



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CONVECCIÓN NATURAL EN SIMETRÍA
ESFÉRICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
FÍSICO

PRESENTA:
ANGEL DOMINGO GALLEGOS PAZOS

DIRECTOR DE TESIS:
DR. CARLOS MÁLAGA IGUIÑIZ

2015

Ciudad Universitaria, D. F.





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.

Hoja de datos

1. Datos del alumno

Angel Domingo Gallegos Pazos

56 01 27 35

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

308611380

2. Datos del tutor

Dr. Carlos Málaga Iguñiz

3. Datos del sinodal 1

Dr. Arturo Olvera Chávez

4. Datos del sinodal 2

Dr. Ramón Gabriel Plaza Villegas

5. Datos del sinodal 3

Dr. Eduardo Ramos Mora

6. Datos del sinodal 4

Dr. Raúl Mauricio Rechtman Schrenzel

7. Datos del trabajo escrito

Convección natural en simetría esférica

87 p

2015

Agradecimientos

A mis padres: Jose Luis Gallegos Mercado y Maria Teresa Pazos Rodriguez por el apoyo brindado a lo largo de mi formación.

A Danna no solo por ser mi compañera de vida sino por el apoyo brindado al revisar una y otra vez la ortografía de la tesis.

A Fernando por el simple hecho de que debes aparecer aquí.

A Jesús Florez Tellez por haberme ayudado a decidirme por el camino de la Física.

Al Dr. Carlos Málaga por el tiempo dedicado tanto a la discusión de los resultados como a la detallada revisión de la tesis.

A la Universidad Nacional Autónoma de México por proveerme de una educación de gran calidad.

A los miembros del Jurado por sus prontas y acertadas observaciones así como por sus valiosos comentarios.

Al Dr. Peter Teertstra de la Universidad de Waterloo, Canada por facilitar los datos experimentales que hicieron posible la validación del trabajo realizado y la realización de esta tesis.

Índice general

Introducción	1
1. Modelo de Oberbeck-Boussinesq	7
1.1. Ecuaciones de Navier-Stokes	7
1.2. Aproximación de Oberbeck-Boussinesq	10
1.3. Adimensionalización	20
2. El método de la ecuación de Boltzmann en Redes	23
2.1. Ecuación de Boltzmann y modelo BGK	24
2.2. Discretización	26
2.3. Expansión de Chapman-Enskog	35
2.4. Modelo Térmico	40
2.5. Discretización Espacial	43
2.6. Condiciones de Frontera	44
3. Simulación numérica de la convección natural entre dos esferas concéntricas	47
3.1. Ajuste de parámetros	49
3.1.1. Cálculo del número de Nusselt	52
3.1.2. Ajuste para τ y $g\beta$	54
3.1.3. Ajuste para ρ_0	56
3.1.4. Cambio de Resolución	57
3.2. Comparación experimental Ra vs Nu	58
3.3. Verificación de condiciones de frontera	63
3.4. Isotermas y líneas de corriente	64
3.4.1. Zona Conductiva	65
3.4.2. Zona de Transición	69
3.4.3. Zona Convectiva	73

4. Conclusiones y Perspectivas

77

Bibliografía

85

Introducción

El flujo convectivo es uno de los principales mecanismos de transporte de energía y masa. En particular, el flujo producido por un gradiente de temperatura en presencia de un campo gravitacional (convección natural) resulta de gran relevancia en la naturaleza y en aplicaciones de tipo industrial. Ejemplos en la naturaleza son la dinámica de los océanos, la atmósfera y en el interior de estrellas y planetas.

La idea de convección ha estado presente por lo menos desde 1870 cuando el Conde Rumford introdujo la idea del proceso como hoy la entendemos; sin embargo, fue hasta 1900 cuando tomó mayor relevancia en la comunidad científica gracias a los experimentos realizados por H. Bénard [1].

Dichos experimentos consistían en someter una capa de fluido a un gradiente de temperatura en sentido opuesto a la fuerza gravitacional terrestre. La capa de fluido se encontraba en un recipiente rectangular cuyo lado paralelo al campo gravitacional era mucho menor a los lados perpendiculares, la placa inferior del recipiente se calentaba mientras que la placa superior se encontraba abierta a la atmósfera para de esta forma generar el gradiente de temperatura, ver figura 1. La capa de fluido se encontraba inicialmente en equilibrio hidrostático y Bénard observó que a partir de cierto gradiente de temperatura se rompía el equilibrio y se generaba un flujo. Este flujo era estacionario y en él se presentaban patrones celulares hexagonales [1][pág.11]. El entendimiento de la formación de estos patrones (celdas convectivas de Bénard) motivó el estudio teórico de la convección.

