{\sqrt{2RT}}$$

Representa el k -ésimo momento de la función de peso $e^{-\zeta^2}$ sobre el eje x .

Como en la integral J_k el integrando es un polinomio de grado k multiplicado por una función gaussiana una opción para evaluarla es emplear una cuadratura Gauss-Hermite [13][pag.224], reconociendo a los polinomios de Hermite como su base ortogonal [2][pag.818].

Dado que la Ec.(2.32) involucra evaluar J_k, J_{k+1}, J_{k+2} , para $k = m$ y $k = n$, se puede usar la cuadratura de Hermite a tercer orden dada por [1][pag.890]

$$J_k = \sum_{\alpha=1}^3 \omega_{\alpha} \zeta_{\alpha}^k \quad (2.33)$$

donde $\omega_{\alpha} = \frac{2^{n-1} n! \sqrt{\pi}}{n^2 [H_{n-1}(\zeta_{\alpha})]^2}$, con H_n el polinomio de Hermite de grado n , y ζ_{α}^k el k -ésimo cero del α -ésimo polinomio de Hermite.

Tomando entonces las raíces del tercer polinomio de Hermite, $\zeta_1 = 0, \zeta_{2,3} = \pm\sqrt{\frac{3}{2}}$ se tienen el conjunto de vectores, representado en la Fig.(2.1), en todo el espacio

$$\mathbf{e}_{\alpha} = \begin{cases} (0, 0) c & \alpha = 0 \\ (\pm 1, 0), (0, \pm 1) c & \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ (\pm 1, \pm 1) c & \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (2.34)$$

Para $c = \sqrt{3RT}$. A c se conoce como velocidad del lattice y esta dada por $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ [22]. Generalmente se usan pasos de discretización espacial y temporal unitarios, i.e. $\Delta x = \Delta t = 1$.

Usando los pesos $\omega_1 = \frac{2}{3}\sqrt{\pi}$, $\omega_{2,3} = \frac{1}{6}\sqrt{\pi}$ se tienen los factores

$$\omega_\alpha = \frac{\omega_i \omega_j}{\pi} \begin{cases} \frac{4}{9} & [i = j = 1] & \alpha = 0 \\ \frac{1}{9} & [i = 2, j = 1, \dots] & \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ \frac{1}{36} & [i = j = 2, \dots] & \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (2.35)$$

Por lo que la Ec.(2.33) permite escribir la Ec.(2.32) como

$$\int \psi(\boldsymbol{\xi}) e^{\left[-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}\right]} \bar{f}_{\text{eq}} d\boldsymbol{\xi} = \sum_i^3 \sum_j^3 \psi(\boldsymbol{\xi}_\alpha) \frac{\rho \omega_i \omega_j}{\pi} \left[1 + \frac{1}{RT} (\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{u}) + \frac{1}{2R^2 T^2} (\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{1}{RT} (\mathbf{u}^2) \right]$$

Con lo que al emplear las Ecs.(2.34)-(2.35), junto a la sustitución $\boldsymbol{\xi}_\alpha = \sqrt{2RT} \boldsymbol{\zeta}_\alpha$, se puede reconocer la función de equilibrio discreta

$$f_\alpha^{\text{eq}} = \omega_\alpha \rho \left[1 + \frac{3}{c^2} (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2c^4} (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2} (\mathbf{u}^2) \right] \quad (2.36)$$

Como solo se consideran tres raíces ζ_1 , ζ_2 y ζ_3 la velocidad del sonido esta relacionada con la velocidad del lattice por medio del factor $\frac{1}{\sqrt{3}}$, esto es, $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$.

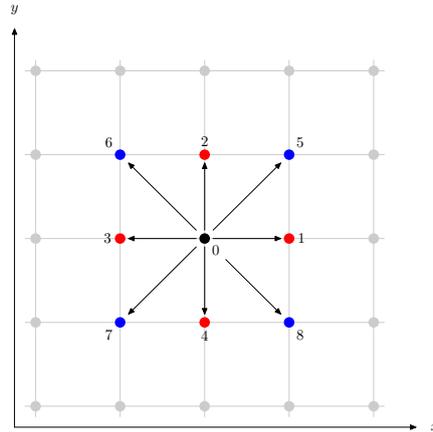


Fig. 2.1.: Red usada en el esquema D2Q9 para $c = 1$. Se tiene de color rojo a los nodos denominados **primeros vecinos** (1,2,3,4) y de color azul a los nodos denominados **segundos vecinos** (5,6,7,8).

Antes de introducir el esquema tridimensional se puede usar este esquema bidimensional para explicar el algoritmo que sigue el método de Boltzmann en una malla, representado en la Fig.(2.2).

- A un tiempo fijo t para un punto en la posición $\mathbf{x} = (x_i, y_j)$ se conoce la función de distribución $f_\alpha(x_i, y_j, t)$ para toda α .
- Se calcula para el tiempo t y la posición (x_i, y_j) los campos macroscópicos (ρ, \mathbf{u}) . Con esto se computa la función de equilibrio f_α^{eq} de la Ec.(2.36).
- Se calcula la función de distribución en la dirección α para el nuevo tiempo $t + \Delta t$ y la nueva posición $\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t$, i.e. se obtiene $f_\alpha(x_i + \mathbf{e}_{\alpha x} \Delta t, y_j + \mathbf{e}_{\alpha y} \Delta t, t + \Delta t)$.
- Se realiza el paso anterior para todas las posiciones (x_i, y_j) y esto hace que se tenga $f_\alpha(x_i, y_j, t + \Delta t)$ para toda α .

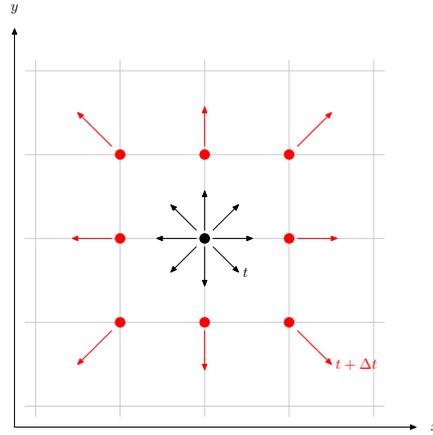


Fig. 2.2.: Representación del algoritmo de Boltzmann en una malla. En color **negro** se muestra un esquema de las f_α 's en un punto \mathbf{x} al tiempo t y las f_α 's en color **rojo** el paso de tiempo $t + \Delta t$ de los vecinos de \mathbf{x} calculadas a partir de los valores en (\mathbf{x}, t) .

2.3.2. Esquema D3Q27

La extensión inmediata del esquema 2D a un espacio 3D es tomar la idea del producto de polinomios $\psi = \xi_x^m \xi_y^n \xi_z^p$ y seguir el mismo procedimiento del caso bidimensional para llegar a una cuadratura Gauss-Hermite. En esta ocasión el conjunto de vectores \mathbf{e}_α , cuya representación es la Fig.(2.3), es

$$\mathbf{e}_\alpha = \begin{cases} (0, 0, 0) c & \alpha = 0 \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1) c & \alpha = 1, 2, \dots, 6 \\ (\pm 1, \pm 1, 0), (\pm 1, 0, \pm 1), (0, \pm 1, \pm 1) c & \alpha = 7, 8, \dots, 18 \\ (\pm 1, \pm 1, \pm 1) c & \alpha = 19, 20, \dots, 26 \end{cases} \quad (2.37)$$

Los factores de peso son

$$w_\alpha = \frac{\omega_i \omega_j \omega_k}{\pi^{\frac{3}{2}}} \begin{cases} \frac{8}{27} & [i = j = k = 2] & \alpha = 0 \\ \frac{2}{27} & [i = j = 2, k = 1 \dots] & \alpha = 1, 2, \dots, 6 \\ \frac{1}{54} & [i = j = 1, k = 2 \dots] & \alpha = 7, 8, \dots, 16 \\ \frac{1}{216} & [i = j = k = 1, \dots] & \alpha = 19, 20, \dots, 26 \end{cases} \quad (2.38)$$

Donde ω_i , ω_j y ω_k están dados por los valores usados en el esquema D2Q9.

De esta forma la Ec.(2.30) queda

$$\int \psi(\boldsymbol{\xi}) e^{\left[-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}\right]} f_{\text{eq}} d\boldsymbol{\xi} = \frac{\rho}{\pi^{\frac{3}{2}}} \sum_i^3 \sum_j^3 \sum_k^3 \omega_i \omega_j \omega_k \psi(\boldsymbol{\xi}_\alpha) \left[1 + \frac{1}{RT} (\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{u}) + \frac{1}{2R^2T^2} (\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{1}{RT} (\mathbf{u}^2) \right]$$

De tal manera que juntando las Ecs.(2.37)-(2.38) y la sustitución $\boldsymbol{\xi}_\alpha = \sqrt{2RT} \boldsymbol{\zeta}_\alpha$ la función de equilibrio discreta es

$$f_\alpha^{\text{eq}} = \omega_\alpha \rho \left[1 + \frac{3}{c^2} (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2c^4} (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2} (\mathbf{u}^2) \right] \quad (2.39)$$

Copiar la idea del producto de polinomios usada en el modelo 2D para un modelo 3D es inmediato y hace que la función de equilibrio del esquema D2Q9 sea similar a la del esquema D3Q27 con la diferencia de los factores ω_α . Estos valores determinan la contribución de la función de distribución en la dirección \mathbf{e}_α , i.e. el peso que tendrá un cambio del fluido en esa dirección.

Para el caso de un fluido incompresible la densidad es aproximadamente una constante ρ_0 y sus fluctuaciones son del orden $\mathcal{O}(M^2)$ en el límite $M \rightarrow 0$ [22]. Debido a esto, algunos autores [22, 19], sugieren hacer una modificación a las Ecs.(2.36) y (2.39) para que el método reproduzca más acertadamente las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles. Tal modificación considera que $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ con $\delta\rho$ una perturbación que escala como el número de Mach. Sustituyendo esta densidad en las Ecs.(2.36) y (2.39) así como despreciando términos de la forma $\delta\rho M$, $\delta\rho M^2$ se tiene para $c = 1$ la función

$$f_\alpha^{\text{eq}} = \omega_\alpha \left\{ \rho + \rho_0 \left[3 (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} (\mathbf{u}^2) \right] \right\} \quad (2.40)$$

Esta expresión como es a lo más de orden $\mathcal{O}(M^2)$ es compatible con la aproximación de Mach bajo hecha de la Ec.(2.28).

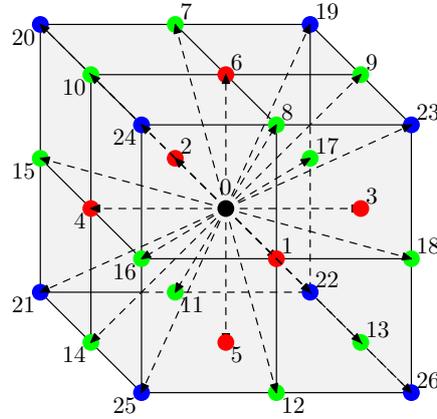


Fig. 2.3.: Red usada en el esquema D3Q27. Se tiene en color rojo a los **primeros vecinos** (1,...,6), en verde a los **segundos vecinos** (7,...,18) y en azul a los **terceros vecinos** (19,...,26).

El cálculo de los campos hidrodinámicos, Ecs.(2.26)-(2.27), también se verán modificados si se desea considerar la Ec.(2.40) de tal manera que el cálculo de los campos está dado por

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \quad (2.41)$$

$$\rho_0 \mathbf{u} = \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha} \quad (2.42)$$

Falta explicar en el método cómo reproducir condiciones de fronteras sólidas inmersas en la malla o en las fronteras. Antes de eso, se muestra cómo del método se pueden recuperar las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles.

2.4. Del método de Boltzmann en una malla a las ecuaciones de Navier–Stokes

A continuación se parte de la ecuación de Boltzmann en una malla para derivar las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles. El proceso consiste en escribir a cierta precisión la ecuación de evolución para la función de distribución f_{α} , Ec.(2.25), y hacer uso de las Ecs.(2.41)-(2.42) para reconocer ecuaciones macroscópicas.

Tomando la evolución espacial y temporal de la función de distribución $f_{\alpha}^{+} = f_{\alpha}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t + \Delta t)$, donde $\Delta\mathbf{x} = \mathbf{e}_{\alpha}\Delta t$, y desarrollando en serie de Taylor a segundo orden en

Δx y Δt se tiene

$$f_\alpha^+ = f_\alpha + \Delta t \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) + \Delta t \left[\frac{1}{2!} (\mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha : \nabla \nabla) + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \right\} f_\alpha \quad (2.43)$$

Donde $f_\alpha = f_\alpha(\mathbf{x}, t)$, $(\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) = \sum_i (\mathbf{e}_\alpha)_i \frac{\partial}{\partial x_i}$ y $(\mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha : \nabla \nabla) = \sum_i \sum_j (\mathbf{e}_\alpha)_i (\mathbf{e}_\alpha)_j \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j}$.

Conectando este resultado a la Ec.(2.25) se obtiene

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) + \varepsilon \left(\frac{1}{2!} (\mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha : \nabla \nabla) + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \right] f_\alpha = \frac{1}{\varepsilon} \Omega(f_\alpha) \quad (2.44)$$

Donde $\Delta t = \varepsilon$ y $\Omega(f_\alpha) = -\frac{\varepsilon}{\tau} (f_\alpha - f_\alpha^{\text{eq}})$.

Para usar la Ec.(2.44) y recuperar las ecuaciones de Navier–Stokes se debe considerar una expansión de Chapman–Enskog en la que una función se puede expresar en términos de su valor en equilibrio y una pequeña contribución de su término de no equilibrio.

Por lo tanto, la función de distribución se descompone en $f_\alpha = f_\alpha^{\text{eq}} + \varepsilon f_\alpha^{\text{neq}}$. A su vez, la función de no equilibrio se puede tomar como $f_\alpha^{\text{neq}} = f_\alpha^1 + \varepsilon f_\alpha^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ [10], donde las funciones $f^{(1,2)}$ cumplen las constricciones [10]

$$\sum_\alpha f_\alpha^{(1,2)} = 0 \quad ; \quad \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{(1,2)} = \mathbf{0}$$

Escribiendo el operador $\Omega(f_\alpha)$ en su serie de Taylor para un tamaño de paso proporcional a εf_α^1 alrededor de la función de equilibrio, i.e. si $f_\alpha = f_\alpha^{\text{eq}} + \varepsilon f_\alpha^1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$, se tiene

$$\Omega(f_\alpha) = \Omega(f_\alpha^{\text{eq}}) + \varepsilon \frac{\partial \Omega(f_\alpha^{\text{eq}})}{\partial f_\beta} f_\beta^1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Por lo que en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ se obtiene un operador de colisión linealizado

$$\frac{\Omega(f_\alpha)}{\varepsilon} = \frac{M_{\alpha\beta}}{\varepsilon} (f_\beta - f_\beta^{\text{eq}}) \quad (2.45)$$

Donde $M_{\alpha\beta} = \frac{\partial \Omega(f_\alpha^{\text{eq}})}{\partial f_\beta}$ se denomina matriz de colisión [23] y expresa la razón de dispersión entra las direcciones α y β . En el modelo BGK esta matriz es $M_{\alpha\beta} = -\frac{1}{\tau} \delta_{\alpha\beta}$.

También se requiere hacer una expansión de multiescala en los operadores de derivada espacial y temporal [18], i.e. $\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \mathcal{O}(\varepsilon^3)$ así como $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_2} + \mathcal{O}(\varepsilon^3)$. Estas ecuaciones asumen que la escala de tiempo para el término difusivo t_2

es mucho menor a la escala de tiempo del término convectivo t_1 [10].

Y finalmente se tiene que expresar el término $-\frac{1}{\tau}(f_\alpha - f_\alpha^{\text{eq}})$ en función de los valores $f^{(1,2)}$, i.e.

$$-\frac{1}{\tau}(f_\alpha - f_\alpha^{\text{eq}}) = -\frac{1}{\tau}(\varepsilon f_\alpha^{\text{neq}}) = -\frac{1}{\tau}(\varepsilon f_\alpha^1 + \varepsilon^2 f_\alpha^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)) \quad (2.46)$$

De tal forma que comparando los términos de distinto orden en ε para las Ecs.(2.44) y (2.46) se tiene

$$(\varepsilon^1) \quad \rightarrow \quad \left[\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_1 \right] f_\alpha^{\text{eq}} = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^1 \quad (2.47)$$

$$(\varepsilon^2) \quad \rightarrow \quad \left[\frac{\partial f_\alpha^1}{\partial t_1} + \frac{\partial f_\alpha^{\text{eq}}}{\partial t_2} + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_1) f_\alpha^1 + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_2) f_\alpha^{\text{eq}} + \frac{1}{2!} (\mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha : \nabla_1 \nabla_1) f_\alpha^{\text{eq}} \right. \\ \left. + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_1) \frac{\partial}{\partial t_1} f_\alpha^{\text{eq}} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} f_\alpha^{\text{eq}} \right] = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^2 \quad (2.48)$$

Donde $\nabla_1 = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial y_1}, \dots \right)$ y $\nabla_2 = \left(\frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial y_2}, \dots \right)$.

Una manera de empezar a reducir términos en estas ecuaciones es hacer una suma sobre α . Por ejemplo, para la Ec.(2.47) una suma sobre el índice α resulta en

$$0 = \sum_\alpha \left[\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_1 \right] f_\alpha^{\text{eq}} = \left[\frac{\partial}{\partial t_1} \sum_\alpha f_\alpha^{\text{eq}} + \nabla_1 \cdot \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{\text{eq}} \right]$$

Donde se usa del lado izquierdo que sumar el índice sobre f^1 es igual a cero. A su vez por las Ecs.(2.41)-(2.42), que deben satisfacerse también para $f_\alpha = f_\alpha^{\text{eq}}$, la ecuación de arriba se transforma en

$$0 = \frac{\partial}{\partial t_1} \rho + \nabla_1 \cdot (\rho_0 \mathbf{u}) \quad (2.49)$$

Multiplicando la Ec.(2.47) por \mathbf{e}_α y sumando sobre α se obtiene

$$\mathbf{0} = \frac{\partial}{\partial t_1} (\rho_0 \mathbf{u}) + \nabla_1 \cdot \mathbf{\Lambda}^0 \quad (2.50)$$

Donde $\Lambda_{ij}^0 = \sum_\alpha (\mathbf{e}_\alpha)_i (\mathbf{e}_\alpha)_j f_\alpha^{\text{eq}}$. Esta expresión de Λ_{ij}^0 corresponde al orden cero del tensor de flujo de momento discreto $\Lambda_{ij}^n = \sum_\alpha (\mathbf{e}_\alpha)_i (\mathbf{e}_\alpha)_j f_\alpha^n$.

Las Ecs.(2.49)-(2.50) son las ecuaciones de movimiento a primer orden en ε . Usando la expresión de la función de equilibrio de la sección anterior se tiene que $\Lambda_{ij}^0 =$

$p\delta_{ij} + \rho_0 u_i u_j$ [10, 22]. Así pues, este valor del tensor permite escribir las Ecs.(2.49)-(2.50) como

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \rho + \nabla_1 \cdot (\rho_0 \mathbf{u}) = 0 \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial}{\partial t_1} (\rho_0 \mathbf{u}) + (\mathbf{u} \cdot \nabla_1) (\rho_0 \mathbf{u}) = -\nabla_1 p \quad (2.52)$$

Que son las ecuaciones de Euler [25][pag.3] y expresan el movimiento de un fluido inviscido.

Aparece el término p que representa la presión del fluido y la cual en el método de Boltzmann en una malla se relaciona con la densidad ρ por medio de la ecuación $\rho = 3p$ [10].