Los experimentos de Bénard pueden entenderse con el problema de convección natural para un fluido entre dos placas paralelas perpendiculares al campo gravitacional. Las placas se encuentran a una temperatura constante, donde la placa inferior está a una temperatura mayor que la superior.

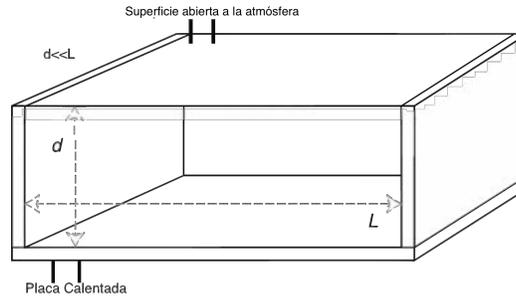


Figura 1: Geometría del problema de convección estudiado por H. Bénard

En 1916 Lord Rayleigh estableció las bases teóricas para el entendimiento de la inestabilidad hidrostática exhibida en los experimentos de Bénard con base en el problema anterior, es importante destacar que Rayleigh trabajó con dos fronteras cerradas y no con una abierta y una cerrada como lo hizo Bénard. Rayleigh caracterizó la transición de un estado de equilibrio hidrostático a uno de flujo estacionario mediante un número adimensional, que hoy conocemos como número de Rayleigh, definido como

$$Ra \equiv \frac{g\beta\Delta TL^3}{\nu\alpha},$$

donde g es la aceleración debida a la gravedad, β es el coeficiente de expansión térmica, ΔT es la diferencia de temperatura entre la placa superior e inferior, L es el grosor de la capa de fluido, ν es la viscosidad cinemática y α la difusividad térmica. Rayleigh mostró que una vez sobrepasado un valor crítico de Ra (Ra_c) el sistema se vuelve hidrostáticamente inestable y se genera un flujo.

La introducción del número de Rayleigh permitió separar al sistema en dos regímenes; el primero para $Ra < Ra_c$ donde hay equilibrio hidrostático y únicamente se presenta transferencia de energía por conducción debido a la diferencia de temperatura entre las placas. Y el segundo, para $Ra > Ra_c$, en el cual existe un flujo y el principal mecanismo de transporte de energía es la convección, que incluye el transporte por movimiento de los elementos de fluido. Es decir, Ra_c determina la inestabilidad hidrostática y el cambio en la forma de transferencia de energía.

Como la transición de un régimen a otro da lugar a un cambio en la forma de transporte se puede caracterizar el sistema a través de la medición del flujo de energía a través de las placas. Para realizar esta caracterización se utiliza un número adimensional conocido como número de Nusselt, dado por

$$Nu \equiv \frac{L}{Ak\Delta T} \int_A -k \frac{\partial T}{\partial n} dA,$$

donde A es el área de la superficie por la cual se calcula el flujo, k es la conductividad térmica del fluido, T es el campo de temperatura y n es la normal a la superficie donde se calcula el flujo. Este número corresponde al flujo característico adimensional en la superficie [2]. Usualmente se calcula Nu midiendo el flujo de energía sobre la placa inferior.

En el problema de las dos placas paralelas, cuando el sistema se encuentra en el régimen conductivo, Nu es constante e igual a la unidad para todo $Ra < Ra_c$. Sin embargo para $Ra > Ra_c$ el número de Nusselt deja de ser constante y depende del número de Rayleigh. Esto indica que Nu será el parámetro de orden asociado a la transición de un estado conductivo a un estado convectivo [1][pág.69].

El estudio de los patrones de flujo y de la relación entre Nu y Ra , así como la determinación de Ra_c en el sistema basado en los experimentos de Bénard y estudiado teóricamente por Rayleigh, es conocido en la literatura como convección de Rayleigh-Bénard [3]. Desde la formulación de la convección de Rayleigh-Bénard han existido diversas extensiones a este fenómeno ya sea mediante el cambio de la geometría, la introducción de rotación e inclinación, fenómenos magnéticos y eléctricos, tensión superficial, etc [3].

En el presente trabajo se reporta el estudio numérico de una variación al problema clásico de Rayleigh-Bénard. Esta variación consiste en cambiar la geometría plana por la geometría esférica mostrada en la figura 2. Hay que mencionar que ocasionalmente al estudiar convección natural en geometrías no planas se redefine al número de Nusselt de forma que represente al cociente entre los flujos de energía para el problema de convección y para el problema de conducción en ausencia del campo gravitacional, sin embargo en el presente trabajo se utilizará la forma presentada anteriormente [4].

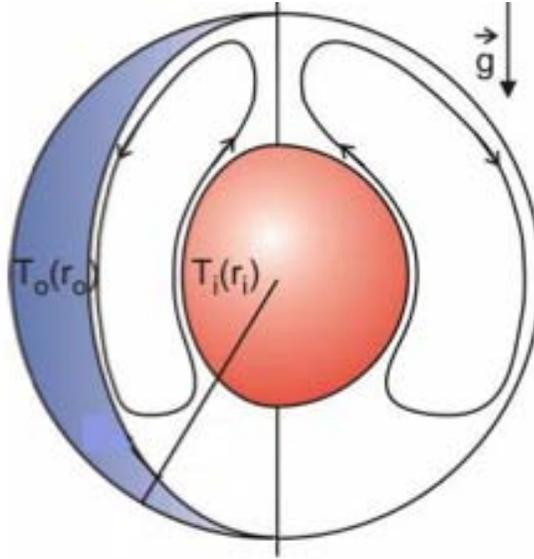


Figura 2: Geometría del problema de convección estudiado.

Este sistema corresponde a un fluido contenido dentro de dos esferas concéntricas con temperaturas constantes T_e y T_i correspondientes a la esfera exterior e interior respectivamente, en donde $T_e < T_i$.

A diferencia del caso clásico de Rayleigh-Bénard, para una geometría esférica no existe un estado hidrostático y por lo tanto no existe un régimen puramente conductivo. El estado hidrostático no puede obtenerse ya que las curvas isotermas correspondientes deben ser horizontales debido al campo gravitacional, por lo que no podrán satisfacer las condiciones de frontera en las esferas [5]. Lo que quiere decir que, al introducir la geometría esférica no existirá una inestabilidad hidrostática ya que siempre habrá movimiento. Esto hace que el problema a estudiarse sea conceptualmente diferente, sin embargo aún será posible caracterizar las transiciones entre diferentes estados convectivos mediante el número de Rayleigh y el número de Nusselt [2].

Es importante mencionar que la geometría esférica del problema puede ser de interés dentro de la industria. La convección en esta geometría es de interés para los diseñadores de equipo microelectrónico ya que para proteger equipo electrónico del ambiente, como polvo o humedad, es necesario colocarlos dentro de un contenedor cerrado y es importante conocer la forma del transporte de energía dentro de los contenedores. El contenedor doblemente conectado más sencillo es el sistema de dos esferas concéntricas por lo que una vez entendido y modelado adecuadamente se puede dar el paso a geometrías más complejas que permitan mejorar el diseño de equipo microelectrónico [2].

El presente trabajo se encuentra dividido en cuatro capítulos. En el capítulo 1 se discuten las ecuaciones de movimiento para el campo de velocidad, temperatura y presión de un fluido Newtoniano bajo la aproximación de Oberbeck-Boussinesq. Esta aproximación es el modelo más sencillo en el cual se presenta el fenómeno de la convección y corresponde a un fluido térmicamente compresible pero mecánicamente incompresible. Es relevante discutir la aproximación de Oberbeck-Boussinesq ya que el método numérico que se usó aproxima estas ecuaciones.

En el capítulo 2 se presenta el método numérico térmico de Boltzmann en redes. Este método aproxima indirectamente las ecuaciones de movimiento introducidas en el capítulo 1, por lo que se utilizaron para simular la convección natural en la geometría esférica ya mencionada bajo la aproximación de Oberbeck-Boussinesq. A partir del método numérico es posible obtener los campos de velocidad y temperatura para el espacio tridimensional del sistema.

En el capítulo 3 se muestra la metodología seguida para ajustar los parámetros libres presentes en el método numérico cuando se busca que el fluido dentro de las esferas represente al aire. La relación obtenida entre Nu y Ra es comparada con los resultados experimentales de Teertstra *et al.* [2]. También se presentan las líneas de corriente y las curvas isothermas obtenidas de las simulaciones para las diferentes zonas convectivas observadas. Es importante mencionar que para simular un sistema tridimensional discretizado, se suele necesitar una gran cantidad de nodos, por lo que las simulaciones se realizaron en paralelo utilizando tarjetas gráficas NVIDIA[®] para reducir los tiempos de cálculo.

Para finalizar, en el capítulo 4 se discuten los resultados experimentales y su relación con los mecanismos de transporte de energía. Adicionalmente se proponen nuevos estudios basados en las experiencias del trabajo de tesis.

Capítulo 1

Modelo de Oberbeck-Boussinesq

En este capítulo se discute el modelo de Oberbeck-Boussinesq, usualmente introducido como una aproximación a las ecuaciones de Navier-Stokes a pesar de que su derivación es todavía tema de debate [6, 7]. Se introducen las ecuaciones de balance para un fluido y posteriormente se muestran algunas derivaciones propuestas para obtener el modelo de Oberbeck-Boussinesq como una aproximación de las ecuaciones de Navier-Stokes.