Para hacer lo mismo con el término de orden ε^2 , el cual es necesario para incluir la información de la viscosidad del fluido, se tiene $\mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha : \nabla \nabla = (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla)$. Por lo que la Ec.(2.48) se puede reescribir en la forma

$$-\frac{1}{\tau} f_\alpha^2 = \frac{\partial}{\partial t_2} f_\alpha^{\text{eq}} + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_2) f_\alpha^{\text{eq}} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left[\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_1 \right] f_\alpha^1 \quad (2.53)$$

Donde se usa la Ec.(2.47) para transformar los operadores $\left(\frac{\partial}{\partial t_1}\right)$, $(\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_1)$ que afectan a f_α^{eq} de la Ec.(2.48) y poder llegar a la igualdad de arriba.

Por lo tanto, si se suma la Ec.(2.53) sobre el índice α se obtiene

$$0 = \frac{\partial}{\partial t_2} \rho + \nabla_2 \cdot (\rho_0 \mathbf{u}) \quad (2.54)$$

Mientras que multiplicar la Ec.(2.53) por \mathbf{e}_α y sumar sobre α lleva a

$$\mathbf{0} = \frac{\partial (\rho_0 \mathbf{u})}{\partial t_2} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \nabla_1 \cdot \mathbf{\Lambda}^1 + \nabla_2 \cdot \mathbf{\Lambda}^0 \quad (2.55)$$

Las Ecs.(2.54)-(2.55) son la ley de conservación de masa y flujo de momento a segundo orden en ε del método de Boltzmann en una malla. Es de esperarse que estas relaciones sean justamente las ecuaciones de Navier–Stokes y al igual que se hizo con las ecuaciones de Euler se deben cambiar a expresiones más conocidas.

Usando la Ec.(2.47) para transformar el tensor $\Lambda_{ij}^1 = \sum_\alpha (\mathbf{e}_\alpha)_i (\mathbf{e}_\alpha)_j f^1$ se tiene

$$\begin{aligned} \Lambda_{ij}^1 &= -\tau \sum_\alpha (\mathbf{e}_\alpha)_i (\mathbf{e}_\alpha)_j \left[\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_1 \right] f^{\text{eq}} \\ &= -\tau \left[\rho_0 \frac{\partial}{\partial t_1} (u_i u_j) + \frac{1}{3} c^2 \rho_0 \left(\nabla_1^i u_j + \nabla_1^j u_i \right) \right] \end{aligned}$$

Donde se usa que $\sum_{\alpha} (\mathbf{e}_{\alpha})_i (\mathbf{e}_{\alpha})_j (\mathbf{e}_{\alpha})_k f_{\alpha}^{\text{eq}} = \frac{1}{3} c^2 \rho_0 (\delta_{ij} u_k + \delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i)$ [10] así como la expresión de Λ_{ij}^0 para la última igualdad. Usando este resultado junto con $\nabla_2 \cdot \Lambda_{ij}^0 = (\mathbf{u} \cdot \nabla_2) (\rho_0 \mathbf{u}) + \nabla_2 p$ se tiene

$$\left[\frac{\partial}{\partial t_2} \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla_2) \right] (\rho_0 \mathbf{u}) = -\nabla_2 p + c^2 \left(\frac{2\tau - 1}{6} \right) \rho_0 \left[\frac{3}{c^2} \frac{\partial}{\partial t_1} u_i u_j + \nabla_1 \cdot (\nabla_1^j u_i + \nabla_1^i u_j) \right]$$

Por lo tanto, omitiendo términos que escalan como $\mathcal{O}(M^3)$ se llega a

$$\left[\frac{\partial}{\partial t_2} + (\mathbf{u} \cdot \nabla_2) \right] (\rho_0 \mathbf{u}) = -\nabla_2 p + \rho_0 \nu \nabla_1^2 \mathbf{u} \quad (2.56)$$

Donde la viscosidad cinemática esta relacionada con el tiempo de relajación como $\nu = \left(\frac{2\tau - 1}{6} \right) c^2$.

De esta forma, las ecuaciones que se obtienen al combinar los resultados de las Ecs.(2.51) y (2.54) así como las Ecs.(2.52) y (2.56), asociados a los ordenes ε^1 y ε^2 de la función de distribución $f_{\alpha}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t)$, son

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{u}) + \mathcal{O}(M^2) \\ D_t \mathbf{u} &= -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \nabla_1^2 \mathbf{u} + \mathcal{O}(M^3) \end{aligned}$$

Usando wue se puede escribir $\rho = \rho_0 + \delta \rho$ entonces

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathcal{O}(M^2) \quad (2.57)$$

$$D_t \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \nabla_1^2 \mathbf{u} + \mathcal{O}(M^3) \quad (2.58)$$

Que son las ecuaciones de Navier–Stokes para fluidos incompresibles.

Se debe observar que las últimas ecuaciones se obtienen bajo las siguientes hipótesis: Primero, aproximar a segundo orden en ε la función $f_{\alpha}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t)$ para mantener valida la suposición de velocidades pequeñas. Segundo, truncar a orden M^2 la ecuación de continuidad y a orden M^3 el balance de momento. Tercero, el valor de los tensores Λ_{ij}^0 y Λ_{ij}^1 se calcula usando las funciones de equilibrio de los esquemas D2Q9 y D3Q27. Y cuarto, tomar la densidad como constante con fluctuaciones pequeñas, i.e. $\rho = \rho_0 + \delta \rho$, para hacer que la ecuación de continuidad sea $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$.

2.5. Condiciones de Frontera Computacionales

Como la Ec.(2.25) actualiza la distribución f_{α} en la posición $\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \Delta t$, habrá nodos cercanos a una frontera sólida (pared), para los cuales algunos de sus vecinos están

localizados fuera del dominio fluido. En este caso hay valores de la distribución f_α , del nodo en la posición \mathbf{x} , que se desconocen al tiempo $t + \Delta t$, pues vienen del nodo en el sólido. Las condiciones de frontera serán las responsables de determinar estas incógnitas.

Para reproducir condiciones de frontera de no deslizamiento en el método de Boltzmann en una malla (LBGK) existen los esquemas *rebote*, *rebote a medio camino* [41] y el método de extrapolación [19], entre otros. Los dos primeros métodos son fáciles de implementarse en el algoritmo LBGK pero no logran simular fronteras móviles, inyección de masa [32] o geometrías curvas [27]. Por su parte, el método de extrapolación aunque más complicado de introducir al algoritmo LBGK se puede usar para fronteras arbitrarias y en movimiento. Este último es el que se implementa en el modelo axialsimétrico que se describe en el siguiente capítulo.

A continuación comenzamos por explicar el método rebote y rebote a medio camino para después describir el método de extrapolación.

2.5.1. Rebote

En este método se considera una reflexión del valor de la función de distribución en la dirección \mathbf{e}_α , en el nodo \mathbf{x} al tiempo t , que apunta a una pared al tiempo $t + \Delta t$. La ecuación que se tiene es

$$f_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_{-\alpha}(\mathbf{x}, t + \Delta t) \quad (2.59)$$

Donde $f_{-\alpha}$ representa usar la dirección opuesta a \mathbf{e}_α , i.e. $f_{-\alpha}(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, -\mathbf{e}_\alpha, t)$.

Hacer uso de la Ec.(2.59) resulta en la condición macroscópica de velocidad de no deslizamiento en los nodos fuera del dominio fluido (nodos sólidos). Esto debido a que un valor de la función de distribución que sale en la dirección \mathbf{e}_α al tiempo t , entra en la dirección opuesta $-\mathbf{e}_\alpha$ al tiempo $t + \Delta t$. Por lo tanto, el valor promedio de la velocidad en la posición \mathbf{x} es cero representando una pared sin deslizamiento sobre nodos de la malla, ver lado izquierdo de la Fig.(2.4).

Se sabe que este método reproduce condiciones de no deslizamiento en la fronteras sólidas a primer orden en Δx y Δt [41].

2.5.2. Rebote a medio camino

Este método sigue considerando una reflexión de la dirección \mathbf{e}_α para la función de distribución f_α que apunte a una pared. Ahora se implementa el cambio de dirección en la ecuación de evolución del método LBGK, esto es

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = f_{-\alpha}(\mathbf{x}, t + \Delta t) \quad (2.60)$$

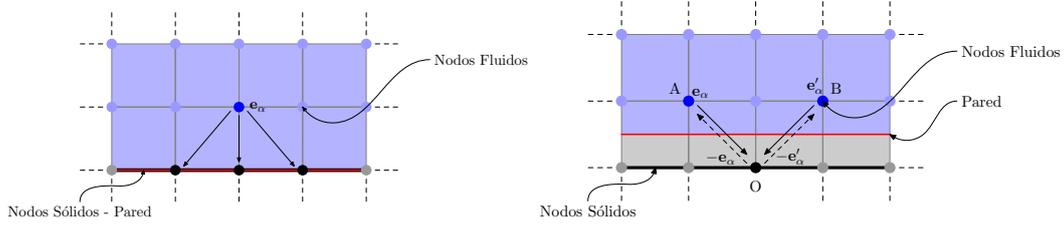


Fig. 2.4.: A la izquierda representación del método rebote. A la derecha representación del método rebote a medio camino.

Tal modificación equivale a una pared a medio camino entre un nodo sólido y un nodo fluido. Para entender esto consideresé las funciones de distribución, de las direcciones \mathbf{e}_α y \mathbf{e}'_α , que llegan al nodo sólido O desde los nodos fluidos A y B respectivamente, ver lado derecho de la Fig(2.4).

Usando la interpretación del esquema de rebote la función de distribución de las direcciones $-\mathbf{e}_\alpha$ y $-\mathbf{e}'_\alpha$ que llegan a A y B, respectivamente, desde O son distintas de cero. Esto es diferente de tener una pared sin deslizamiento en O.

Si se modifica la interpretación a tener una pared a medio camino entre los nodos O y A-B, entonces un punto sobre la pared recibe el valor de la función de distribución en la dirección \mathbf{e}_α y al mismo tiempo el de la función de distribución en la dirección $-\mathbf{e}_\alpha$. Como estos valores por construcción son los mismos entonces tener una pared a medio camino hace que la Ec.(2.60) sea una pared sin deslizamiento.

Al ser una reinterpretación del método de rebote el orden de la velocidad que representa usar la Ec.(2.60) es de primer orden en posición y tiempo.

2.5.3. Método de extrapolación

En este método la idea es descomponer la función de distribución de un nodo en una parte de equilibrio y otra de no equilibrio. Con esto se pretende reproducir los valores de la función de distribución que son procedentes de nodos sólidos como si fueran nodos fluidos [19].

La parte de no equilibrio está dada por una función de equilibrio ficticia, y adaptada a recuperar la velocidad en la pared a través de una extrapolación de los campos hidrodinámicos ρ y \mathbf{u} de los nodos fluidos cercanos. La parte de no equilibrio se calcula con los valores de no equilibrio de los nodos fluidos.

Supongasé que se tiene alguna curva b que representa la pared entre un nodo fluido en la posición \mathbf{x}_f y un nodo sólido en la posición \mathbf{x}_w , ver Fig.(2.5). Estos nodos están

relacionados por la ecuación $\mathbf{x}_f = \mathbf{x}_w + \mathbf{e}_\alpha \delta$, para alguna α , donde δ es el paso de discretización de la red ($\delta = \delta x = \delta t$).

La distancia relativa, a lo largo de la línea que va de \mathbf{x}_f a \mathbf{x}_w , entre la pared y el nodo fluido es

$$\Delta = \left| \frac{\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_b}{\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_w} \right|$$

Donde \mathbf{x}_b es el punto sobre la pared.

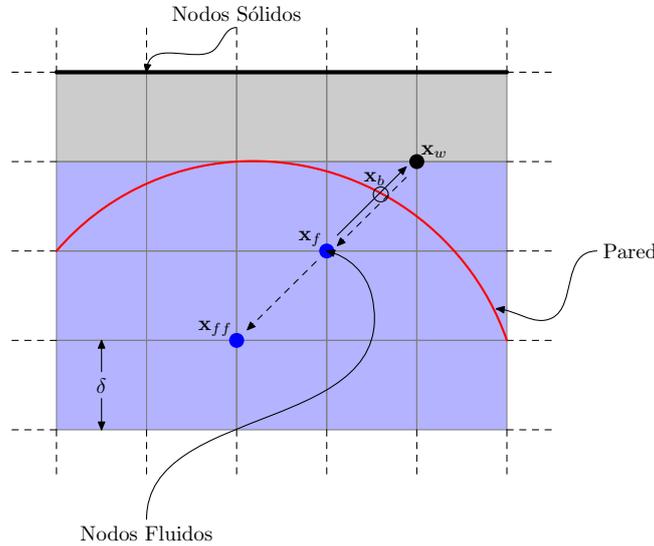


Fig. 2.5.: Esquema del método de extrapolación para una frontera curva.

Entonces para la descomposición $f_\alpha(\mathbf{x}_w) = f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}_w) + f_\alpha^{\text{neq}}(\mathbf{x}_w)$, la función de equilibrio f_α^{eq} se aproxima por

$$f_\alpha^{\text{eq}*}(\mathbf{x}_w, t) = \omega_\alpha \left\{ \rho_w^* + \rho_0 \left[3(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}_w^*) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}_w^*)^2 - \frac{3}{2}(\mathbf{u}_w^{*2}) \right] \right\} \quad (2.61)$$

Donde ρ_w^* y \mathbf{u}_w^* representan valores extrapolados de los campos hidrodinámicos en el nodo sólido $\rho(\mathbf{x}_w)$ y $\mathbf{u}(\mathbf{x}_w)$. De tal manera que las aproximaciones son

$$\rho_w^* = \rho(\mathbf{x}_f)$$

$$\mathbf{u}_w^* = \begin{cases} \mathbf{u}_m & \text{si } \Delta \geq \frac{3}{4} \\ \Delta \mathbf{u}_m + (1 - \Delta) \mathbf{u}_n & \text{si } \Delta < \frac{3}{4} \end{cases}$$

Donde \mathbf{u}_m y \mathbf{u}_n son

$$\mathbf{u}_m = \frac{\mathbf{u}_b + (\Delta - 1)\mathbf{u}_f}{\Delta} \quad \text{y} \quad \mathbf{u}_n = \frac{2\mathbf{u}_b + (\Delta - 1)\mathbf{u}_{ff}}{1 + \Delta}$$

Para \mathbf{u}_b la velocidad impuesta en la pared, $\mathbf{u}_f = \mathbf{u}(\mathbf{x}_f)$ y $\mathbf{u}_{ff} = \mathbf{u}_{ff}(\mathbf{x}_{ff})$ con $\mathbf{x}_{ff} = \mathbf{x}_f + \mathbf{e}_\alpha \delta$, ver Fig.(2.5). Usar $\mathbf{u}_w = \mathbf{u}_m$ es mas preciso que la aproximación para $\Delta < \frac{3}{4}$, pero se especifica tal división ya que si Δ es pequeño, el valor de \mathbf{u}_m puede volverse grande llevando a inestabilidades numéricas [19].

Como en el modelo LBGK las velocidades de un punto fluido son a un número de Mach bajo, la diferencia entre \mathbf{u}_w^* y $\mathbf{u}(\mathbf{x}_w)$ es de orden δ^2 . Por lo tanto, la diferencia entre la función de equilibrio aproximada $f_\alpha^{\text{eq}*}$ y f_α^{eq} es también de orden δ^2 .

La parte de no equilibrio se aproxima por

$$f_\alpha^{\text{neq}*}(\mathbf{x}_w, t) = \begin{cases} f_\alpha^{\text{neq}}(\mathbf{x}_f, t) & \text{si } \Delta \geq \frac{3}{4} \\ \Delta f_\alpha^{\text{neq}}(\mathbf{x}_f, t) + (1 - \Delta) f_\alpha^{\text{neq}}(\mathbf{x}_{ff}, t) & \text{si } \Delta < \frac{3}{4} \end{cases} \quad (2.62)$$

Que es también a segundo orden en δ . Esto último ya que la función de no equilibrio se puede aproximar a primer orden en δ como $f_\alpha^{\text{neq}} = \delta f_\alpha^1$, para f_α^1 la función que se usa en la descomposición de Chapman–Enskog de la sección anterior.

Por lo tanto, al sustituir la descomposición $f_\alpha(\mathbf{x}_w) = f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}_w) + f_\alpha^{\text{neq}}(\mathbf{x}_w)$ en la Ec.(2.25) y usar las aproximaciones a segundo orden en δ , se tiene que los valores de las f_α 's que se desconocen por estar cerca de una pared se calculan con

$$f_\alpha(\mathbf{x}_w + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = f_\alpha^{\text{eq}*}(\mathbf{x}_w, t) + [1 - \tau^{-1}] f_\alpha^{\text{neq}*}(\mathbf{x}_w, t) \quad (2.63)$$

Este método es una extensión del método de extrapolación propuesto por Chen² [11] y tiene las ventajas de que fácilmente se puede extender a considerar condiciones de frontera para la densidad o temperatura.

²En este caso la descomposición de la función de distribución en un nodo sólido sigue la ecuación $f_\alpha^{-1} + f_\alpha^{+1} = 2f_\alpha^0$, donde los superíndices -1 , 0 y $+1$ representan al nodo sólido, primer nodo fluido y segundo nodo fluido, a lo largo de la dirección \mathbf{e}_α , respectivamente.

Método de Boltzmann en una malla con simetría axial

Suponga el flujo en torno a una frontera con simetría axial simulado a través del método LBGK en el esquema D3Q27. Sea el eje y el eje de simetría axial de la frontera, ver Fig.(3.1). Si se buscan soluciones con simetría axial, entonces el plano (x, y) es un plano de simetría.

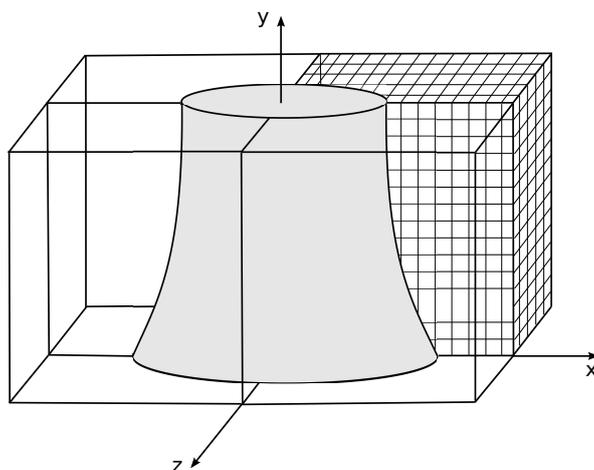


Fig. 3.1.: Esquema del dominio computacional. Se muestra la discretización de un cuadrante así como una frontera con simetría axial.

La modificación propuesta pretende resolver la evolución de las distintas f_α 's en el plano (x, y) usando el esquema D3Q27 sin necesidad de emplear el método fuera de este plano de simetría. Sin embargo, la actualización de las f_α 's en el plano (x, y) depende de las f_α 's en los planos adyacentes y su evolución, ver Fig.(3.2). Estos planos son los planos $z = \pm 1$.

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE BOLTZMANN EN UNA MALLA CON SIMETRÍA AXIAL

Para restringir el cálculo al plano (x, y) la información requerida de los planos adyacentes será extrapolada usando el método de extrapolación para condiciones de frontera, presentado en el capítulo anterior, asumiendo que el flujo tiene simetría axial y por lo tanto los valores macroscópicos en los planos adyacentes pueden determinarse de los valores en el plano de simetría.

Cabe mencionar que el método de extrapolación no solo es para nodos sólidos fuera del dominio del fluido sino que también puede concebirse en nodos fluidos ya que se basa en extrapolar los campos de velocidad y presión que no se conocen en algún punto.

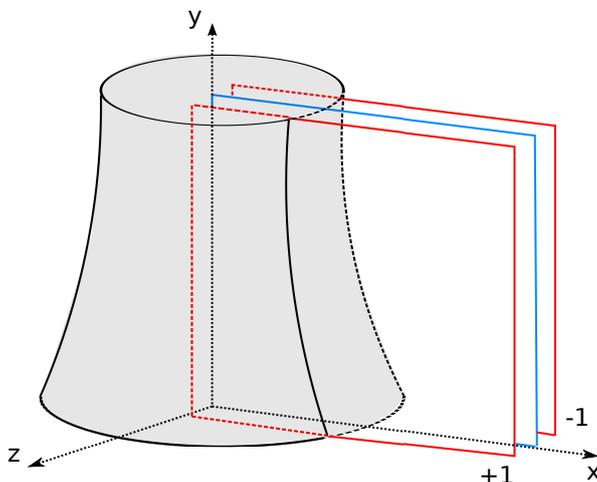


Fig. 3.2.: Esquema del plano de simetría (en azul) y los planos adyacentes (en rojo).