1.1. Ecuaciones de Navier-Stokes

Para describir la dinámica de un fluido es necesario hacer uso de las ecuaciones diferenciales de balance de momento, balance de energía interna y conservación de masa [6][págs.7-13]. Dichas ecuaciones son

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1.1)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mathbf{f}_b, \quad (1.2)$$

$$\rho \frac{Du_{\text{int}}}{Dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_u = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{e}, \quad (1.3)$$

donde

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla, \quad e = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \quad (1.4)$$

En las ecuaciones anteriores ρ representa la densidad de masa, \mathbf{v} el campo de velocidades, $\boldsymbol{\tau}$ el tensor de esfuerzos, \mathbf{f}_b la densidad fuerza de cuerpo ($\mathbf{f}_b = -\rho g \hat{\mathbf{e}}_z$ en el caso de convección natural), u_{int} la energía interna por unidad de masa y \mathbf{J}_u el flujo de energía interna.

Para que exista balance de momento angular dentro del fluido se requiere que el tensor de esfuerzos sea simétrico [5][págs.142-144]. Debido a esto es posible descomponerlo de forma única en una parte isotópica y una parte libre de traza como

$$\boldsymbol{\tau} = -p_m \mathbf{I} + \mathbf{d}, \quad (1.5)$$

donde

$$p_m \equiv -\frac{1}{3} \text{Tr}(\boldsymbol{\tau}). \quad (1.6)$$

En esta descomposición \mathbf{d} es conocido como tensor deviatórico y p_m como la presión mecánica.

Para especificar el tipo de fluido a tratar hay que definir relaciones constitutivas, es decir especificar \mathbf{d} , p_m y \mathbf{J}_u . El modelo constitutivo Newtoniano es el más sencillo y líquidos convencionales como agua o aire están correctamente descritos por él. Las relaciones constitutivas dentro de este modelo son

$$\mathbf{d} = 2\mu \left[\mathbf{e} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right], \quad (1.7)$$

$$p_m = p - \zeta (\nabla \cdot \mathbf{v}), \quad (1.8)$$

$$\mathbf{J}_u = -\lambda \nabla T. \quad (1.9)$$

donde μ es llamada la viscosidad dinámica, ζ la viscosidad volumétrica y λ la conductividad térmica.

De este modelo pueden hacerse las siguientes observaciones

- El tensor deviatórico tiene una relación lineal con \mathbf{e} y depende únicamente de la viscosidad dinámica.
- La presión mecánica y la presión termodinámica p difieren para un fluido compresible. Esta diferencia se debe a los cambios en la energía interna debido a la compresión y se mide por la viscosidad volumétrica [8].
- El flujo de energía está dado por la ley de Fourier.

Las ecuaciones resultantes para el modelo constitutivo Newtoniano son conocidas como las ecuaciones de Navier-Stokes y están dadas por

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (1.10)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \left(\frac{2}{3}\mu - \zeta\right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \rho g \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (1.11)$$

$$\rho \frac{Du_{\text{int}}}{Dt} = \lambda \nabla^2 T + p (\nabla \cdot \mathbf{v}) - \left(\zeta + \frac{2}{3}\mu\right) (\nabla \cdot \mathbf{v})^2 + 2\mu \mathbf{e} : \mathbf{e}. \quad (1.12)$$

Para que las ecuaciones de Navier-Stokes sean compatibles con la segunda ley de la termodinámica hay que exigir que se cumpla [9][pág.199]

$$\rho \frac{Ds}{Dt} \geq -\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{J}_u}{T}\right). \quad (1.13)$$

donde s es la entropía del sistema. Esta desigualdad es conocida como la desigualdad de Clausius-Duhem e impone sobre los coeficientes constitutivos μ , ζ y λ , al asumirse constantes, las siguientes condiciones

$$\mu \geq 0, \quad \zeta \geq 0, \quad \lambda \geq 0. \quad (1.14)$$

La desigualdad (1.13) también permite justificar la hipótesis de equilibrio termodinámico local para un fluido Newtoniano [9][págs.391-409]. Esto implica la existencia de las ecuaciones de estado locales

$$\rho = \rho(p, T), \quad u_{\text{int}} = u_{\text{int}}(p, T), \quad s = s(p, T). \quad (1.15)$$

Las ecuaciones de Navier-Stokes junto con las ecuaciones de estado forman un sistema de ecuaciones cerrado sujeto únicamente a condiciones iniciales y de frontera.

1.2. Aproximación de Oberbeck-Boussinesq

Si se busca estudiar la termohidrodinámica de un fluido a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes es necesario realizar alguna simplificación. Esto debido a que las ecuaciones tienen un grado de complejidad elevado.

Una forma de simplificar las ecuaciones de Navier-Stokes fue propuesta por Oberbeck en 1888 para estudiar celdas atmosféricas y por Boussinesq en 1903 para estudiar el movimiento de la luz en el entonces postulado éter [6][pag 64.]. Estas ecuaciones simplificadas se encuentran escritas en función de una densidad de referencia ρ_0 y de una temperatura de referencia θ_0 como

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1.16)$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + g\beta (T - \theta_0) \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (1.17)$$

$$\frac{DT}{Dt} = \alpha \nabla^2 T, \quad (1.18)$$

donde la viscosidad cinemática ν , la difusividad térmica α y el coeficiente de expansión térmica β están dados por

$$\nu = \frac{\mu}{\rho_0}, \quad \alpha = \frac{\lambda}{\rho_0 C_p}, \quad \beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p, \quad (1.19)$$

donde C_p es el calor específico a presión constante dado por

$$C_p = \left(\frac{\partial u_{\text{int}}}{\partial T} \right)_p. \quad (1.20)$$

Esta aproximación es usualmente utilizada para estudiar convección natural pero es capaz de describir adecuadamente otros fenómenos físicos, por ejemplo: frentes atmosféricos, circulaciones oceánicas, etc [6].

La naturaleza física de la aproximación consiste en considerar que las variaciones de la densidad son despreciables excepto en el término de fuerza de cuerpo en las ecuaciones de momento, en donde se asume una relación lineal de la densidad con la temperatura [1][págs.16-17]. Esta aproximación es conocida como la aproximación de Oberbeck-Boussinesq y los fluidos que se pueden describir por ella se dice que son mecánicamente incompresibles pero térmicamente compresibles [10][pág.1157].

Tanto Oberbeck como Boussinesq propusieron la aproximación ya mencionada de una forma intuitiva ya que no dieron una justificación rigurosa para ella. Desde que esta aproximación se postuló ha sido controvertida y han existido intentos a lo largo de los años para obtener una derivación sistemática de ella a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes. La búsqueda de esta justificación va más allá de la consistencia matemática ya que a partir de ella se podrían encontrar los regímenes de validez de la aproximación.

Hasta el día de hoy no existe un consenso en la literatura en cuanto a la forma “correcta” de derivar la aproximación de Oberbeck-Boussinesq por lo que resumiremos brevemente algunos de los trabajos que han intentado justificarla [6].

Aparentemente, el primer trabajo que intentó justificar la aproximación fue escrito en 1959 por Spiegel y Veronis [11]. En este trabajo se expanden las funciones T , p y ρ alrededor de alguna solución estacionaria (θ_0, π_0) , donde π_0 representa una presión de referencia, para posteriormente relacionarlas con un parámetro “pequeño” ϵ . El parámetro pequeño lo definieron como el cociente entre la máxima variación de la densidad y la densidad promedio. La idea es sustituir las expansiones y conservar términos de orden $\mathcal{O}(1)$, el problema con su derivación es que deliberadamente preservan un término de orden $\mathcal{O}(\epsilon)$ para obtener las ecuaciones deseadas [10, 12].

El siguiente intento importante, debido a Mihaljan, fue en 1962 [13]. Este trabajo es usualmente citado como la derivación formal de la aproximación de Oberck-Boussinesq y en él, Mihaljan comienza por adimensionalizar las ecuaciones de Navier-Stokes utilizando el teorema de Buckingham. Mediante este teorema identifica los números adimensionales

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &\equiv \beta \Delta T, & \epsilon_2 &\equiv \frac{\alpha^2}{C_p L^2 \Delta T}, \\ Pr &\equiv \frac{\nu}{\alpha}, & g' &\equiv Ra Pr,\end{aligned}\tag{1.21}$$

donde L es una distancia característica y ΔT una temperatura característica. El número Pr lleva el nombre de número de Prandtl y Ra es el número de Rayleigh ya mencionado anteriormente.

Mihaljan propuso para ρ una ecuación de estado lineal en la temperatura e independiente de la presión. Posteriormente propone que los campos \mathbf{v} , p y T se puedan escribir como una serie en ϵ_1 y ϵ_2 . Estas expansiones se introducen en las ecuaciones de Navier-Stokes adimensionalizadas y, asumiendo que estos dos parámetros son considerablemente pequeños, se conservan términos de orden $\mathcal{O}(1)$. Sin embargo, si g es de orden $\mathcal{O}(1)$ cuando $\epsilon_1 \rightarrow 0$ se tiene que $\epsilon_2 \rightarrow \infty$ y viceversa por lo que la expansión que Mihaljan propone es inconsistente [10].