Tomesé un punto \mathbf{p}_0 dentro del plano de simetría y \mathbf{p}_1 en alguno de los planos adyacentes de modo que \mathbf{p}_0 es vecino de \mathbf{p}_1 en la dirección \mathbf{e}_α , ver Fig.(3.3).

Para el cálculo de la densidad y velocidad en \mathbf{p}_0 a un tiempo $t + \Delta t$ se requiere la información de la función de distribución en la dirección \mathbf{e}_α que proviene de \mathbf{p}_1 .

Dado que estos puntos se relacionan por la ecuación $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{e}_\alpha$, que conecta un punto dentro y fuera del plano de simetría, se puede aprovechar el método de extrapolación y hacer una descomposición de la función de distribución f_α , que da \mathbf{p}_1 a \mathbf{p}_0 , en una parte de equilibrio y otra de no equilibrio, i.e.

$$f_\alpha(\mathbf{p}_0, t + \Delta t) = f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{p}_0, t + \Delta t) + f_\alpha^{\text{neq}}(\mathbf{p}_0, t + \Delta t)$$

De tal manera al usar la función de equilibrio extrapolada, Ec.(3.1), y la función de no equilibrio al tiempo t , Ec.(3.2), la evolución de la función de distribución de los nodos fluidos, para las direcciones \mathbf{e}_α fuera del plano de simetría, es

$$f_\alpha(\mathbf{p}_0, t + \Delta t) = f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{p}_0, t + \Delta t; \rho^*, \mathbf{u}^*) + [1 - \tau^{-1}] f_\alpha^{\text{neq}}(\mathbf{p}_0, t) \quad (3.3)$$

Esta extrapolación en las f_α 's se usó para una simetría plana y poder entender como aprovechar el método de extrapolación. En este caso para un punto arbitrario en el plano de simetría, $\mathbf{p}_0 = (x_i, y_j, 0)$, el valor de su función de distribución en la dirección \mathbf{e}_α , que apunta fuera del plano, es idéntico al valor de la función de distribución en la misma dirección del punto \mathbf{p}_1 que se encuentra en alguno de los planos adyacentes.

Esto se puede escribir como $f_\alpha(\mathbf{p}_0 + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = f_\alpha(\mathbf{p}_1 + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t)$. Como $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}_1 + (0, 0, \mathbf{e}_{\alpha z})$ entonces

$$f_\alpha(\mathbf{p}_1 + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = f_\alpha(x_i + \mathbf{e}_{\alpha x}, y_j + \mathbf{e}_{\alpha y}, 0, t + \Delta t)$$

Por lo que la evolución de la función de distribución en la dirección \mathbf{e}_α fuera del plano de simetría solo dependerá de los valores que se encuentran en el plano de simetría.

3.1. Fronteras Cilíndricas

Se mostrará ahora como obtener una expresión de Δ , que aparece en el método de extrapolación del capítulo anterior, para imponer fronteras cilíndricas sólidas de radios R_\pm , ver Fig. (3.4).

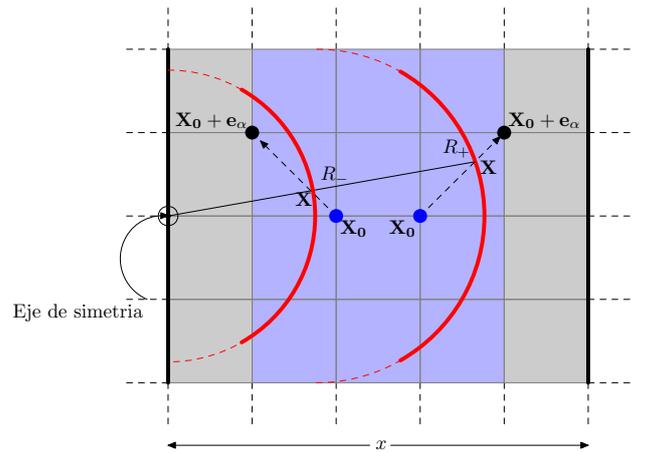


Fig. 3.4.: Representación de fronteras cilíndricas de radios R_\pm a lo largo del eje y .

Supongase que se tiene un punto $\mathbf{X}_0 = (x_0, y_0, 0)$ cuyo vecino es un nodo sólido. Se busca encontrar las coordenadas del punto $\mathbf{X} = (x, y, z)$ sobre el sólido, relativo a \mathbf{X}_0 , que cumpla las ecuaciones

$$\mathbf{X} \times \mathbf{e}_\alpha = \mathbf{0} \quad (3.4)$$

$$(x_0 \pm x)^2 + z^2 = R_\pm^2 \quad (3.5)$$

Para \mathbf{e}_α el conjunto de vectores, Ec.(2.37), del esquema D3Q27. En la segunda ecuación aparece \pm , así como R_\pm , ya que puede describir un cilindro antes o después de un nodo fluido. Por convención se toma el signo $+$ para un cilindro después de un nodo fluido y el signo $-$ para el otro caso.

La Ec.(3.4) es para tener alineado el punto \mathbf{X} al vector \mathbf{e}_α . La Ec.(3.5) por su parte es consecuencia de que la frontera entre un nodo sólido y un nodo fluido sea un cilindro a lo largo del eje y .

Como se usa la base de vectores del esquema D3Q27 se clasificará el valor de Δ de acuerdo a la componente $\mathbf{e}_{\alpha z}$. Con esto el cálculo de Δ se separa en los casos en que el punto de intersección con el sólido se encuentre dentro o fuera del plano de simetría.

3.1.1. Componente $\mathbf{e}_{\alpha z} = 0$ (Dentro del plano de simetría)

Se inicia por el caso en que el cilindro se encuentre después de un nodo fluido, i.e. tomar el subíndice $+$ de la Ec.(3.5). Las direcciones que se pueden tener son

$$\mathbf{e}_\alpha = \begin{cases} (+1, \pm 1, 0) \\ (+1, 0, 0) \end{cases}$$

Por lo tanto usando la Ec.(3.4) se obtienen las siguientes condiciones para las coordenadas del vector \mathbf{X}

$$z = 0 \quad ; \quad y = \begin{cases} \pm x \\ 0 \end{cases}$$

Al sustituir el resultado $z = 0$ en la Ec.(3.5) se tiene

$$x = R_+ - x_0$$

En caso de usar el subíndice $-$ el conjunto de direcciones ahora es $\mathbf{e}_\alpha = (-1, \pm 1, 0)$ y $(-1, 0, 0)$ con lo que de la Ec.(3.4) se tienen las mismas condiciones para las coordenadas de \mathbf{X} ($y = \pm x$ ó $y = 0$ y $z = 0$) y de la Ec.(3.5) se obtiene la expresión $x = -R_- + x_0$.

Como el vector \mathbf{X} representa la conexión entre un nodo fluido y un nodo sólido, entre los cuales esta la frontera sólida, su magnitud es por construcción el valor Δ que se busca. Entonces

$$\Delta = \|\mathbf{X}\| = |R_+ - x_0| \begin{cases} \|(+1, \pm 1, 0) \| \\ \|(+1, 0, 0) \| \end{cases} \quad \text{o} \quad | -R_- + x_0| \begin{cases} \|(-1, \pm 1, 0) \| \\ \|(-1, 0, 0) \| \end{cases}$$

Por lo tanto

$$\Delta = |R_{\pm} - x_0| \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{e}_{\alpha y} = 0 \\ \sqrt{2} & \text{si } \mathbf{e}_{\alpha y} \neq 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

Este resultado muestra que al estar en el plano de simetría una frontera cilíndrica entre un nodo fluido y un nodo sólido es la diferencia entre el radio de la frontera sólida y la componente x del nodo fluido multiplicado por la norma del vector \mathbf{e}_{α} . Se espera entonces que cuando se usen vectores \mathbf{e}_{α} fuera del plano de simetría se modifique la expresión en valor absoluto de la Ec.(3.6) pero que siga apareciendo la norma del vector \mathbf{e}_{α} .

3.1.2. Componente $\mathbf{e}_{\alpha z} \neq 0$ (Fuera del plano de simetría)

Nuevamente se inicia por el caso del subíndice $+$. Ahora los vectores \mathbf{e}_{α} toman los valores

$$\mathbf{e}_{\alpha} = \begin{cases} (+1, \pm 1, \pm 1) \\ (+1, 0, \pm 1) \end{cases}$$

Y en consecuencia al usar la Ec.(3.4) se obtienen las siguientes condiciones para las coordenadas del vector \mathbf{X}

$$z = \pm x \quad ; \quad y = \begin{cases} \pm x \\ 0 \end{cases}$$

Por lo que ahora al sustituir el resultado de $z = \pm x$ en la Ec.(3.5) se tiene

$$2x^2 + 2x_0x + x_0^2 = R_+^2$$

Y de esta ecuación se obtiene

$$x = \frac{1}{2} \left[-x_0 + \sqrt{(2R_+^2 - x_0^2)} \right]$$

Se toma el signo positivo de la raíz pues en el límite $x_0 \rightarrow R_+$, indica tener a la frontera sólida sobre el nodo fluido, se obtiene $x \rightarrow 0$, i.e. el vector \mathbf{X} tiende cero.

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE BOLTZMANN EN UNA MALLA CON SIMETRÍA AXIAL

En forma análoga, usar los vectores $\mathbf{e}_\alpha = (-1, \pm 1, \pm 1)$ ó $(-1, 0, \pm 1)$, que representan el caso del subíndice $-$ de la Ec.(3.5), lleva a la solución $x = \frac{1}{2} \left[x_0 - \sqrt{(2R_-^2 - x_0^2)} \right]$, donde se escoge el signo $-$ nuevamente por el resultado que se obtiene en el límite $x_0 \rightarrow R_-$.

De tal manera que el valor de Δ es

$$\Delta = \|\mathbf{X}\| = \left| \frac{1}{2} \left[-x_0 + \sqrt{(2R_+^2 - x_0^2)} \right] \right| \begin{cases} \|(+1, \pm 1, \pm 1) \| \\ \|(+1, 0, \pm 1) \| \end{cases}$$

o

$$\left| \frac{1}{2} \left[+x_0 - \sqrt{(2R_-^2 - x_0^2)} \right] \right| \begin{cases} \|(-1, \pm 1, \pm 1) \| \\ \|(-1, 0, \pm 1) \| \end{cases}$$

Esto es

$$\Delta = \frac{1}{2} \left| x_0 - \sqrt{(2R_\pm^2 - x_0^2)} \right| \begin{cases} \sqrt{2} & \text{si } \mathbf{e}_{\alpha y} = 0 \\ \sqrt{3} & \text{si } \mathbf{e}_{\alpha y} \neq 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

Tener una frontera sólida cilíndrica en términos de las Ecs.(3.6)-(3.7) permite escoger el radio de curvatura que tenga el cilindro.

En conclusión para un flujo con simetría axial aprovechar el método de extrapolación permite reducir los cálculos a un plano, al plano de simetría, sin cambiar la estructura del esquema D3Q27 ni incluir términos fuente al algoritmo de LBGK.

En los capítulos 2 y 3 hemos presentado una propuesta de un modelo axialsimétrico para el método computacional LBGK pasando por su desarrollo y relación que tiene con las ecuaciones de Navier–Stokes que indirectamente resuelve.

Resta validar a través de la simulación de flujos que presenten simetría axial el modelo del capítulo anterior. Algunos flujos con la característica de simetría axial son el flujo de Poiseuille [40][pag.42], el flujo de Womersley [40][pag.67] y el flujo circular de Taylor–Couette [12][pag.259]. Los dos primeros ejemplos se dan a lo largo de un cilindro ocasionados por un gradiente de presión, independiente del tiempo en Poiseuille y dependiente del tiempo en Womersley, que se balancea con el término de viscosidad. El tercer flujo, que se da entre dos cilindros concéntricos, es ocasionado por la rotación de los cilindros. En este caso existen dos soluciones con simetría axial, la solución básica para velocidades de rotación pequeñas se vuelve inestable a medida que se aumenta la velocidad de los cilindros y da origen a la segunda solución axialsimétrica. Esta inestabilidad es denominada *primera inestabilidad de Taylor*. Debido a la simetría de esta inestabilidad se pretende usar la propuesta de modelo LBGK axialsimétrico para obtener los vórtices que se generan en torno a los cilindros, característicos de este flujo secundario.

A continuación se detalla la solución analítica de estos flujos y se pone su comparación con datos que se obtienen de las simulaciones del modelo axialsimétrico D3Q27.

4.1. Flujo de Poiseuille

4.1.1. Solución Analítica

Considere un flujo unidireccional a lo largo de un cilindro infinito de radio a , Fig. 4.1.

Sea la coordenada x el eje axial del cilindro y suponga que el flujo es estacionario, i.e.

$$\mathbf{u}(r, \phi, x) = u_x(r, \phi, x) \mathbf{e}_x \quad (4.1)$$

Además suponga que el flujo es simétrico alrededor del eje x , esto es

$$\frac{\partial u_x}{\partial \phi} = 0 \quad (4.2)$$

De tal forma que estas hipótesis, Ecs.(4.1)-(4.2), reducen la ecuación de continuidad en coordenadas cilíndricas, Ec.(2.19), a

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = 0 \quad (4.3)$$

Por lo tanto, la velocidad solo será función de r , esto es, $\mathbf{u} = u_x(r) \mathbf{e}_x$.

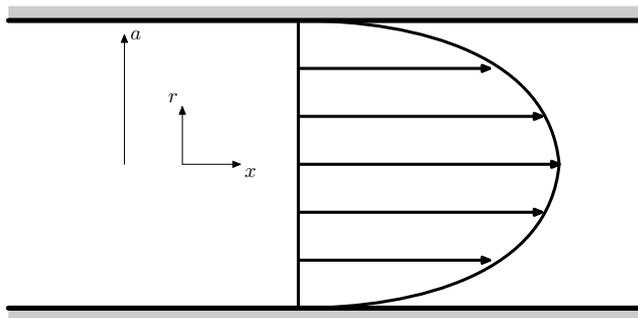


Fig. 4.1.: Perfil de velocidad para el flujo de Poiseuille a lo largo de un cilindro.

Con esta suposición acerca de la velocidad las ecuaciones de Navier–Stokes incompresibles en coordenadas cilíndricas, Ecs.(2.20)-(2.21)-(2.22), son

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\partial p}{\partial r} \\ 0 &= -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} \\ 0 &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{d^2 u_x}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_x}{dr} \right] \end{aligned}$$

Las dos primeras ecuaciones dan que la presión sólo es función de x . Por lo tanto, la única ecuación a resolver es

$$\frac{dp}{dx} = \frac{\mu}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du_x}{dr} \right) \quad (4.4)$$

Como en el lado derecho de esta ecuación la velocidad solo depende de r entonces el gradiente de presión es una constante $-\mathcal{G}$, y por lo tanto, para una presión mayor en la entrada que en la salida del cilindro se obtiene

$$-\mathcal{G} = \frac{\mu}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du_x}{dr} \right) \quad (4.5)$$

Donde \mathcal{G} es una cantidad positiva.

Para validar el modelo axialsimétrico se debe expresar la Ec.(4.5) en términos de cantidades adimensionales de tal manera que la solución analítica no contenga magnitudes físicas. De esta forma u_x se puede comparar con datos de una simulación.

Para esto se reescalan las ecuaciones tomando el radio del cilindro, la viscosidad y el gradiente de presión constante cuyas dimensiones son $[a] = \text{Distancia}$, $[\mu] = \frac{\text{Masa}}{\text{Tiempo Distancia}}$ y $[\mathcal{G}] = \frac{\text{Masa}}{\text{Tiempo}^2 \text{Distancia}^2}$. Por lo tanto, definiendo las nuevas variables $r^* = \frac{r}{a}$ y $u_x^* = u_x \frac{\mu}{\mathcal{G} a^2}$ la Ec.(4.4) se transforma en

$$-1 = \frac{1}{r^*} \frac{d}{dr^*} \left(r^* \frac{du_x^*}{dr^*} \right)$$

Por lo que la solución general adimensional es

$$u_x^*(r^*) = -\frac{1}{4} r^{*2} + A \ln(r^*) + B \quad (4.6)$$

Falta agregar los valores de las constantes de integración A y B . Estos se obtienen de las condiciones de frontera del problema.

Debido a que se adimensionalizó la solución también debe hacerse lo mismo con las condiciones de frontera. Requerimos que la velocidad u_x^* sea finita cuando $r^* = 0$ por lo que se necesita que A sea igual a cero para quitar el término logarítmico de la solución. Además, se debe satisfacer que $\frac{\mathcal{G} a^2}{\mu} u_x^*(r^* = 1) = 0$, con lo que $B = \frac{1}{4}$. Por lo tanto, el campo de velocidades adimensional en el flujo de Poiseuille es

$$u_x^*(r^*) = \frac{1}{4} (1 - r^{*2}) \quad (4.7)$$

Que es un perfil parabólico de velocidad máxima $\frac{1}{4}$.

4.1.2. Simulación Numérica

Para usar el método LBGK y simular este flujo se usa una malla de 4000 nodos, $N_y = 20$ a lo ancho y $N_x = 200$ a largo, con los valores $\tau = 1.25, 1.00, 0.75$.

Las condiciones de inicialización del sistema las obtenemos a través de la función de equilibrio, Ec.(2.40), para una densidad $\rho = 3$ y velocidad cero, $\mathbf{u} = \mathbf{0}$.

Para reproducir el gradiente de presión constante en el método LBGK, en cada paso de tiempo se ajustan los valores de la función de distribución f_α que no se conocen para la primer (entrada del cilindro, $x_i = 0$) y última (salida del cilindro, $x_i = N_x$) línea de nodos verticales en la direcciones $\mathbf{e}_\alpha = (1, 0, 0)$, $(1, \pm 1, 0)$, $(1, \pm 1, \pm 1)$ y $\mathbf{e}_\alpha = (-1, 0, 0)$, $(-1, \pm 1, 0)$, $(-1, \pm 1, \pm 1)$ respectivamente.

El ajuste se hace con la condición de extrapolado [11]

$$f_\alpha(0, y_j) = 2f_\alpha(1, y_j) - f_\alpha(2, y_j), \quad f_\alpha(N_x, y_j) = 2f_\alpha(N_x - 1, y_j) - f_\alpha(N_x - 2, y_j)$$

Para $j = 0, \dots, N_y$.

Con esto la velocidad, que se requiere en el cálculo de la función de equilibrio, en la entrada y salida del cilindro se puede obtener. La densidad, que también se puede calcular, se sustituye por densidades impuestas $\rho = 3.3$ si $x_i = 0$ y $\rho = 3.0$ si $x_i = N_x$.

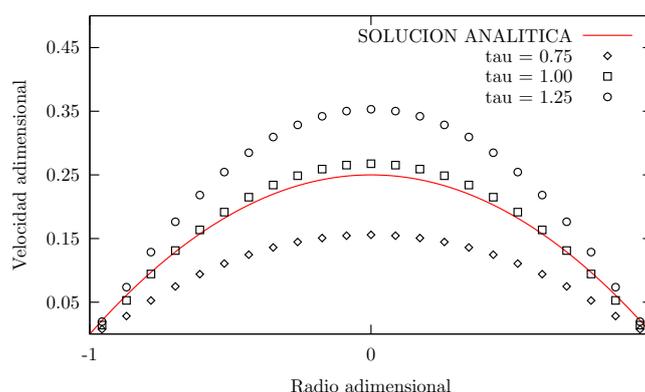


Fig. 4.2.: Simulación del campo de velocidades en una malla de 4000 nodos del flujo de Poiseuille para un gradiente de presión constante a través de una condición de extrapolado para distintos tiempos de relajación τ . La línea sólida corresponde a la solución analítica dada en la Ec.(4.7).

El criterio que se usa para decidir si la simulación ha llegado a un estado estacionario es que el valor relativo de la diferencia entre la velocidad a un tiempo t y un tiempo posterior, $t + \Delta t$, entre la velocidad al tiempo $t + \Delta t$ sea menor a 10^{-3} para todos los nodos de la red, i.e.

$$\frac{\|\mathbf{u}(x_i, y_j, t + \Delta t) - \mathbf{u}(x_i, y_j, t)\|}{\|\mathbf{u}(x_i, y_j, t + \Delta t)\|} < 10^{-3} \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, (N_x - 1) \\ j = 0, \dots, N_y \end{array} \quad (4.8)$$

Así, los datos que se obtienen de la simulación se muestran en la Fig.(4.2) para el campo de velocidades y en la Fig.(4.3) para la presión.

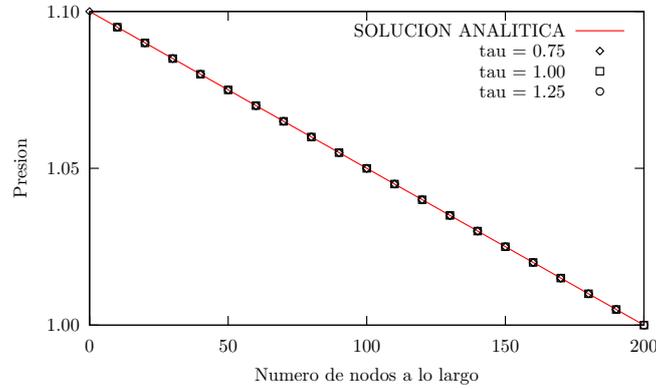


Fig. 4.3.: Simulación de la presión en una malla de 4000 nodos del flujo de Poiseuille para un gradiente de presión constante a través de una condición de extrapolado para distintos tiempos de relajación τ .

Se tiene una segunda forma de colocar el gradiente de presión constante en la simulación. Para el ajuste de las funciones de distribución que faltan en la línea de nodos con $x_i = 0$ se impone en cada paso de tiempo

$$f_\alpha(0, y_j, t) = \omega_\alpha(\rho_0 + 3\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}) \quad (4.9)$$

Donde $\rho_0 = 3.0$ y $\mathbf{u} = (1, 0, 0)$.

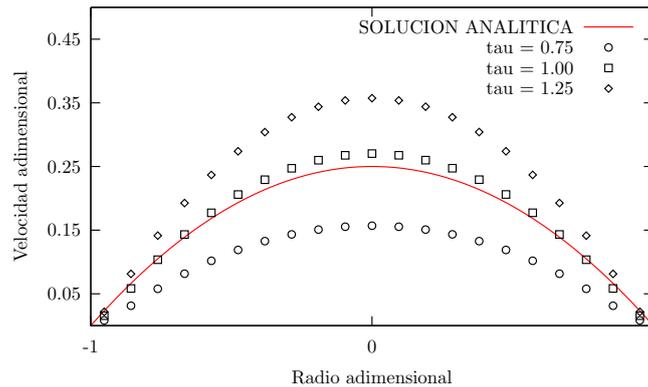


Fig. 4.4.: Simulación del campo de velocidades en una malla de 4000 nodos del flujo de Poiseuille para un gradiente de presión constante. Se usa en este caso la imposición de la Ec.(4.9) en la entrada del cilindro.

La línea de nodos en $x_i = N_x$ se extrapola como en el caso anterior. Con esto, y el mismo criterio de la Ec.(4.8) para decidir que se tiene un estado estacionario, los resultados del campo de velocidades que se obtiene para el mismo tamaño de sistema, $N_y = 20$ y $N_x = 200$, y los mismos valores de $\tau = 1.25, 1.00, 0.75$ son los de la Fig.(4.4).

4.1.3. Solución Analítica en un anillo

Aún cuando se inicia esta sección pensando que el flujo es en un cilindro de radio a la solución dada en la Ec.(4.6) permite pensar en la configuración de un anillo, de radio externo b y radio interno a , ya que se mantienen las suposiciones y simplificaciones hechas para llegar a esa solución. Lo que cambia son las condiciones de frontera, que se adimensionalizan distinto al caso anterior, ya que al considerar un anillo no hay necesidad de hacer cero la constante A para desechar el término logarítmico.

Usando el radio interno a como cantidad para medir distancias, las condiciones de frontera son $u_x^*(r^* = 1) = u_x^*(r^* = \kappa) = 0$, donde κ es la razón de radios externo entre interno, i.e. $\kappa = \frac{b}{a}$. Sustituyendo estas condiciones en la Ec.(4.6) se tiene

$$A = \frac{\kappa^2 - 1}{\ln(\kappa)} \quad , \quad B = \frac{1}{4}$$

Por lo tanto, el campo de velocidades a lo largo de un anillo cilíndrico debido a un gradiente de presión constante es

$$u_x^*(r^*; \kappa) = \frac{1}{4} \left\{ 1 + \left[\frac{\kappa^2 - 1}{\ln(\kappa)} \right] \ln(r^*) - r^{*2} \right\} \quad (4.10)$$

En esta ocasión la solución depende de un parámetro que es la razón κ .

Al igual que en la Ec.(4.7) el campo de velocidades posee una estructura parabólica pero con la modificación de un término logarítmico. Este término ocasionará una inclinación de la parábola hacia la frontera interna.

4.1.4. Simulación Numérica en un anillo

Para una malla de 4000 nodos, $N_x = 200$ a lo largo y $N_y = 20$ a lo ancho, con los valores $\tau = 1.25, 1.00, 0.75$, la razón $\kappa = 2$ y la condición de extrapolación en la entrada y salida del cilindro con densidades impuestas $\rho = 3.01$ si $x_i = 0$ y $\rho = 2.99$ si $x_i = N_x$, se obtienen los resultados para el campo de velocidades en la Fig.(4.5) y para la presión en la Fig.(4.6).

Si se usa en la entrada la imposición de la Ec.(4.9) para $\rho_0 = 3.0$, y con los mismos valores de número de nodos y tiempos de relajación τ , la simulación da el campo de

velocidades de la Fig.(4.7).

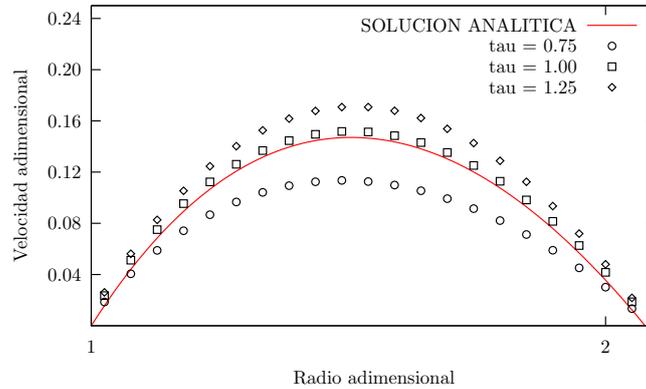


Fig. 4.5.: Simulación del campo de velocidades para un flujo a lo largo de un anillo cilíndrico en una malla de 4000 nodos debido a un gradiente de presión constante. Se usa la condición de extrapolado para distintos tiempos de relajación τ . La línea sólida representa la solución analítica de la Ec.(4.10) para la razón de radios $\kappa = 2$.

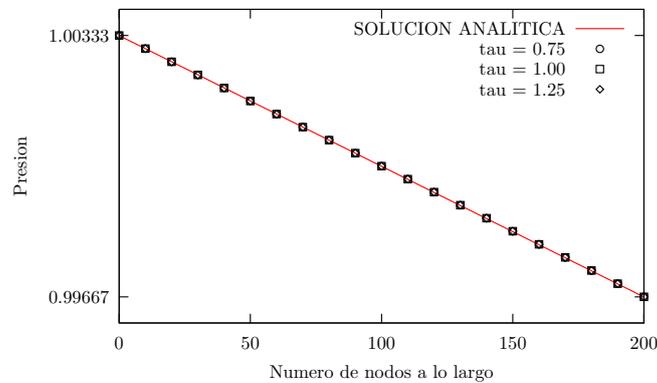


Fig. 4.6.: Simulación de la presión para un flujo a lo largo de un anillo cilíndrico en una malla de 4000 nodos debido a un gradiente de presión constante. Se usa la condición de extrapolado para distintos tiempos de relajación τ .

Se observa en las Figs.(4.5) y (4.2) un buen comportamiento cuantitativo de la presión al ajustarse a la función lineal que se espera. Las curvas para la velocidad por su parte presentan un adecuado comportamiento cualitativo al tener estructura parabólica, incluida la inclinación para la simulación del flujo en un anillo, pero no se ajustan los

datos a la solución analítica.

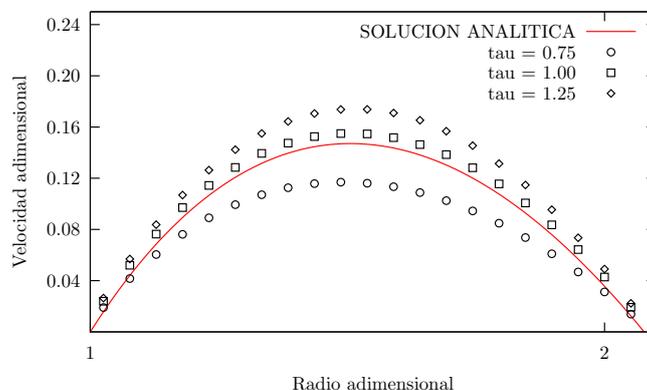


Fig. 4.7.: Simulación de una malla de 4000 nodos del flujo a lo largo de un anillo cilindrico debido a un gradiente de presión constante con la imposición de la Ec.(4.9) para distintos tiempos de relajación τ . La línea sólida es la Ec.(4.10) para la razón de radios $\kappa = 2$.

Esta discrepancia para la velocidad, que también se observa en las Figs.(4.4) y (4.7), se piensa que es debido a las condiciones de entrada y salida que se imponen en el cilindro. Esto parece hacer que la adimensionalización de la velocidad no presente un comportamiento lineal con la viscosidad.

4.2. Flujo de Womersley

4.2.1. Solución Analítica

En este ejemplo el gradiente de presión para el flujo a través de un cilindro oscila en el tiempo. Se denota por *pulsátil* a aquel flujo que se origina de la combinación de un gradiente de presión constante, como es el caso de Poiseuille, y un gradiente de presión oscilante.

Considere entonces un cilindro infinito de radio a por el cual se tiene un flujo unidireccional pulsátil. Por las mismas suposiciones y razones que se usan en el flujo de Poiseuille la velocidad tendrá la forma

$$\mathbf{u}(r, \phi, x, t) = u_x(r, t) \mathbf{e}_x$$

Donde ahora como se considera una dependencia en t para el gradiente de presión, la velocidad también es función de t .

De esta forma las ecuaciones de Navier–Stokes se reducen a

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial r} \quad (4.11)$$

$$0 = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} \quad (4.12)$$

$$\rho \frac{\partial u_x}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_x}{\partial r} \right] \quad (4.13)$$

Las dos primeras ecuaciones dan que la presión no depende de r ni ϕ respectivamente.

La diferencia con el flujo de Poiseuille radica en que al considerar un flujo pulsátil la presión no solo será función de x sino también de t , i.e. $p = p(x, t)$.

Suponer un gradiente de presión pulsátil complica las ecuaciones a resolver pero siguen siendo lineales, i.e. el término $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$ es cero. Por lo tanto se puede tener una combinación lineal para la presión y la velocidad en una parte constante (s) y una parte oscilatoria (w), esto es

$$p(x, t) = p_s(x) + p_w(x, t), \quad u_x(r, t) = u_s(r) + u_w(r, t)$$

Sustituyendo esto en la Ec.(4.13) se tiene

$$\left\{ \frac{dp_s}{dx} - \mu \left(\frac{d^2 u_s}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_s}{dr} \right) \right\} = - \left\{ \rho \frac{\partial u_w}{\partial t} + \frac{\partial p_w}{\partial x} - \mu \left(\frac{\partial^2 u_w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_w}{\partial r} \right) \right\}$$

Donde los términos se agrupan de tal forma que el lado izquierdo no depende del tiempo y el lado derecho si. En la llave del lado izquierdo (u_s, p_s) son las soluciones al flujo de Poiseuille quedando entonces

$$\frac{\partial p_w}{\partial x} - \mu \left(\frac{\partial^2 u_w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_w}{\partial r} \right) = -\rho \frac{\partial u_w}{\partial t} \quad (4.14)$$

Para encontrar el flujo de Womersley se impone [40][pag.74] que el gradiente de presión es

$$\frac{\partial p_w}{\partial x} = k_w = k_s e^{i\omega t} \quad \text{y} \quad k_s = \frac{dp_s}{dx}$$

Los parámetros que se van a usar para adimensionalizar la Ec.(4.14) son el radio del cilindro a , la viscosidad μ y la frecuencia de oscilación ω . Debido a que ahora se tiene dependencia en t , la frecuencia se encarga de marcar los tiempos naturales del sistema.

Por lo tanto, se tienen las dimensiones $[a] = \text{Distancia}$, $[\mu] = \frac{\text{Masa}}{\text{Tiempo Distancia}}$ y $[\omega] = \frac{1}{\text{Tiempo}}$ y entonces si se definen las variables adimensionales $r^* = \frac{r}{a}$, $t^* = t\omega$, $u_\omega^* = \frac{u_\omega}{a\omega}$ y $k_\omega^* = k_\omega \frac{a}{\omega\mu}$, la Ec.(4.14) se transforma en

$$\left(\frac{\partial^2 u_\omega^*}{\partial r^{*2}} + \frac{1}{r^*} \frac{\partial u_\omega^*}{\partial r^*} \right) - \alpha^2 \frac{\partial u_\omega^*}{\partial t^*} = k_s^* e^{it^*} \quad (4.15)$$

Donde $k_s^* = \frac{a}{\mu\omega} k_s$ y $\alpha = a \left(\frac{\rho\omega}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}}$. Al parámetro α se le conoce como *número de Womersley*.

Al observar que el lado derecho de la Ec.(4.15) es una exponencial que depende de t se puede suponer a la solución en la forma

$$u_\omega^*(r^*, t^*) = U_\omega^*(r^*) e^{it^*}$$

Sustituyendo esto en la Ec.(4.15) se tiene

$$U_\omega^{*''} + \frac{1}{r^*} U_\omega^{*'} - i\alpha^2 U_\omega^* = k_s^* \quad (4.16)$$

Donde el símbolo $'$ representa la derivada total respecto a r .

Con esto se logra pasar de una ecuación diferencial parcial, Ec.(4.15), a una ecuación diferencial ordinaria, Ec.(4.16).

Para el cambio de variable $\zeta^* = \sqrt{-i}\alpha r^* = \left(\frac{i-1}{\sqrt{2}} \right) \alpha r^*$ se obtiene

$$\frac{d^2 U_\omega^*}{d\zeta^{*2}} + \frac{1}{\zeta^*} \frac{dU_\omega^*}{d\zeta^*} + U_\omega^* = \frac{ik_s^*}{\alpha^2} \quad (4.17)$$

Que se reconoce como una ecuación ordinaria no homogénea tipo Bessel de primer orden. Por lo tanto, la solución general es

$$U_\omega^*(\zeta^*) = i \frac{k_s^*}{\alpha^2} + A J_0(\zeta^*) + B Y_0(\zeta^*)$$

Donde A y B son constantes de integración, J_0 y Y_0 son funciones de Bessel, que satisfacen la parte homogénea de la Ec.(4.17), de argumento complejo de orden cero de primera y segunda especie respectivamente.

Las condiciones de frontera son no deslizamiento en la pared del cilindro y velocidad finita a lo largo del eje axial, i.e. $u_\omega^*(r^* = 1, t^*) = 0$ y $|u_\omega^*(r^* = 0, t^*)| < \infty$. Como

Y_0 se vuelve indeterminada a medida que $\zeta^* \rightarrow 0$ [40] entonces $B = 0$. Por su parte $A = -\frac{ik_s^*}{\alpha^2 J_0\left[\left(\frac{i-1}{\sqrt{2}}\right)\alpha\right]}$. Así, la solución de la Ec.(4.17) es

$$U_\omega^*(\zeta^*; \alpha, k_s^*) = \frac{ik_s^*}{\alpha^2} \left(1 - \frac{J_0(\zeta^*)}{J_0\left[\left(\frac{i-1}{\sqrt{2}}\right)\alpha\right]} \right)$$

La ecuación de arriba depende de los parámetros adimensionales α y k_s^* que representan amplitudes y frecuencias adimensionales.

Con esto, tenemos que el campo de velocidades u_ω^* , ver Fig.(4.8), para el flujo de Womersley es

$$u_\omega^*(r^*, t^*; \alpha, k_s^*) = \frac{ik_s^*}{\alpha^2} \left(1 - \frac{J_0(\zeta^*)}{J_0\left[\left(\frac{i-1}{\sqrt{2}}\right)\alpha\right]} \right) e^{it^*} \quad (4.18)$$

El resultado que se obtiene para el campo de velocidad tiene la misma frecuencia de oscilación que el gradiente de presión oscilante pero se presenta una fase de retraso que depende de r . Esto es, el movimiento del fluido cerca de la pared del cilindro presenta un tiempo de fase relativo al movimiento cercano a la línea central. La amplitud de movimiento es diferente a medida que uno se aproxima a la frontera, tendiendo a cero en la pared del cilindro para mantener la condición de frontera [12][pag.271].

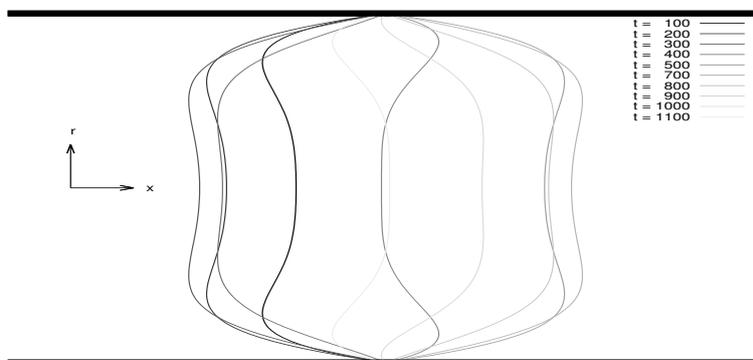


Fig. 4.8.: Representación del perfil de velocidad, para distintos tiempos, del flujo de Womersley con $\alpha = 8.124$ y $k_s^* = 0.489$.

De la Ec.(4.18) se tiene que los perfiles oscilatorios de la velocidad dependerán del valor de α . A valores bajos de α para cada punto la velocidad es como si fuera el flujo estacionario de Poiseuille con un gradiente de presión igual al gradiente de presión oscilante en ese instante [40][pag.91]. A valores altos de α el flujo oscilante en el cilindro

reduce su capacidad de seguir el ritmo de la presión oscilatoria y por lo tanto no se puede llegar a un perfil tipo Poiseuille. Esto es, a mayor α menor el pico de velocidad que alcanza el flujo [40][pag.98].

Para comparar con la simulación se debe separar en su parte real e imaginaria la Ec.(4.18) pues se ha supuesto que el gradiente de presión oscilante es de la forma $k_\omega^* = k_s^* e^{it^*}$.

Por lo tanto, con la separación en parte real e imaginaria del gradiente de presión se tiene que el campo de velocidades u_ω^* se escribe como $u_\omega^*(r^*, t^*) = U_\omega^*(\zeta^*) [\cos(t^*) + i \sin(t^*)]$.

A su vez, U_ω^* es una función compleja por lo que al separarla en su parte real e imaginaria, i.e. $U_\omega^* = [U_\omega^*]_R + i [U_\omega^*]_I$, se tiene que el campo de velocidades \mathbf{u}_ω^* representa las dos soluciones

$$[\mathbf{u}_\omega^*(r^*, t^*)]_R = [U_\omega^*(\zeta^*)]_R \cos(t^*) - [U_\omega^*(\zeta^*)]_I \sin(t^*) \quad (4.19)$$

$$[\mathbf{u}_\omega^*(r^*, t^*)]_I = [U_\omega^*(\zeta^*)]_I \cos(t^*) + [U_\omega^*(\zeta^*)]_R \sin(t^*) \quad (4.20)$$

De esta forma, al empezar a medir la solución se debe usar la Ec.(4.19) si en el tiempo inicial el gradiente de presión es máximo, y la Ec.(4.20) si el gradiente es tal que cruza por cero al tiempo inicial.