Otro trabajo importante fue el de Gray y Giorgini en 1975 [14]. Este trabajo tomó un rumbo distinto a la idea perturbativa de los trabajos anteriores. Como punto de partida se considera que $\zeta = 0$ y se reescribe el balance de energía en función de los coeficientes β y C_p . La propuesta de Gray y Giorgini consiste en aproximar ρ , μ , λ , C_p y β a primer orden en serie de Taylor alrededor de un estado de referencia (θ_0, π_0) como

$$\begin{aligned}\rho &= \rho_0 [1 - \beta_0 (T - \theta_0) + \kappa (p - \pi_0)], \\ C_p &= C_{p_0} [1 + a_0 (T - \theta_0) + b_0 (p - \pi_0)], \\ \mu &= \mu_0 [1 + c_0 (T - \theta_0) + d_0 (p - \pi_0)], \\ \beta &= \beta_0 [1 + e_0 (T - \theta_0) + f_0 (p - \pi_0)], \\ \lambda &= \lambda_0 [1 + m_0 (T - \theta_0) + n_0 (p - \pi_0)],\end{aligned}\tag{1.22}$$

donde κ es el coeficiente de compresibilidad isotérmica y a, b, c, d, e, f, m y n son coeficientes asociados a la expansión de Taylor relacionados a las propiedades del fluido. El subíndice 0 en estas expansiones denota que el coeficiente corresponde al estado de referencia.

Las expansiones mostradas en (1.22) se sustituyen en las ecuaciones de Navier-Stokes y se adimensionalizan las ecuaciones resultantes. De esta adimensionalización surgen 13 parámetros, entre ellos Ra y Pr . Como se busca que μ, C_p, β y λ sean constantes los coeficientes $a_0, b_0, c_0, d_0, e_0, f_0, m_0$ y n_0 deberán ser despreciables, esto implica la “pequeñez” de 10 de los parámetros adimensionales. Con estas consideraciones se llega al siguiente sistema de ecuaciones

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0,$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla(p - p_s) + (T - T_s)\hat{\mathbf{e}}_z + \left(\frac{Pr}{Ra}\right)^{\frac{1}{2}} \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (1.23)$$

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{1}{(RaPr)^{\frac{1}{2}}} \nabla^2 T - \epsilon_{11} \left(\frac{\theta_0}{\Delta T}\right) \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z + \epsilon_{11} \left(\frac{Pr}{Ra}\right)^{\frac{1}{2}} (\mathbf{d} : \mathbf{e}),$$

donde p_s y T_s son los campos de presión y temperatura para un estado hidrostático solución a las ecuaciones de Navier-Stokes y ϵ_{11} es el undécimo parámetro adimensional dado por

$$\epsilon_{11} \equiv \frac{\beta_0 g L}{C_{p_0}}. \quad (1.24)$$

Grey y Giorgini se refieren a estas ecuaciones como las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq extendidas. Para recuperar la forma completa de la aproximación es necesario eliminar los últimos dos términos de la ecuación de energía por lo que simplemente se asume que estos términos deben ser pequeños para de esta forma recuperar las ecuaciones deseadas. Esta última suposición es *ad hoc*, ya que únicamente se realiza para llegar a las ecuaciones buscadas, pero a partir de ella Grey y Giorgini muestran la zona de validez de la aproximación para el agua y el aire [10].

Los trabajos mencionados hasta el momento son algunos de los más representativos en la derivación del sistema de ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq. Cada una de las derivaciones mencionadas tiene sus propios problemas y no son congruentes en las condiciones bajo las cuales un fluido Newtoniano satisfaría la aproximación [10, 12].

A continuación se discuten dos trabajos recientes que parecen tener congruencia entre ellos sobre las condiciones bajo las cuales la aproximación de Oberbeck-Boussinesq se satisface.

El primero de ellos es la propuesta realizada por Rajagopal *et al.* en 1996 [10]. En esta derivación en lugar de considerar $\zeta = 0$ simplemente se trabaja con la presión mecánica, evitando introducir ζ en lo absoluto. Hasta ahora una parte importante en todas las derivaciones mostradas ha sido la propuesta de la ecuación de estado para ρ , que en todos los casos se ha asumido lineal. En el trabajo de Rajagopal *et al.* no se define directamente la ecuación de estado sino que se imponen condiciones sobre la forma en la que el fluido se comprime, buscando un fluido que sea térmicamente compresible pero mecánicamente incompresible. Para poder hablar de los cambios en el volumen del fluido se introduce el gradiente de deformación \mathbf{F} dado por

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}, \quad (1.25)$$

donde \mathbf{x} corresponde a la posición de un elemento de fluido al tiempo t y \mathbf{X} corresponde a la nueva posición de este mismo elemento de fluido a un tiempo $t + \Delta t$. La relación entre el gradiente de deformación y el campo de velocidad esta dada por [15][pág.122]

$$\frac{D \det \mathbf{F}}{Dt} = (\nabla \cdot \mathbf{v}) \det \mathbf{F}. \quad (1.26)$$

El gradiente de deformación mide los cambios en el volumen de un elemento de fluido [15][págs.83-87]. Por esto, si \mathbf{F} depende exclusivamente de la temperatura, se tendrá un fluido que se comprima únicamente de forma térmica. Esta condición permite desacoplar la ecuación de continuidad (1.10) en dos ecuaciones, una para ρ y una para \mathbf{v} .