4.2.2. Simulación numérica

Para una malla de 3200 nodos, $N_y = 40$ y $N_x = 80$, usando el tiempo de relajación $\tau = 0.6$ y la frecuencia de oscilación $\omega = \frac{2\pi}{T}$, con $T = 1200$, se tienen las gráficas de la Fig.(4.9) para el campo de velocidades y la presión.

La condición de número de Mach bajo requiere que el tiempo T durante el cual el flujo experimenta un cambio macroscópico en el rango de la distancia N_x sea mayor que el tiempo $\frac{N_x}{c_s}$ que le toma a la señal de “sonido” del método numérico viajar la distancia N_x , de tal manera que la propagación de la onda de presión en el fluido se considere como instantánea [22]. Esto es, se debe satisfacer $T > \frac{N_x}{c_s}$.

En este ejemplo para imponer la presión oscilante en el método LBGK se usa la condición de extrapolado del flujo de Poiseuille para la entrada del cilindro y en cada paso de tiempo la densidad que se impone, para calcular la función de equilibrio, es una función sinusoidal, i.e. $(\rho + \delta\rho) \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$ o $(\rho + \delta\rho) \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$, con $\rho = 3.0$ y $\delta\rho = 0.003$.

En esta ocasión no se puede usar el criterio de la Ec.(4.8) para decidir que el flujo es estacionario ya que la velocidad es función de t . Como el flujo es periódico, de periodo

T , se usa que el valor relativo entre la diferencia para las velocidades al tiempo t y un periodo después, $t + T$, entre la velocidad al tiempo $t + T$ sea menor a 10^{-3} para todos los nodos de la malla, esto es

$$\frac{\|\mathbf{u}(x_i, y_j, t + T) - \mathbf{u}(x_i, y_j, t)\|}{\|\mathbf{u}(x_i, y_j, t + T)\|} < 10^{-3} \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, (N_x - 1) \\ j = 0, \dots, N_y \end{array} \quad (4.21)$$

Así, una vez que se cumple el criterio de la Ec.(4.21), obtenemos los datos, para la velocidad, en los tiempos de iteración $t = 0, \frac{1}{4}T, \frac{2}{4}T, \frac{3}{4}T$ y, para la presión, en los tiempos $t = 0, \frac{1}{6}T, \frac{1}{4}T, \frac{2}{6}T, \frac{2}{4}T$, ver Fig.(4.9). En este caso se ha usado la función $\cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$ para simular el gradiente oscilante.

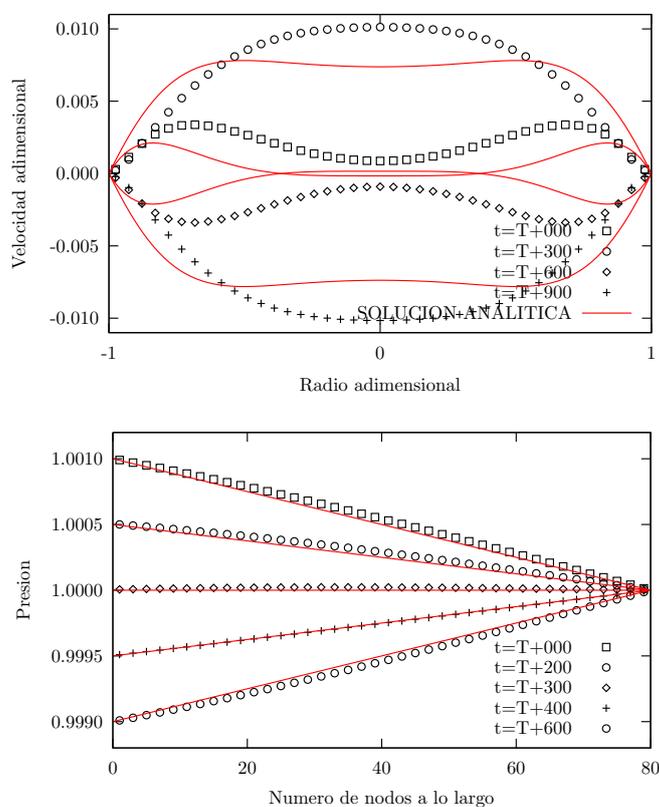


Fig. 4.9.: Simulación del flujo de Womersley en un cilindro para el tiempo de relajación $\tau = 0.6$, la frecuencia de oscilación $\omega = \frac{2\pi}{T}$, con $T = 1200$, y $\alpha = 8.1247$. Se usa la función $\cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$ para imponer la densidad en la entrada del cilindro. Arriba el campo de velocidades para los tiempos $t = 0, \frac{1}{4}T, \frac{2}{4}T, \frac{3}{4}T$ y las líneas sólidas dadas por la Ec.(4.19). Abajo la presión en los tiempos $t = 0, \frac{1}{6}T, \frac{1}{4}T, \frac{2}{6}T, \frac{2}{4}T$.

Para el mismo número de nodos usando ahora la función $\sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$ se obtienen las gráficas de la Fig.(4.10). para el campo de velocidades en los tiempos $t = 0, \frac{1}{4}T, \frac{2}{4}T, \frac{3}{4}T$ y la presión en los tiempos $t = 0, \frac{1}{12}T, \frac{3}{12}T, \frac{7}{12}T, \frac{9}{12}T$.

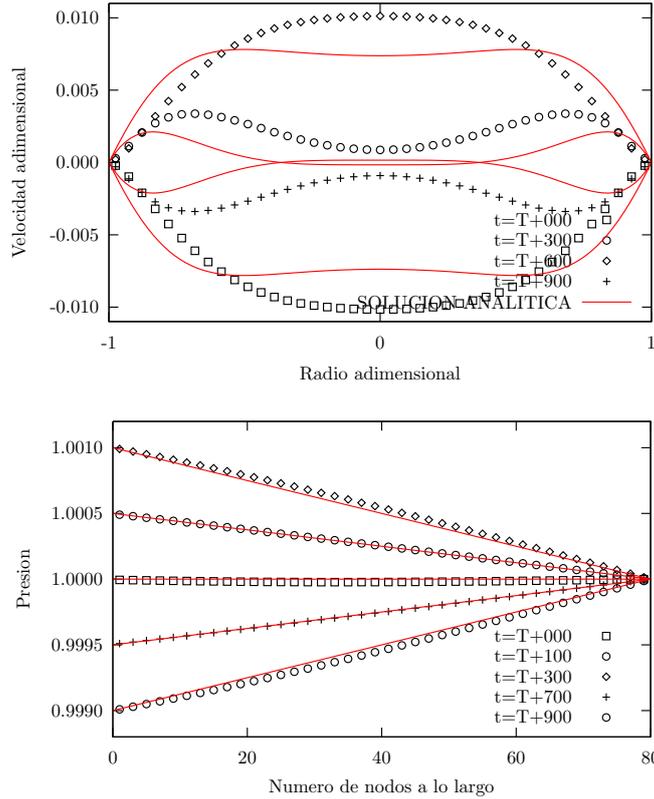


Fig. 4.10.: Mismo parámetros que la Fig.(4.9) usando la función $\sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$ para imponer la densidad de entrada en el cilindro. Arriba el campo de velocidades para los tiempos $t = 0, \frac{1}{4}T, \frac{2}{4}T, \frac{3}{4}T$ y las líneas sólidas dadas por la Ec.(4.20). Abajo la presión en los tiempos $t = 0, \frac{1}{12}T, \frac{3}{12}T, \frac{7}{12}T, \frac{9}{12}T$.

Las Figs.(4.9) y (4.10) muestran cuantitativamente un ajuste de los datos para la presión que se espera a un tiempo fijo.

De nuevo la velocidad muestra la estructura de la curva analítica pero no se ajustan los datos de la simulación. Se piensa, al igual que en el flujo de Poiseuille, que la discrepancia es por las condiciones de entrada y salida del cilindro, las cuales hacen que se tenga un incorrecto reescalamiento de la solución.

4.3. Flujo de Taylor–Couette

4.3.1. Antecedentes

El flujo de Taylor–Couette ha sido tema constante de investigación durante el siglo XX. El estudio del flujo inmerso en cilindros concéntricos rotantes data del trabajo que Isaac Newton publicó en su libro *Principia* [30]. Aquí Newton discute lo que hoy en día se conoce como flujo *Newtoniano*, donde las tensiones viscosas son proporcionales al gradiente de velocidades, y menciona lo que se conoce como régimen laminar en el flujo de Taylor–Couette. Aunque, nunca hace referencia a la existencia de un comportamiento de transición que dependa de la velocidad de los cilindros, ya que detalla más las simetrías y simplificaciones que se tienen para el flujo.

En 1848 George Stokes realiza el siguiente paso importante en el estudio del flujo entre cilindros. Publica una descripción matemática de la velocidad del fluido en función de la velocidad de rotación de los cilindros y declara que “*Si el cilindro interno rota demasiado rápido el fluido cercano a este tendrá una tendencia a salir disparado hacia fuera a consecuencia de la fuerza centrífuga, produciéndose remolinos*” [35].

La comprobación experimental de lo propuesto por Stokes comienza con los estudios de Arnulph Mallock y M. Maurice Couette en los que usaban el sistema de cilindros concéntricos rotantes como *viscosómetro*. Ambos estudiaron, por separado, como medir la torca en el cilindro interno cuando el cilindro externo está rotando, y de esta forma, poder usar el valor de la torca para medir la viscosidad de un fluido que se encuentre entre los cilindros. Al estudiar el comportamiento del sistema dependiente de la velocidad del cilindro interno Mallock llegó a la conclusión equivocada de que el flujo siempre es inestable, mientras Couette logró obtener un valor crítico para agua en el que el flujo cambia de comportamiento. Aún cuando se tenían datos de los experimentos de Mallock y Couette es hasta 1923 cuando G.I. Taylor pone las bases experimentales y teóricas para entender este fenómeno.

Taylor en su trabajo usa la *teoría lineal de estabilidad* [15][pag.71] al flujo rotante y conduce el primer experimento completo de los vórtices concluyendo que ocurren por encima de un valor crítico en la velocidad de rotación del cilindro interno. Añade tinta al fluido para visualizar y hacer evidente la existencia de vórtices más allá del estudio de viscosidad. Con la publicación de su trabajo [36] el flujo se denomina *flujo de Taylor–Couette*.

4.3.2. Solución Analítica

Se inicia por comparar la solución analítica al flujo de Taylor–Couette con el flujo predicho por el modelo LBGK

Considere dos cilindros concéntricos, infinitamente largos con radios a y b , que se encuentran rotando a velocidades angulares Ω_a y Ω_b respectivamente. Por el momento no importa si ambos cilindros rotan en el mismo sentido o si lo hacen en forma contraria. La Fig. (4.11) muestra la geometría del sistema en el caso en que ambos giren en sentido de las manecillas del reloj.

Se quiere estudiar el comportamiento de un flujo estacionario inmerso en los cilindros. Sea el eje axial a lo largo de la coordenada x y suponga que la velocidad es unidireccional a lo largo del eje azimutal ϕ , i.e.

$$\mathbf{u}(r, \phi, x) = u_\phi(r, \phi, x) \mathbf{e}_\phi \quad (4.22)$$

Suponiendo que el sistema es invariante respecto a traslaciones en x se tiene que la velocidad no será función de esta coordenada [20][pag.163], i.e. $\mathbf{u} = u_\phi(r, \phi)$.

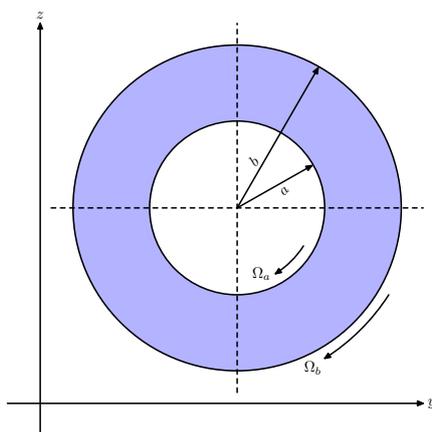


Fig. 4.11.: Esquema del flujo entre cilindros circulares concéntricos rotantes.

Con estas hipótesis la ecuación de continuidad, Ec.(2.19), se reduce a $\frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} = 0$. Con lo que la velocidad no depende de la coordenada azimutal. Por lo tanto, la velocidad es únicamente función de r , esto es, $\mathbf{u} = u_\phi(r)$.

Así, las ecuaciones de Navier–Stokes a resolver en esta ocasión son:

$$-\rho \frac{u_\phi^2}{r} = -\frac{\partial p}{\partial r} \quad (4.23)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} = \mu \left[\frac{\partial^2 u_\phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\phi}{\partial r} - \frac{u_\phi}{r^2} \right] \quad (4.24)$$

$$0 = \frac{\partial p}{\partial x} \quad (4.25)$$

La tercera ecuación nos dice que la presión no depende de la coordenada x . En la primera ecuación aparece el término $-\rho u_\phi^2/r$ que representa la fuerza centrífuga que actúa sobre un elemento de fluido y se compensa con un gradiente de presión radial inducido [12][pag.261].

En la segunda ecuación como del lado derecho u_ϕ solo depende de r entonces p es lineal en ϕ , pero dado se tiene un dominio periódico en ϕ entonces p no puede depender de ϕ . De tal manera que la segunda ecuación se reduce a

$$\frac{\partial^2 u_\phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\phi}{\partial r} - \frac{u_\phi}{r^2} = 0$$

Para adimensionalizar las ecuaciones se usa el radio y la velocidad de rotación del cilindro interno. Por lo tanto, definiendo las variables adimensionales $r^* = \frac{r}{a}$ y $u_\phi^* = \frac{u_\phi}{a\Omega_a}$ se tiene

$$r^{*2} \frac{\partial^2 u_\phi^*}{\partial r^{*2}} + r^* \frac{\partial u_\phi^*}{\partial r^*} - u_\phi^* = 0 \quad (4.26)$$

Que se puede reconocer como una ecuación diferencial ordinaria tipo *Euler* [6][pag.260], por lo que la solución se expresa en forma de potencias de r^* , i.e. $u_\phi^* = r^{*n}$. Sustituyendo esto en la Ec.(4.26) se obtiene la condición $n^2 - 1 = 0$, i.e. $n = \pm 1$.

Por lo tanto, la solución general es

$$u_\phi^*(r^*) = Ar^* + B \frac{1}{r^*}$$

Con A y B constantes de integración.

Para encontrar las constantes se tienen las condiciones de frontera $u_\phi^*(r^* = 1) = 1$, $u_\phi^*(r^* = \eta) = \eta\gamma$, donde $\eta = \frac{b}{a}$ y $\gamma = \frac{\Omega_b}{\Omega_a}$. Así, la solución para el flujo entre dos cilindros concéntricos, comúnmente denominado *flujo circular de Couette*, es

$$u_\phi^*(r^*; \eta, \gamma) = \frac{1}{(\eta^2 - 1)} \left[(\eta^2 \gamma - 1) r^* + (1 - \gamma) \frac{\eta^2}{r^*} \right] \quad (4.27)$$

Los parámetros adimensionales η y γ son los que determinan la estructura de este flujo.

A diferencia de los flujos de Poiseuille y Womersley, en este ejemplo no se impone alguna condición a la presión por lo que existe una ecuación a resolver para encontrar este término. Como solo se usará el campo de velocidades para comprobar resultados del método LBGK no deduciremos la expresión explícita de la presión, la cual se puede obtener por integración directa de la Ec.(4.23).

En las Ecs.(4.4) y (4.14) aparece el término de viscosidad mientras en la Ec.(4.27) no está este coeficiente. Esto es debido a que cuando se tiene un gradiente de presión impuesto la viscosidad se encarga de compensarlo. No sucede en la Ec.(4.27) ya que no existe un gradiente de presión en la coordenada ϕ .

Se mencionarán ahora algunos casos específicos, dependiendo del valor de los radios y velocidades de rotación para la Ec.(4.27). En el caso en que los radios tiendan a infinito pero mantienen su diferencia constante, i.e. $\eta \rightarrow 1$ y $a|\eta - 1| = \text{constante}$, se tiene el perfil de velocidades correspondiente al flujo plano de Couette [20][pag.165]. Si ambos cilindros rotan a la misma velocidad, i.e. $\gamma = 1$, se tendrá que $u_\phi^* = r^*$, lo cual corresponde adimensionalmente a una rotación de cuerpo rígido por parte del fluido [20][pag.166]. Si el cilindro externo esta fijo y su radio tiende a infinito, i.e. $\gamma = 0$ y $\eta \rightarrow \infty$, entonces la velocidad será $u_\phi^* = \frac{1}{r^*}$, la cual es equivalente a tener un *flujo de vórtice* [20][pag. 166].

El caso que se usa para validar el modelo axialsimétrico es cuando el cilindro externo esta fijo, la diferencia de radios no es muy grande y el cilindro interno rota, i.e. $\gamma = 0$ con $\Omega_a \neq 0$, $a|\eta - 1| < \infty$. Por lo tanto, la Ec.(4.27) se reduce a

$$u_\phi^*(r^*; \eta) = \left[\frac{r^*}{1 - \eta^2} + \frac{r^{*-1}}{1 - \eta^{-2}} \right] \quad (4.28)$$

Ahora solo se tiene a η como parámetro adimensional.

4.3.3. Simulación Numérica

Para la simulación se usan distintos números de nodos dependiendo del valor que se tenga de η .

Para los valores $\eta = 2, 3, 4, 5$ se usan respectivamente 1000, 4000, 16000, 25000 nodos en la malla. En todos los casos se deja fijo el radio interno en el nodo $y_j = 10$ y se colocan los radios externos en los nodos $y_j = 20, 30, 40, 50$ respectivamente. A lo largo del cilindro se usa $N_x = 100, 200, 300, 400, 500$. En todos los casos el tiempo de relajación que se emplea es $\tau = 1.25$.

Para imponer la velocidad de rotación en los cilindros se usan las velocidades $\Omega_a a$ y Ω_b como las velocidades impuestas que usa el método de extrapolación para nodos sólidos. La velocidad Ω_b que se usa es cero y Ω_a es tal que el número de Reynolds asociado al cilindro interno de este flujo (del cual hablaremos en la siguiente sección) esté por abajo del valor crítico que se espera para las razones de radio η usadas [34].

En esta ocasión las condiciones de entrada y salida del tubo son periódicas. El criterio que se emplea para decidir si es un estado estacionario es la Ec.(4.8). De tal manera

que los resultados del campo de velocidades que se obtienen son las gráficas de la Fig.(4.12).

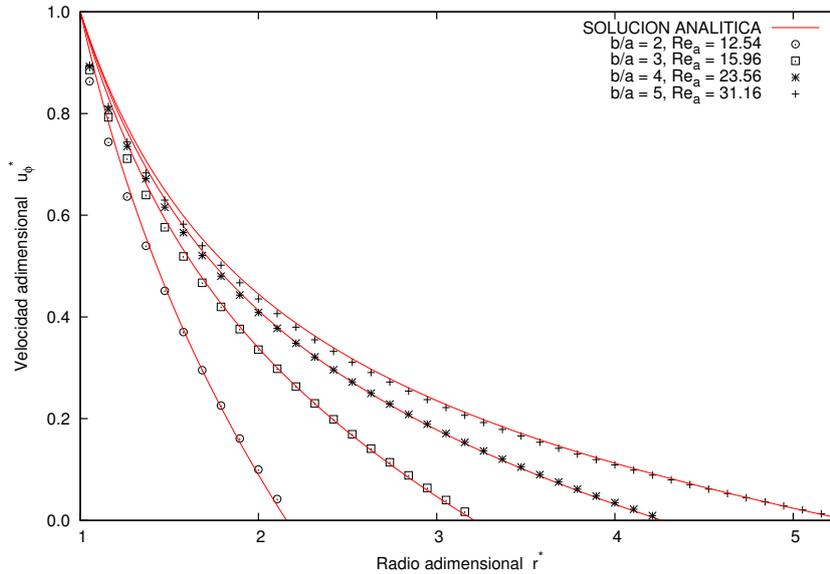


Fig. 4.12.: Simulación del campo de velocidades en el flujo de Taylor–Couette cuando $\gamma = 0$ y se tienen los números adimensionales del cilindro interno, Ec.(4.29), $Re_a = 12.54, 15.96, 23.56, 31.16$. Las líneas solidas corresponden a la solución analítica de la Ec.(4.28) para las razones $\eta = 2, 3, 4, 5$.

Para este ejemplo los resultados de la simulación se ajustan a las soluciones analíticas con una ligera discrepancia en el cilindro interno debido a que la rotación del cilindro interno pasa bruscamente de cero a un valor dado. Este procedimiento de girar en forma violenta el cilindro interno para llegar a la solución de la Ec.(4.27) es el que se usa mas adelante para buscar flujos secundarios.

A continuación se darán algunas ideas acerca de la primera inestabilidad de Taylor comentando un poco de la teoría de perturbaciones que se emplea en el análisis de este flujo. Se usarán los resultados de criterios de estabilidad para comprobar las simulaciones del flujo.

4.3.4. Primera Inestabilidad de Taylor

La Ec.(4.27) es posible obtenerla por la suposición de que el flujo solo contiene componente azimutal. En un elemento de fluido cualquiera, su movimiento circular resulta

de un balance entre los esfuerzos y la fuerza centrífuga que actúan sobre el. Esta solución se observa experimentalmente si la velocidad de rotación del cilindro interno no es muy grande en comparación con la velocidad de rotación del cilindro externo cuando estos giran en sentidos contrarios, o bien, si los números adimensionales γ y η satisfacen $\gamma > \eta$ cuando ambos cilindros giran en el mismo sentido y es un fluido sin viscosidad [36].

Cuando no se cumplen estas condiciones se presentan distintos estados del flujo (inestabilidades) que se pueden distinguir por su simetría ante rotaciones o reflexiones, por sus número de onda azimutal o axial, o por su frecuencia de rotación de ondas viajeras azimutales [7]. Tales estados se pueden clasificar a partir de los números de Reynolds de los cilindros¹.

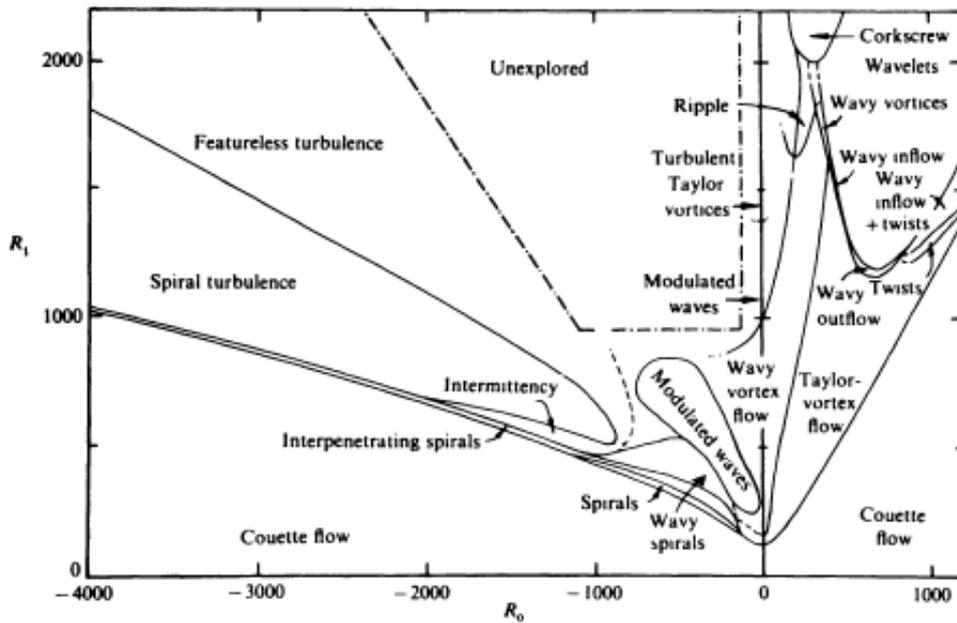


Fig. 4.13.: Regímenes observados, para $\eta = 1.13$, del flujo entre dos cilindros concéntricos. El nombre “Couette flow” es la solución de la Ec.(4.27). En la imagen $R_0 = Re_b$ y $R_i = Re_a$ [7].

Siendo la velocidad de rotación de un cilindro la velocidad característica y la distancia entre los cilindros la longitud característica los números de Reynolds, para el flujo entre

¹Una descripción fenomenológica bastante amplia se puede consultar en [7].

dos cilindros concéntricos, son

$$\text{Re}_a = \frac{\Omega_a a (b - a)}{\nu} \quad (4.29)$$

$$\text{Re}_b = \frac{\Omega_b b (b - a)}{\nu} \quad (4.30)$$

Por lo que el papel del número de Reynolds en este caso puede ser tomado por la Ec.(4.29) o la Ec.(4.30) [25][pag. 100] para algunos valores de las razones η y γ pues estos parámetros determinan la estructura del flujo.

El número de Reynolds marca cuando \mathbf{u} se mantiene como la solución de la Ec.(4.28) o cambia a una inestabilidad. En este último el flujo presentará una transición de la solución u_ϕ^* a una solución que tiene las tres componentes de la velocidad ($u_x^* \neq 0$ y $u_r^* \neq 0$), en la que se forman patrones.

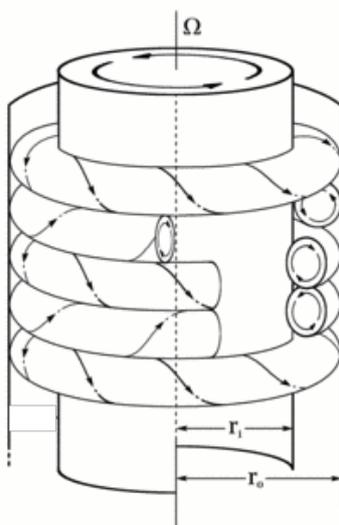


Fig. 4.14.: Representación del movimiento toroidal de los elementos de fluido en la primera inestabilidad. En esta imagen, descargada de http://www.scholarpedia.org/article/Taylor-Couette_flow © Mike Minbiole y Richard M. Lueptow, $a = r_i$, $b = r_o$ y $\Omega_a = \Omega$.

De los diversos patrones que se reportan en [7], ver Fig.(4.13), la primera inestabilidad de Taylor preserva la simetría axial de la solución unidireccional básica. En el proceso de ir de la solución unidireccional a la primera inestabilidad la fuerza centrífuga en los elementos de fluido es suficientemente grande para producir una descompensación de los esfuerzos y hacer que los elementos de fluido presenten un movimiento toroidal

a lo largo del anillo entre los cilindros, ver Fig.(4.14), formando patrones conocidos como *vórtices de Taylor*.

Flujo sin viscosidad

Cualitativamente en un fluido inviscido se pueden entender los vórtices si se considera un pequeño elemento toroidal de fluido, encerrado entre dr y dx , que es desplazado ligeramente a un radio mayor. Si este elemento tiene una velocidad mayor que las partículas que lo rodean se seguirá desplazando hacia el exterior debido a que la presión radial hacia el interior en esa posición será insuficiente para balancear la fuerza del elemento de fluido que se mueve hacia afuera. Similarmente, un elemento que se mueve hacia dentro seguirá su camino hacia el interior [38].

De esta forma, existe una inestabilidad asociada a la distribución del campo de velocidad u_ϕ^* produciendo el patrón de vórtices.

Esta condición se puede expresar como: *En ausencia de viscosidad, la condición necesaria y suficiente para que una distribución de velocidad angular $\Omega(r)$ sea estable es* [8][pag.273]

$$\frac{d(r^2\Omega)^2}{dr} > 0 \quad (4.31)$$

A esta desigualdad se le conoce como *criterio de Rayleigh*.

Para justificar este criterio supongase un elemento de fluido con radio r . Su momento angular l esta definido como $l(r) = mr^2\Omega$, donde Ω es su velocidad angular. La fuerza centrífuga que actúa sobre este elemento es $\frac{l^2}{mr^3}$, la cual esta balanceada por un gradiente de presión radial inducido. Ahora supongase que un elemento de fluido en la posición r_0 es desplazada ligeramente a un radio mayor r . El momento angular del elemento desplazado sigue siendo su valor original $l_0 = l(r_0) = mr_0^2\Omega_0^2$ [25][pag. 99] y la fuerza centrífuga para este elemento es $\frac{l_0^2}{mr^3}$. Para que elemento desplazado regrese a su posición inicial la fuerza centrífuga del elemento desplazado debe ser menor que su valor en la posición r , la cual esta balanceado por el gradiente de presión en la posición r .

Por lo tanto, la condición de estabilidad es $(l^2 - l_0^2) > 0$.

Sabiendo que se puede desarrollar en serie de potencia, alrededor de r_0 , el momento angular $l^2(r)$, se tiene a primer orden en $(r - r_0)$ que

$$l^2 = l_0^2 + 2l \left(\frac{dl}{dr} \right) (r - r_0)$$

Por lo que al para la diferencia $(r - r_0) > 0$, y al sustituir $l = mr^2\Omega$, se llega el resultado de la Ec.(4.31).

Se puede escribir este criterio si $\eta \approx 1$ como

$$\frac{d(r^2\Omega)^2}{dr} = \lim_{b \rightarrow a} \left[\frac{(b^2\Omega_b)^2 - (a^2\Omega_a)^2}{b - a} \right] > 0 \quad (4.32)$$

Que resulta en la condición, para un fluido sin viscosidad, $\gamma > \eta$.

Por lo tanto, en el caso en que los dos cilindros roten en sentidos contrarios γ es negativo y el criterio no se satisface haciendo que el flujo sea inestable².

Cuando ambos cilindros giran en el mismo sentido la condición de estabilidad depende de los valores de las velocidades de rotación de los cilindros. Por ejemplo, si el cilindro interno está fijo y el cilindro externo rota entonces γ siempre es mayor que η haciendo al flujo estable, mientras que si el cilindro externo esta fijo y el cilindro interno rota entonces γ es igual a cero haciendo que el flujo sea inestable. Este último caso es el que se usará mas para la simulación de la primera inestabilidad.

Flujo con viscosidad

Para encontrar la condición de estabilidad en el caso viscoso se usa la *teoría lineal de estabilidad* [25, 36][pag.100]. En esta teoría se agrega una pequeña perturbación no estacionaria a la velocidad y a la presión de la solución de la Ec.(4.27), i.e. $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_1(\mathbf{x}, t)$ y $p(\mathbf{x}, t) = p_0(\mathbf{x}) + p_1(\mathbf{x}, t)$, donde \mathbf{u}_0 y p_0 son soluciones que satisfacen las Ecs.(4.23)-(4.25). Por su parte \mathbf{u}_1 y p_1 cumplen las ecuaciones

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_1 = 0 \quad (4.33)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} + (\mathbf{u}_0 \cdot \nabla) \mathbf{u}_1 + (\mathbf{u}_1 \cdot \nabla) \mathbf{u}_0 \right] = -\nabla p_1 + \mu \nabla^2 \mathbf{u}_1 \quad (4.34)$$

En este caso \mathbf{u}_1 tiene las mismas condiciones de frontera que \mathbf{u}_0 . Suponiendo que la perturbación \mathbf{u}_1 se puede escribir como

$$\mathbf{u}_1(r, \phi, x, t) = \mathbf{f}(r) e^{i(m\phi + kx - \omega t)} \quad (4.35)$$

Donde la dirección de \mathbf{f} es arbitraria.

En la Ec.(4.35) el número de onda k toma valores continuos y representa la periodicidad de la perturbación en la dirección x . Por su parte, como $\phi = 0 = 2\pi$ representan

²En general, como se observa en la Fig.(4.13), este resultado no es aplicable una vez que se considera viscosidad.

la misma situación el número m toma los valores discretos $0, 1, 2, \dots$. El caso $m = 0$ corresponde a una perturbación axialsimétrica.

La solución de las Ecs.(4.33) y (4.34), para una m y k dadas, lleva a una colección discreta de eigenfrecuencias $\omega = \omega_m^j(k)$, donde j representa las ramas de la función $\omega_m(k)$. En general el valor de ω_m es complejo y cuando la parte imaginaria es positiva la perturbación se incrementa indefinidamente en el tiempo haciendo que el flujo sea inestable. En cambio si la parte imaginaria es negativa la perturbación decrece.

Una inestabilidad aparecerá al incrementar el valor del número de Reynolds, que puede ser tomado como Re_a o Re_b para valores de η y γ dados, en el cual la parte imaginaria de $\omega_m(k)$ se vuelve cero para alguna k , la cual se denota por $k_{critico}$. Al valor de Reynolds en el que ocurre la inestabilidad se le denomina valor crítico y se denota $Re_{critico}$.

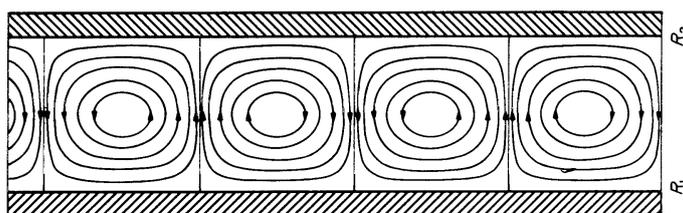


Fig. 4.15.: Esquema de los vórtices de Taylor. Se muestran las curvas tangentes al campo de velocidades proyectado sobre un plano $\phi = cte$. En la imagen, obtenida de [25][pag.101], $R_2 = b$ y $R_1 = a$.

La primera inestabilidad de Taylor que da pie a otro flujo con simetría axial que corresponde al caso $m = 0$ y se encuentra al incrementar la velocidad de rotación del cilindro interno.

En el límite $(\eta - 1) \ll \frac{1}{2}(1 + \eta)$, que se conoce como *narrow-gap approximation*, y cuando $\gamma = 0$, i.e. el cilindro externo esta fijo, se puede obtener el valor crítico del número de Reynolds, el cual se toma como $Re = Re_a$, con la ecuación [25][pag.101]

$$Re_{critico}(\eta) = 41.2 \sqrt{\frac{1 + \eta}{2(\eta - 1)}} \quad (4.36)$$

Se encuentra que el Reynolds crítico mas pequeño para $\omega_0(k)$ ocurre cuando solo se tiene parte imaginaria [25][pag.101]. Esto significa que la primera inestabilidad del flujo estacionario entre dos cilindros lleva a la aparición de un flujo secundario que también es estacionario. En la Fig.(4.15) se muestra una representación, para un plano

$\phi = cte$, de los vórtices que se tienen en la primera inestabilidad.

Para este tipo de flujo la viscosidad juega el papel de estabilización, i.e. un flujo estable cuando $\mu = 0$ se mantiene estable cuando se toma en cuenta la viscosidad, y un flujo inestable puede volverse estable en el caso viscoso [25][pag.102].

4.3.5. Observaciones numéricas (Parte I)

Para observar numéricamente la primera inestabilidad se hace girar súbitamente el cilindro interno, fijando la velocidad del cilindro externo, y se ve si la solución circular se rompe. El criterio de número de Reynolds permite hacer simulaciones para valores cercanos a la inestabilidad e intentar reproducir estos valores críticos.

Cabe mencionar que el criterio sobre el número de Reynolds no toma en cuenta que el cilindro sea finito, algo que en un experimento se tiene que considerar, por lo que las condiciones de frontera en las tapas del cilindro son importantes en determinar la primera inestabilidad [7, 4].

Para reproducir las tapas del cilindro en el método LBGK se usa sobre ellas la condición de frontera rebote a medio camino. Con esto se tienen paredes en los extremos de los cilindros. Si en lugar de paredes se usan condiciones periódicas no se observa ninguna celda. Si en cambio en los extremos del cilindro se usan las mismas condiciones de presión en la entrada y salida del cilindro como si fuera una frontera abierta entonces el resultado si son vórtices pero que no cumplen con la periodicidad marcada por el espectro de eigenfrecuencias $\omega_n(k)$. Esta repetición está dada por la longitud de onda $\lambda = \frac{2\pi}{k_{\text{critico}}}$. Para la primera inestabilidad k_{critico} se mantiene en un valor aproximado a π [15][pag.97] y como $\lambda = k(b-a)$ [15][pag.92] entonces $\lambda \approx 2(b-a)$, esto es, hay dos vortices de tamaño $(b-a)$ antes de repetirse el patrón.

Definiendo la razón de aspecto $\Gamma = \frac{L}{b-a}$, donde L es la longitud del cilindro, se tiene que este parámetro da la cantidad de vórtices que deben formarse. Por lo tanto, la primera comprobación es reproducir para un valor de η , y en el caso $\gamma = 0$, los vórtices para un número de Reynolds $Re_a > Re_{\text{critico}}$ teniendo en cuenta que la cantidad de vórtices que se obtengan sea de acuerdo a la razón de aspecto usada.

Para ver los vórtices se dibujan las curvas tangentes al campo de velocidades \mathbf{u} proyectado en el plano de simetría $\phi = 0$ usando la función $\vartheta(r, x)$ que satisface

$$u_r(r, \phi = 0, x, t) = \frac{\partial \vartheta(r, x)}{\partial x} \quad , \quad u_x(r, \phi = 0, x, t) = -\frac{\partial \vartheta(r, x)}{\partial r} \quad (4.37)$$

A continuación se muestran los resultados para una malla de 2400 nodos, $N_x = 120$ a lo largo y $N_y = 20$ a lo ancho, con el radio interno en el nodo $y_j = 46$, el radio externo

en el nodo $y_j = 67$ (con lo que se tiene una razón de radios $\eta = 1.4$), el tiempo de relajación $\tau = 1$ y el número de Reynolds en $Re_a = 79.236$. En la Fig.(4.16) se tiene un acercamiento de los vórtices que se crean en la simulación. En este caso el valor crítico se calcula con la Ec.(4.36) siendo $Re_{critico} = 71.3$.

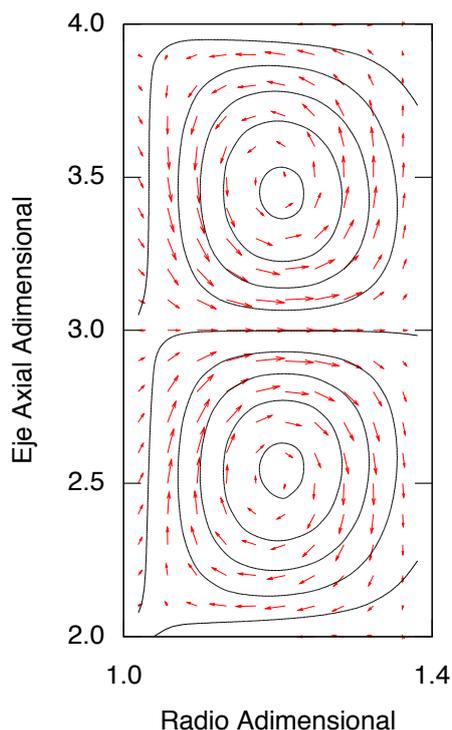


Fig. 4.16.: Acercamiento de los vórtices generados en la simulación. El número de Reynolds es $Re_a = 79.236$ y las razones son $\eta = 1.4$ y $\Gamma = 6$. El valor crítico para esta razón de radios es $Re_{critico} = 71.3$. El eje horizontal representa la coordenada radial adimensional ($r^* = \frac{r}{a}$) y el eje vertical la coordenada axial adimensional ($x^* = \frac{x}{(b-a)}$).

Para decidir que el flujo que se obtiene al romperse la solución circular es estacionario se usa la condición de la Ec.(4.8).