Las ecuaciones obtenidas al desacoplar la ecuación de continuidad junto con la ecuación de balance momento forman un sistema de ecuaciones donde aparece únicamente la presión mecánica. Sin embargo, la ecuación de energía no puede escribirse directamente en función de p_m ya que no existe relación termodinámica directa entre u_{int} y p_m . Para encontrar una relación entre la energía interna y la presión mecánica se utiliza la desigualdad de Clausius-Duhem. Las ecuaciones adimensionales resultantes en función de la presión mecánica son

$$\rho = \exp(-F^2 T), \quad (1.27)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = F^2 \frac{DT}{Dt}, \quad (1.28)$$

$$F^2 \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \frac{F^2}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + F^2 \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (1.29)$$

$$\begin{aligned} \left[\rho c_p - F^4 \left(T + \frac{\theta_0}{\Delta T} \right) \left(p + \frac{\pi_0}{\rho_0 g L} \right) \right] \frac{DT}{Dt} - F^2 \left(T + \frac{\theta_0}{\Delta T} \right) \frac{Dp}{Dt} = \\ = \lambda \nabla^2 T + 2F^2 \mu \left[\mathbf{e} : \mathbf{e} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right] \end{aligned} \quad (1.30)$$

Las ecuaciones adimensionalizadas dependen únicamente de un parámetro adimensional F , conocido como el número de Froude, definido como

$$F = \frac{U}{\sqrt{gL}}. \quad (1.31)$$

La densidad ρ_0 es la densidad medida en un estado de referencia (θ_0, π_0) y la velocidad característica U utilizada es

$$U = \sqrt{gL\beta\Delta T}. \quad (1.32)$$

Rajagopal *et al.* toman el camino perturbativo de algunos de los trabajos anteriores; por lo que en este punto proponen un parámetro pequeño ϵ respecto al cual perturbar, dado por el “segundo” número de Froude (Fr^2).

$$\epsilon \equiv F^2 = \beta \Delta T \ll 1. \quad (1.33)$$

Así mismo proponen que los campos \mathbf{v} , T y p se puedan escribir como una expansión en ϵ .

$$\mathbf{v} = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n \mathbf{v}_n, \quad T = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n T_n, \quad p = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n p_n \quad (1.34)$$

Después de sustituir las expansiones en las ecuaciones adimensionalizadas se conservan términos de hasta orden $\mathcal{O}(\epsilon)$. Al igualar términos del mismo orden se obtienen, después de re-dimensionalizar, las siguientes ecuaciones para los primeros dos ordenes

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta (T - \theta_0)], \quad (1.35)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_0 = 0, \quad (1.36)$$

$$-\nabla p_0 + \rho_0 \mathbf{g} = \mathbf{0}, \quad (1.37)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla \mathbf{v}_0 = -\frac{1}{\rho_0} \nabla (F^2 p_1) + \nu \nabla^2 \mathbf{v}_0 - \beta (T_0 - \theta_0) \mathbf{g}, \quad (1.38)$$

$$\frac{\partial T_0}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla T_0 = \alpha \nabla^2 T_0. \quad (1.39)$$

Las ecuaciones (1.36), (1.38) y (1.39) corresponden a las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq para los campos \mathbf{v}_0 , T_0 y $F^2 p_1$. Por lo que si un fluido únicamente se comprime mediante cambios de temperatura y su segundo número de Froude asociado es suficientemente pequeño, entonces los campos de velocidad y de temperatura satisfacen las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq. La presión tendrá que ser aproximada como la suma de dos funciones. Una de estas presiones (p_0) está relacionada a la fuerza de cuerpo mientras que $F^2 p_1$ estará relacionada a la expansión térmica del fluido.

El último trabajo por discutir es el realizado por Genieys y Massot en 2001[12]. En este trabajo se considera $\zeta = 0$ y a los coeficientes μ y λ como constantes. Así mismo se propone una ecuación de estado para ρ linealizada alrededor de un estado isotérmico (θ_0, p_{SI}). Para justificar esta linealización se introducen los números adimensionales Υ^P y Υ^T , definidos por

$$\Upsilon^P(p, T) = \frac{\gamma(p, T)gL}{c^2(p, T)}, \quad (1.40)$$

$$\Upsilon^T(p, T) = \alpha(p, T)\Delta T, \quad (1.41)$$

donde el índice adiabático γ y la velocidad del sonido c se definen como

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad y \quad c = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s}. \quad (1.42)$$

Genieys y Massot demuestran que la linealización será válida si $\Upsilon^P(\pi_0, \theta_0) \equiv \Upsilon_0^P$ y $\Upsilon^T(\pi_0, \theta_0) \equiv \Upsilon_0^T$ son pequeños, donde π_0 es la presión evaluada sobre alguna de las fronteras del problema en cuestión. La ecuación de estado linealizada en función de estos números adimensionales está dada por

$$\rho = \rho_{SI} + \Upsilon_0^T (\Upsilon_0^P p - \beta \theta_0 T), \quad (1.43)$$

donde $\rho_{SI} \equiv \rho(\theta_0, p_{SI})$ es la densidad del fluido en el estado isotérmico de referencia.