Para la misma malla de 2400 nodos, el radio interno en $y_j = 20$, el radio externo en $y_j = 40$ (por lo tanto $\eta = 2$) y el tiempo de relajación $\tau = 1$ se tiene en las Figs.(4.17)-(4.19) la evolución de los vórtices en líneas negras superpuestas con las magnitudes, representadas en mapa de colores, de la componente azimutal de la vorticidad,

el momento angular y la presión, respectivamente, para los números de Reynolds $Re_a = 50, 60, 70, 80, 90, 100$. En este caso el valor crítico es $Re_{critico} = 68.2$ [34].

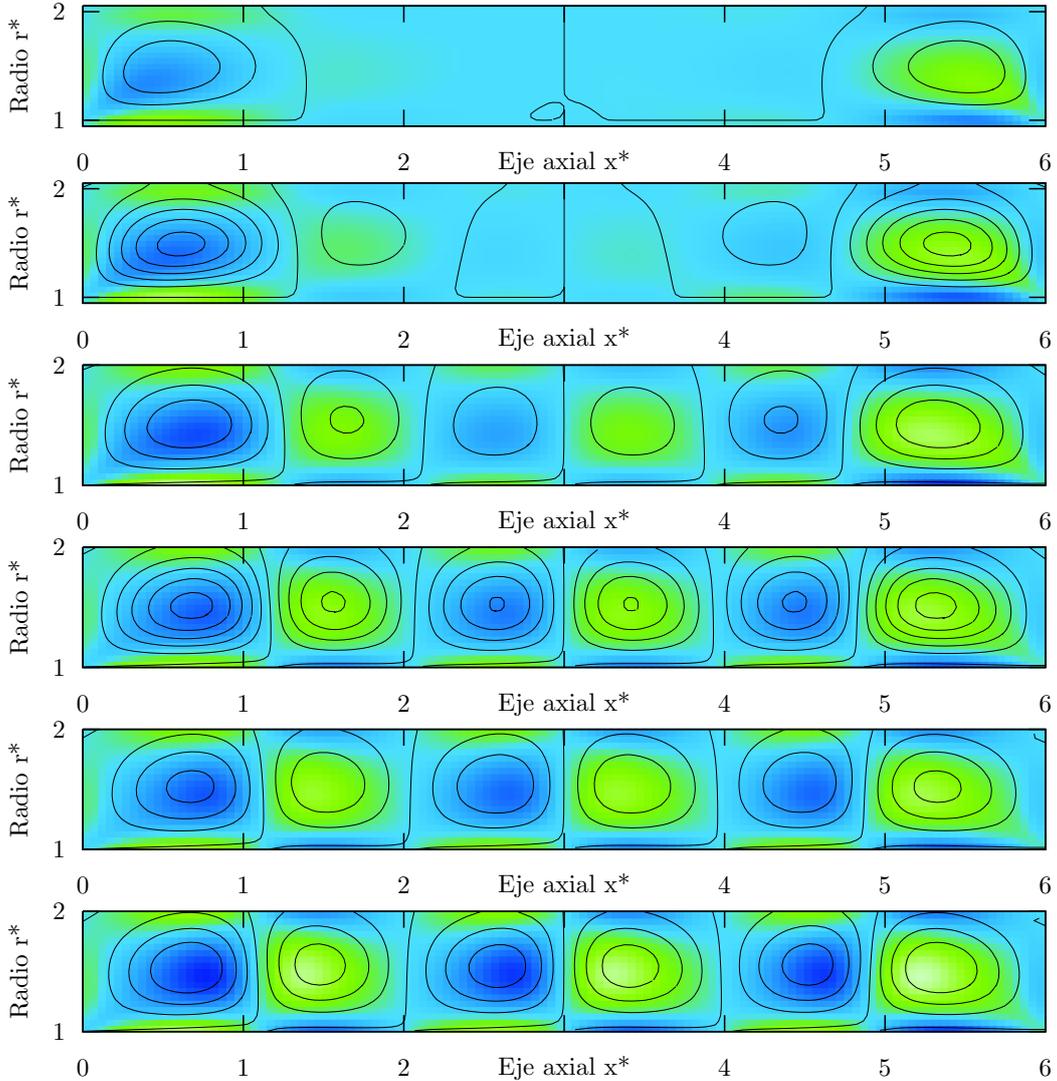


Fig. 4.17.: Vortices de Taylor superpuestos sobre el mapa de colores de la componente azimutal de la vorticidad $[-1.21 \text{ } 1.21]$ para los números de Reynolds, de arriba hacia abajo, $Re_a = 50, 60, 70, 80, 90$. Los valores de la magnitud de la vorticidad están adimensionalizados con el tiempo característico Ω_a . Se usa $\eta = 2$ y $\Gamma = 6$. El valor crítico que se espera es $Re_{critico} = 68.2$.

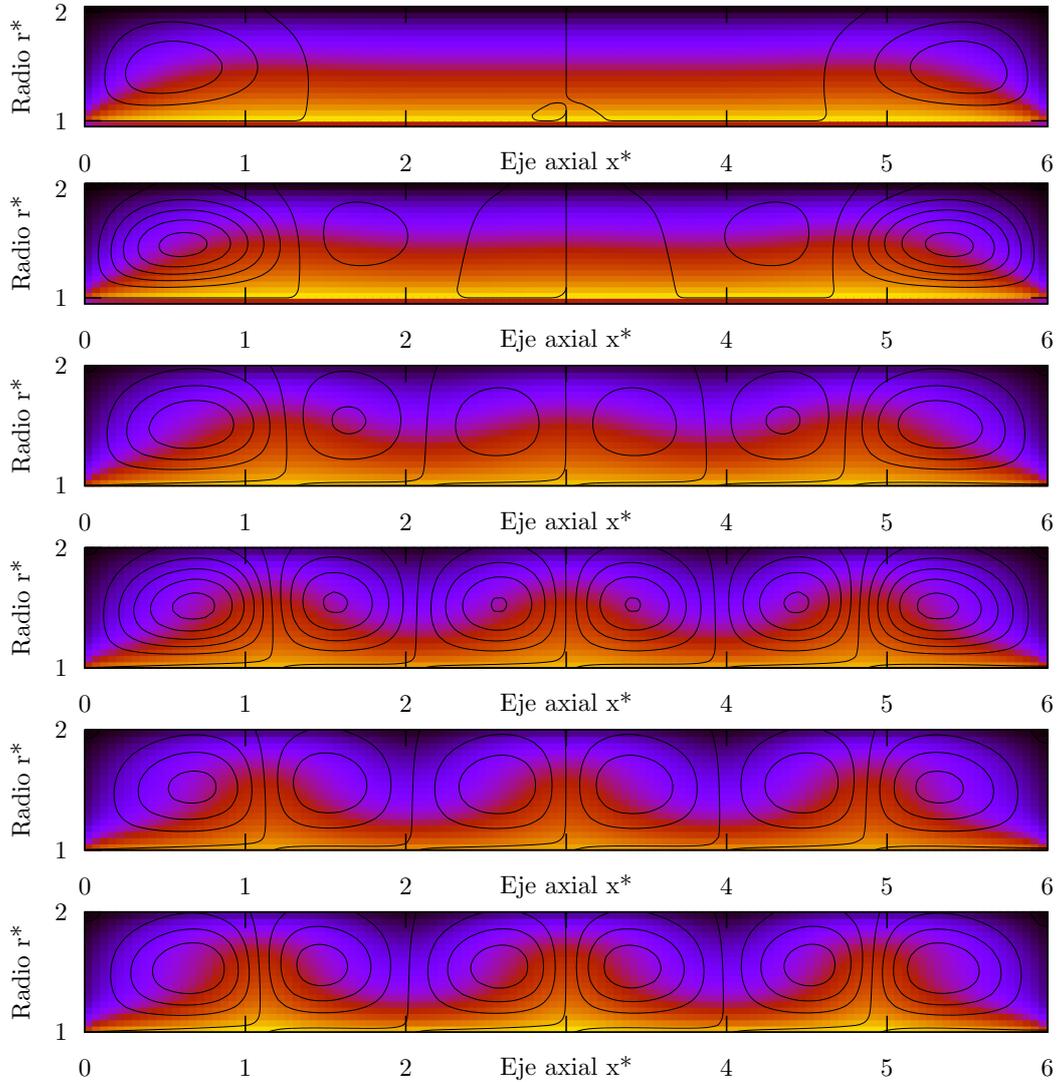


Fig. 4.18.: Vortices de Taylor superpuestos sobre el mapa de colores de la magnitud del momento angular $[0 \text{ } \blacksquare \text{ } 6.5]$ para los números de Reynolds, de arriba hacia abajo, $Re_a = 50, 60, 70, 80, 90$. Se usa el factor $\rho_0 a^5 \Omega_a$ para adimensionalizar la magnitud del momento angular. Se usa $\eta = 2$ y $\Gamma = 6$. El valor crítico que se espera es $Re_{critico} = 68.2$.

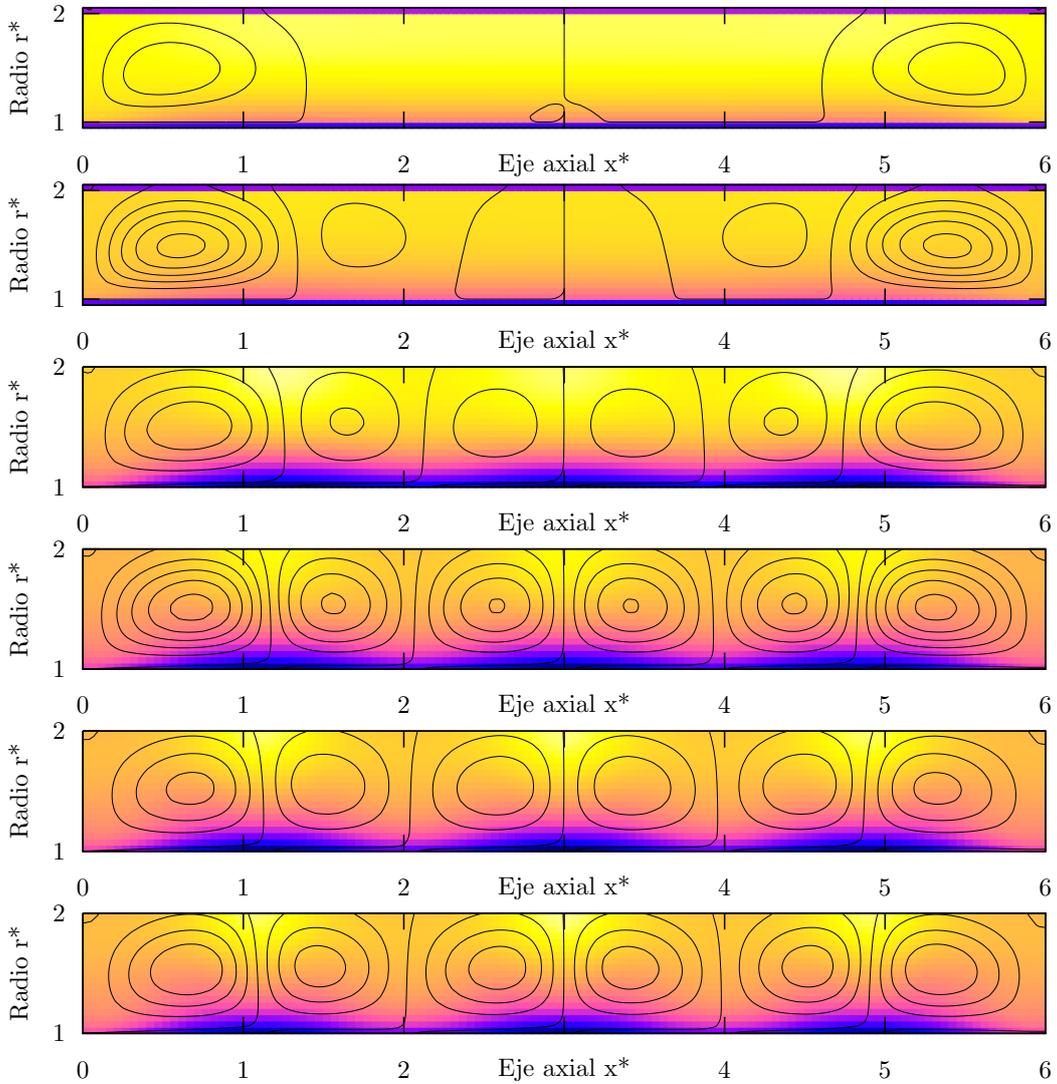


Fig. 4.19.: Vortices de Taylor superpuestos sobre el mapa de colores de la magnitud de la presión [12.5  17.5] para los números de Reynolds, de arriba hacia abajo, $Re_a = 50, 60, 70, 80, 90$. Se usa el factor $\rho_0 a \Omega_a^2$ para adimensionalizar la presión. Se usa $\eta = 2$ y $\Gamma = 6$. El valor crítico que se espera es $Re_{critico} = 68.2$.

Las figuras anteriores muestran cómo los vórtices que se generan en las tapas del anillo tratan de difundirse a lo largo del cilindro. Solo cuando se tiene un Reynolds Re_a por encima del valor crítico es que se observan a lo largo del cilindro, satisfaciéndose

la cantidad de vórtices que se espera. Este comportamiento, experimentalmente, se reporta en [7].

4.3.6. Observaciones numéricas (Parte II)

En esta sección se muestran los números de Reynolds críticos del cilindro interno Re_a , ya sea en función del inverso del parámetro η o del número de Reynolds del cilindro externo Re_b , para los que aparece la primera inestabilidad en la simulación y su comparación con resultados experimentales [34, 36].

Curva de estabilidad de Re_a en función de η^{-1}

En este caso se deja $\gamma = 0$, i.e. el cilindro externo fijo, y numéricamente se siguen los protocolos experimentales [4, 7] de ir incrementando gradualmente la velocidad de rotación del cilindro interno hasta observar el cambio de régimen. El tiempo de espera antes de cambiar la velocidad de rotación del cilindro interno es tal que se satisfaga la Ec.(4.8).

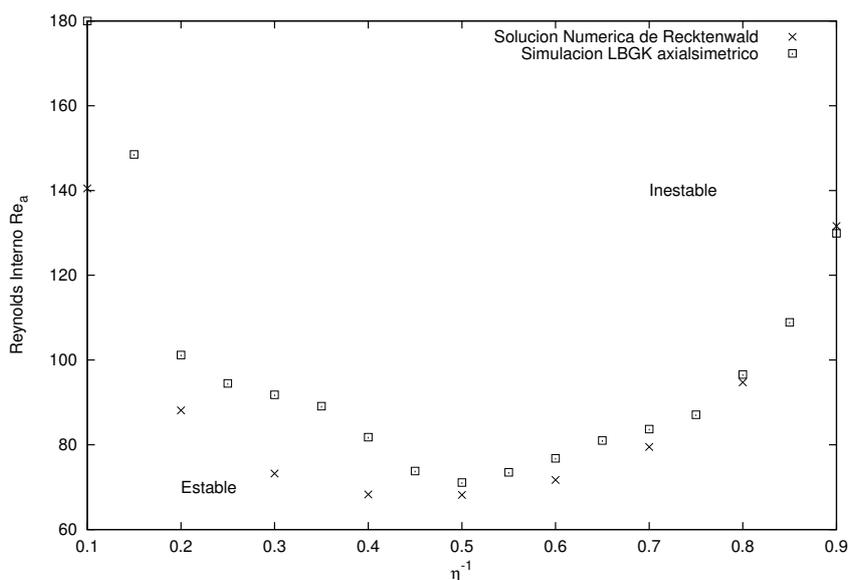


Fig. 4.20.: Curva de estabilidad para el número de Reynolds del cilindro interno, Re_a , en función del inverso de la razón de radios η . La curva analítica son los resultados numéricos que obtienen Recktenwald, Lücke y Müller [34].

A continuación se muestran los resultados para una malla de 2400 nodos, $N_x = 120$, $\tau = 1.0$, $\Gamma = 6$ y N_y adaptado a mantener la diferencia entre el radio externo e interno con 20 nodos. En la Fig.(4.20) se tiene la curva de estabilidad (Re_a vs η^{-1}).

Para decidir que se ha llegado al valor crítico del número de Reynolds Re_a se usa la condición de que se observen Γ vórtices a lo largo del cilindro en el estado estacionario.

En la imagen anterior no se usa el valor de $Re_{critico}$ en función de η de la Ec.(4.36) ya que se tratan casos con $\eta^{-1} \rightarrow 0$, los que ya no cumplen con la aproximación hecha en la Ec.(4.36). Para este caso se utilizan los resultados numéricos de [34] para comparar los valores críticos de la simulación.

Se observa en esta gráfica un buen comportamiento de la simulación para valores de η^{-1} mayores a 0.5. Esto esta de acuerdo a la condición de mantener una separación entre los cilindros no muy grande que usan en [34].

Curva de estabilidad de Re_a en función de Re_b

En esta ocasión se comienza por hacer girar súbitamente al cilindro interno y al cilindro externo para llegar a la solución básica. Una vez hecho esto se empieza a incrementar la velocidad de rotación del cilindro interno hasta que se observe la primera inestabilidad.

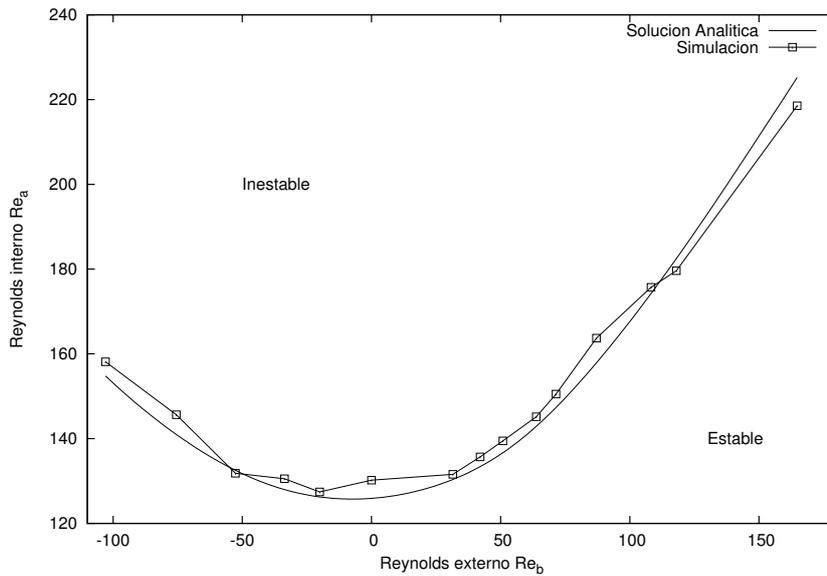


Fig. 4.21.: Curva de estabilidad para el número de Reynolds del cilindro interno, Re_a , en función del número de Reynolds del cilindro externo, Re_b . Los resultados analíticos se obtiene de [36] para $\eta = 1.14$.

En seguida se muestran los resultados de la curva de estabilidad (Re_a vs Re_b) obtenidos para una malla de 3200 nodos, $Nx = 160$, $\tau = 1.0$, $\Gamma = 8$ y los radios en $y_j = 146$

y $y_j = 167$.

Esta gráfica solo se pudo obtener para los valores que se muestran ya que si el número de Reynolds se sigue incrementando la simulación se vuelve inestable. A su vez, en esta imagen el radio interno se coloca lejos del eje de simetría ya que se observó que el método no reproduce vórtice alguno si el cilindro interno esta muy cerca.

4.3.7. Observaciones numéricas (Parte III)

T. Brooke–Benjamin y T. Mullin se encargaron de dar una descripción experimental de cómo afecta que el cilindro sea finito y que sucede con el flujo cuando se cambia gradualmente la velocidad de rotación del cilindro interno en la primera inestabilidad. Observan casos de flujos secundarios, pero que siguen siendo axialsimétricos, a la primera inestabilidad [4].

Para esto utilizan tapas fijas, como la que se simulan en LBGK usando el método rebote a medio camino, y reportan casos en los que aparece un número distinto de vórtices, a los que se esperan dada una razón Γ , a medida que se modifica la velocidad de rotación del cilindro interno.

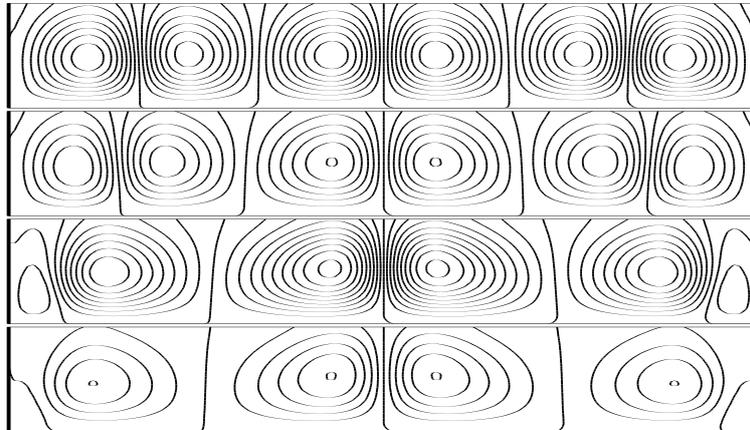


Fig. 4.22.: Vórtices de la simulación de flujos secundarios en la primera inestabilidad de Taylor. El eje horizontal es x^* y el eje vertical r^* . En todas las imágenes $\eta = 2$. Las imágenes corresponden a una malla de 2400 nodos, razón de aspecto $\Gamma = 6$, para los números de Reynolds, de arriba hacia abajo, $Re_a = 78.624, 93.366, 113.022, 132.678$.

Para reproducir este comportamiento se parte, en la simulación, de la situación donde se rompe la solución circular y se tienen los vórtices a lo largo del cilindro, en seguida

se comienza a incrementar gradualmente la velocidad del cilindro interno, manteniendo fija la velocidad del cilindro externo, hasta observar un cambio en la estructura del flujo. Al igual que en la sección anterior, se usa la Ec.(4.8) para decidir cuando hacer el incremento de la velocidad de rotación del cilindro interno.

Se muestran a continuación los resultados para dos simulaciones, una con 2400 nodos para las razones $\eta = 2$, $\Gamma = 6$, Fig.(4.22), y otra con 800 nodos para las razones $\eta = 2$, $\Gamma = 8$, Fig.(4.23). En las dos simulaciones el número de Reynolds crítico es $Re_{\text{critico}} = 68.2$.

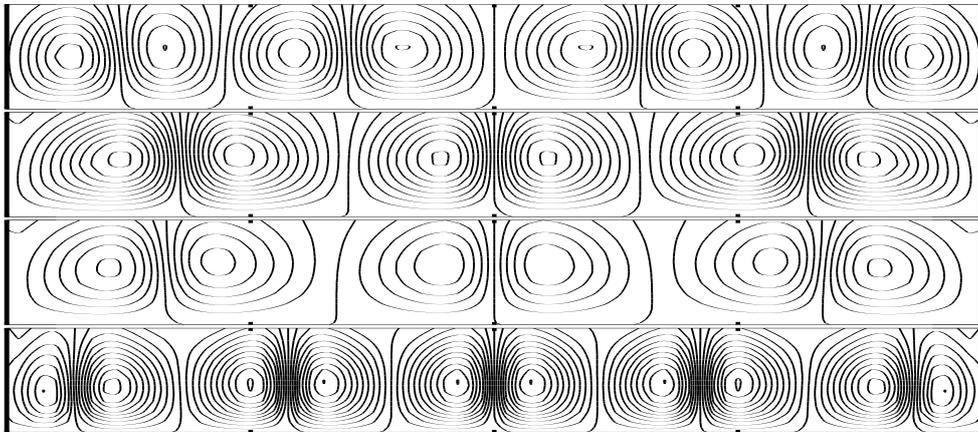


Fig. 4.23.: Vórtices de la simulación de flujos secundarios en la primera inestabilidad de Taylor. El eje horizontal es x^* y el eje vertical r^* . En todas las imágenes $\eta = 2$. Las imágenes corresponden a una malla de 800 nodos, razón de aspecto $\Gamma = 8$, para los números de Reynolds, de arriba hacia abajo, $Re_a = 101.373, 114.540, 125.826, 169.089$.

En las Figuras (4.22) y (4.23) se observa cualitativamente parte del comportamiento de flujos secundarios al cambiar el número de vórtices que se generan en la primera inestabilidad a medida que se modifica la velocidad de rotación del cilindro interno.

Este cambio, en el número de vórtices, es mencionado por Benjamin y Mullin para una razón de aspecto distinta a las que se usan en las dos simulaciones [4].

En este trabajo se propone una variante al modelo LBGK D3Q27 para simular flujos con simetría axial. La idea consiste en reducir los cálculos a un plano de simetría sin alterar la esencia del algoritmo.

Para limitar el esquema D3Q27 al plano de simetría se requiere extrapolar los valores de la función de distribución que se desconocen fuera del plano. Esto se logra utilizando sobre los nodos fluidos, que no pertenecen al plano, el método de extrapolación para frontera sólidas [19].

Para validar el modelo, se simulan los flujos de Poiseuille, Womersley, y el de Taylor–Couette. La simulación de los dos primeros flujos concuerdan cualitativamente sin embargo los resultados no escalan correctamente con la viscosidad. Se cree que esto se debe a las condiciones de entrada y salida para imponer presiones.

Para el flujo de Taylor–Couette se obtiene correctamente la solución básica (circular) que no depende de la viscosidad. Se presenta el estudio del comportamiento del método cuando se acerca el flujo a la primera inestabilidad de Taylor, que es axialsimétrica, y se obtiene que el método reproduce los vórtices de Taylor. El modelo reproduce razonablemente bien las curvas de estabilidad de la primera transición para un par de situaciones. En la primera, que corresponde a dejar fijo cilindro externo y girar el interno para diferentes razones entre los radios de los cilindros, se reproduce la curva de estabilidad encontrada numéricamente por Recktenwald [34]. En el caso en que se hacen girar los dos cilindros manteniendo una razón de radios pequeña el método reproduce la curva de estabilidad encontrada teóricamente por Taylor [36].

En conclusión, la variante propuesta reproduce cualitativamente los flujos axialsimétricos pero falla cuantitativamente pues los resultados no escalan correctamente con

la viscosidad. El método acierta en reproducir la primera inestabilidad de Taylor–Couette incluyendo casos de flujos secundarios en los que aparecen mas o menos vórtices de los que se esperan dada la razón de aspecto [4]. La idea atrás del método parece correcta pero para poder llevarla a la práctica falta entender la discrepancia en el comportamiento de la viscosidad y corregirla, así como incluir condiciones para fronteras sólidas curvas.



Programa de Boltzmann en una malla con simetría axial

A continuación se muestra una versión reducida del programa para el método de Boltzmann en una malla con simetría axial.

En este programa solo se considera la actualización de la función de distribución f_α para nodos fluidos. Con esto se ejemplifica la forma de obtener los valores de la función de distribución f_α fuera del plano de simetría y no guardarlos en memoria.

No se incluyen las subrutinas asociadas a las condiciones de fronteras sólidas ni las asociadas a las condiciones de entrada y salida del sistema.

```
!-----!  
! INTEGRACION LBGK  
! + Stream      : Distribucion de f's sobre vecinos.  
! + Collide     : Asignacion del operador de colision BGK en un nodo.  
! + Extrapolacion : Stream con descomposicion de equilibrio y no equilibrio.  
!-----!  
SUBROUTINE INTEGRACION  
USE precision ! Precision de flotante  
USE parameters ! Como rho0, tau, base de vectores c  
USE domains ! Esquema de 27 vecinos  
USE arrays ! Funcion de distribucion f0(t) y f(t + delta t)  
IMPLICIT NONE  
  
INTEGER :: l , ll , Ax, Ay, Bx, By  
  
REAL(PR) :: feq , fso  
REAL(PR) :: feqI , fneqI  
  
REAL(PR) :: rho , ux, uy, uz  
REAL(PR) :: rho0 , vx, vy, vx  
REAL(PR) :: rhoA , uAx, uAy, uAz  
REAL(PR) :: rhoB , uBx, uBy, uBz  
REAL(PR) :: rhoI , uIx , uIy , uIz  
  
REAL(PR) :: u_dot_c , v_dot_c  
REAL(PR) :: u_dot_u , v_dot_v  
  
REAL(PR) :: r , d0 , d1 , lambda , theta  
  
INTEGER, DIMENSION(1:2) :: X0, X  
  
!-----!  
! Calculo de campos hidrodinamicos del fluido en el punto X0
```

APÉNDICE X. PROGRAMA DE BOLTZMANN EN UNA MALLA CON
SIMETRÍA AXIAL

```

!-----!
DO l = 1,NV
    rho = rho +          f0(1,X0(1),X0(2))
    ux  = ux  + c(1,1)*f0(1,X0(1),X0(2))
    uy  = uy  + c(2,1)*f0(1,X0(1),X0(2))
    uz  = uz  + c(3,1)*f0(1,X0(1),X0(2))
ENDDO

ux = ux/rho0
uy = uy/rho0
uz = uz/rho0

DO l = 1,NV

!-----!
! Calculo de la funcion de equilibrio en la direccion l
!-----!
u_dot_c = c(1,1)*ux + c(2,1)*uy + c(3,1)*uz
u_dot_u = ux*ux + uy*uy + uz*uz

feq = w(1)*(rho + rho0*(3.0_PR*(u_dot_c) &
& + 4.5_PR*(u_dot_c)**2 &
& - 1.5_PR*(u_dot_u)))

!-----!
! Operador de colision BGK
! + COLISION (COLLIDE)
!-----!
fso = (feq - f0(1,X0(1),X0(2)))/tau

!-----!
! Indices (En el plano de simetria) del nodo vecino a X0
!-----!
X(1) = X0(1) + c(1,1)
X(2) = X0(2) + c(2,1)

!-----!
! Dentro del plano de simetria
!-----!
IF (c(3,1) .EQ. 0) THEN

!-----!
! + FLUJO (STREAM)
!-----!
f(1,X(1),X(2)) = f0(1,X0(1),X0(2)) + fso

!-----!
! Fuera del plano de simetria
!-----!
ELSE

Ax = X(1)
Ay = X(2)

Bx = X(1)+1
By = X(2)

d0 = REAL(A,PR)
d1 = SQRT(d0**2 + 1.0_PR)

lambda = d1-d0
theta = ATAN(REAL(c(3,1),PR)/A)

!-----!
! Cambio de direccion para el metodo de extrapolacion
!-----!
DO m = 1,NV
    IF ( (c(1,m) .EQ. -c(1,1)) .AND. &
& (c(2,m) .EQ. -c(2,1)) .AND. &
& (c(3,m) .EQ. -c(3,1)) ) THEN

        l1 = m
    ENDIF
ENDDO

!-----!
! Calculo de campos hidrodinamicos en el punto A
!-----!
DO l = 1,NV
    rhoA = rhoA +          f0(l1,Ax,Ay)

```

APÉNDICE X. PROGRAMA DE BOLTZMANN EN UNA MALLA CON
SIMETRÍA AXIAL

```

        uAx = uAx + c(1,1)*f0(11 ,Ax,Ay)
        uAy = uAy + c(2,1)*f0(11 ,Ax,Ay)
        uAz = uAz + c(3,1)*f0(11 ,Ax,Ay)
ENDDO

uAx = uAx/rho0
uAy = uAy/rho0
uAz = uAz/rho0

!-----!
! Calculo de campos hidrodinamicos en el punto B
!-----!
DO l = 1,NV
    rhoB = rhoB + f0(11 ,Bx,By)
    uBx = uBx + c(1,1)*f0(11 ,Bx,By)
    uBy = uBy + c(2,1)*f0(11 ,Bx,By)
    uBz = uBz + c(3,1)*f0(11 ,Bx,By)
ENDDO

uBx = uBx/rho0
uBy = uBy/rho0
uBz = uBz/rho0

!-----!
! Interpolacion lineal de los campos entre los puntos A y B
!-----!
rhoI = rhoA + lambda*(rhoB - rhoA)
uIx = uAx + lambda*( uBx - uAx)
uIy = uAy + lambda*( uBy - uAy)
uIz = uAz + lambda*( uBz - uAz)

!-----!
! Rotacion de la velocidad
!-----!
rhoo = rhoI
vx = uIx*COS(theta) - uIz*SIN(theta)
vy = uIy
vz = uIx*SIN(theta) + uIz*COS(theta)

!-----!
! Calculo de la funcion de equilibrio con la velocidad interpolada
!-----!
v_dot_c = c(1,11)*vx + c(2,11)*vy + c(3,11)*vz
v_dot_v = vx*vx + vy*vy + vz*vz

feqI = w(11)*(rhoo + rho0*(3.0_PR*(v_dot_c) &
& + 4.5_PR*(v_dot_c)**2 &
& - 1.5_PR*(v_dot_v)))

!-----!
! Calculo de la funcion de no equilibrio en la direccion 11 de X0
!-----!
u_dot_c = c(1,11)*ux + c(2,11)*uy + c(3,11)*uz
u_dot_u = ux*ux + uy*uy + uz*uz

feq = w(11)*(rho + rho0*(3.0_PR*(u_dot_c) &
& + 4.5_PR*(u_dot_c)**2 &
& - 1.5_PR*(u_dot_u)))

fneqI = f0(11 ,X0(1),X0(2)) - feq

!-----!
! + SIMETRIA (EXTRAPOLACION)
!-----!
f(11 ,X0(1),X0(2)) = feq + (1.0_PR - (1.0_PR/tau))*fneq

ENDIF
ENDSUBROUTINE INTEGRACION

```

Bibliográfia

- [1] **Abramowitz M., Stegun A.I.** *Handbook of Mathematical Functions*. National Bureau of Standards Applied Mathematics Series-55, 1972.
- [2] **Arfken B. G., Weber J. H.** *Mathematical Methods for Physicists*. Academic-Press, 2001.
- [3] **Batchelor G.K.** *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, 2000.
- [4] **Benjamin B. T., Mullin T.** “Notes on the multiplicity of flows in the Taylor experiment”. *Journal of Fluid Mechanics*, 121:219–230, 1982.
- [5] **Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.** “A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems”. *Physical Review*, 94(3):511–525, 1954.
- [6] **Boyce W., DiPrima R.** *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*. John Wiley & Sons Inc., 2001.
- [7] **C. David Andereck, S.S. Liu, Harry L. Swinney.** “Flow regimes in a circular Couette system with independently rotating cylinders”. *Journal of Fluid Mechanics*, 164(1):155–183, 1985.
- [8] **Chandrasekhar S.** *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Clarendon Press, 1961.
- [9] **Chen S., Dawson S.P., Doolen G.D., Janecky D.R., Lawniczak A.** “Lattice methods and their applications to reacting systems”. *Computer & Chemical Engineering*, 19(6-7):617–646, 1995.

- [10] **Chen S., Doolen G.D.** “Lattice Boltzmann method for fluid flows”. *Annual Review Fluid Mechanics*, 30(1):329–364, 1998.
- [11] **Chen S., Martínez D., Mei R.** “On boundary conditions in lattice Boltzmann methods”. *Physics of Fluids*, 8(9):2527–2536, 1996.
- [12] **Currie I.G.** *Fundamental Mechanics of Fluids*. Marcel Dekker, 2003.
- [13] **Davis J.P., Rabinowitz P.** *Methods of Numerical Integration*. Academic Press, 1984.
- [14] **D’Humières D., Bouzidi M., Lallemand P.** “Thirteen–velocity three–dimensional lattice Boltzmann model”. *Physical Review E*, 63(066702):1–7, 2001.
- [15] **Drazin P.G., Reid W.H.** *Hydrodynamic Stability*. Cambridge University Press, 2004.
- [16] **Eggels M. Jack G.** “Direct and large-eddy simulation of turbulent fluid flow using lattice-Boltzmann scheme”. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 17(3):307–323, 1996.
- [17] **Filippova O., Hänel D.** “Grid Refinement for Lattice–BGK Models”. *Journal of Computational Physics*, 147(1):219–228, 1998.
- [18] **Frisch U., D’Humières D., Hasslacher B., Lallemand P., Pomeau Y., Rivet J.P.** “Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions”. *Complex Systems*, 1:649–707, 1987.
- [19] **Guo Z., Zheng C., Shi B.** “An extrapolation method for boundary conditions in lattice Boltzmann method”. *Physics of Fluids*, 14(6):2007–2010, 2002.
- [20] **Guyon E., Hulin J.P., Petit L., Mitescu C.D.** *Physical Hydrodynamics*. Oxford University Press, 2001.
- [21] **Halliday I., Hammond L.A., Care C.M., Good K., Stevens A.** “Lattice Boltzmann equation hydrodynamics”. *Physical Review E*, 64(011208):1–8, 2001.
- [22] **He X., Luo L.S.** “Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier–Stokes”. *Journal of Statistical Physics*, 88(3-4):927–944, 1997.
- [23] **Higuera F.J., Jiménez J.** “Boltzmann approach to lattice gas simulations”. *Europhysics Letters*, 9(7):663–668, 1989.
- [24] **Landau D.L., Lifshitz M.E.** *Statistical Physics Part 1*. Pergamon Press, 1980.
- [25] **Landau L.D., Lifshitz E.M.** *Fluid Mechanics*. Pergamon Press, 1987.

- [26] **Lee T.S., Huang H., Shu C.** “An axisymmetric incompressible lattice Boltzmann model for pipe flow”. *International Journal of Modern Physics C*, 17(5):645–661, 2006.
- [27] **Mei R., Luo L.S., Shyy W.** “An Accurate Curved Boundary Treatment in the Lattice Boltzmann Method”. *Journal of Computational Physics*, 155(2):307–330, 1999.
- [28] **Mei R., Shyy W., Dazhi Y., Luo L.S.** “Lattice Boltzmann method for 3-D flows with curved boundary”. *Journal of Computational Physics*, 161(2):680–699, 2000.
- [29] **Mishra C. S., Roy K. H.** “Solving transient conduction and radiation heat transfer problems using the lattice Boltzmann method and the finite volume method”. *Journal of Computational Physics*, 223(1):89–107, 2007.
- [30] **Newton I.** *Mathematical Principles of Natural Philosophy and his System of the World. Volume One: The Motion of Bodies.* University of California Press, 1934.
- [31] **Niu X.D., Shu C., Chew T.Y.** “An axisymmetric lattice boltzmann model for simulation of Taylor–Couette flows between two concentric cylinders”. *International Journal of Modern Physics C*, 14(6):785–196, 2003.
- [32] **Noble R.D., Chen S., Georgiadis G.J., Buckius R.** “A consistent hydrodynamic boundary condition for the lattice Boltzmann method”. *Physics of Fluids*, 7(1):203–209, 1995.
- [33] **Qian Y.H., D’Humières D., Lallemand P.** “Lattice BGK models for Navier–Stokes Equation”. *Europhysics Letters*, 17(6):479–484, 1992.
- [34] **Recktenwald A., Lücke M.** “Taylor vortex formation in axial through–flow: Linear and weakly nonlinear analysis”. *Physical Review E*, 48(6):4444–4454, 1993.
- [35] **Stokes G.G.** *Mathematical and Physical Papers Vol. 1.* Cambridge University Press, 1880.
- [36] **Taylor I.G.** “Stability of a Viscous Liquid Contained between Two Rotating Cylinders”. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 223:289–343, 1923.
- [37] **Thomas G.B., Weir M.D., Hass J., Giordano F.R.** *Thomas’ Calculus.* Addison Wesley, 2004.
- [38] **Thomson J.M.** *Taylor vortices and Bernand cells: The emergent complexity of two simple fluid systems.* Bachelor Thesis Middlebury College, Vermont, 2000.

- [39] **Xu A., Gonnella G., Lamura A.** “Phase separation of incompressible binary fluids with lattice Boltzmann methods”. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 331(1-2):10–22, 2004.
- [40] **Zamir M.** *The Physics of Pulsatile Flow: Biological Physics Series*. Springer–Verlag, 2000.
- [41] **Ziegler D. P.** “Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations”. *Journal of Statistical Physics*, 71(5-6):1171–1177, 1993.
- [42] **Zwanzig R.** *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, 2001.