Al sustituir la ecuación de estado (1.43) en las ecuaciones de Navier-Stokes y conservar únicamente términos de orden $\mathcal{O}(1)$, $\mathcal{O}(\Upsilon_0^T)$ y $\mathcal{O}(\Upsilon_0^P)$, las ecuaciones resultantes son

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1.44)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \frac{Pr}{P_e} \nabla^2 \mathbf{v} + \beta \theta_0 T \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (1.45)$$

$$\rho \frac{DT}{Dt} = \frac{1}{P_e} \nabla^2 T - \frac{\Upsilon_0^P}{\Upsilon_0^T} \frac{\Upsilon^T}{\Upsilon_0^T} \frac{1}{\beta \theta_0} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (1.46)$$

donde el número de Péclet P_e se define como

$$P_e = \frac{LU}{\alpha}. \quad (1.47)$$

La adimensionalización utilizada por Geynies y Massot para obtener las ecuaciones anteriores no es la misma que la utilizada por Rajagopal *et al.*, sin embargo se utilizó la misma velocidad característica U definida en (1.32) en ambos casos.

Las ecuaciones (1.44), (1.45) y (1.46) son las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq salvo un término extra en la ecuación para la temperatura. En principio no es posible remover este término ya que no se conoce la relación entre Υ_0^T y Υ_0^P . Es posible referirse a estas ecuaciones como las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq débilmente compresibles y para obtener la aproximación mecánicamente incompresible basta con pedir que $\Upsilon_0^P \ll \Upsilon_0^T$.

Las condiciones obtenidas por Geynies y Massot para recuperar el modelo de Oberbeck-Boussinesq se pueden resumir en la siguiente desigualdad

$$\Upsilon_0^P \ll \Upsilon_0^T \ll 1. \quad (1.48)$$

Es posible reescribir esta desigualdad en función de parámetros adimensionales más conocidos, como

$$\gamma \frac{M_a^2}{F^2} \ll F^2 \ll 1, \quad (1.49)$$

donde $\gamma \equiv \gamma(\pi_0, \theta_0)$ y el número de Mach M_a se define como

$$M_a = \frac{U}{c}. \quad (1.50)$$

Se han mostrado ya dos derivaciones recientes para obtener la aproximación de Oberbeck-Boussinesq. En ambas derivaciones se han obtenido condiciones expresadas a partir de números adimensionales, sin embargo la derivación propuesta por Geyniet y Massot tiene un carácter más general que la propuesta por Rajagopal *et al.* Esto se puede ver de las ecuaciones débilmente compresibles que sirven como una primera extensión al modelo tradicional. Es destacable que las dos derivaciones coincidan en que el segundo número de Froude debe ser pequeño pero en la derivación de Geyniet y Massot se obtienen dos condiciones extra, resumidas en (1.49). Estas condiciones extra corresponden a las condiciones suficientes para despreciar la compresibilidad mecánica del fluido.

Para finalizar esta sección se muestran rescritas las condiciones obtenidas en los trabajos [10] y [12] en función de los parámetros termodinámicos del fluido y los parámetros geométricos del sistema.

$$\beta \Delta T \ll 1, \quad (1.51)$$

$$\frac{\gamma g L}{c^2} \ll 1, \quad (1.52)$$

$$\frac{\gamma g L}{c^2} \ll \beta \Delta T. \quad (1.53)$$

Dado un fluido específico con el cual se busque trabajar será posible, a partir de las condiciones anteriores, encontrar los regímenes de temperatura y de dimensiones del sistema en los que la aproximación sea válida.

1.3. Adimensionalización

Para obtener los parámetros que caracterizan las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq es necesario escribirlas en forma adimensional. Para esto se utilizará la adimensionalización

$$\begin{aligned} \mathbf{r}^* &= \frac{\mathbf{r}}{L}, & \mathbf{v}^* &= \frac{L}{\alpha} \mathbf{v}, \\ t^* &= \frac{\alpha}{L^2} t, & p^* &= \frac{L^2}{\rho_0 \alpha^2} p, & T^* &= \frac{T - \theta_0}{\Delta T}. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Aunque la velocidad característica utilizada en esta adimensionalización no corresponde a la utilizada en las derivaciones mostradas, las condiciones (1.51), (1.52) y (1.53) serán independientes de la velocidad elegida [12]. Hay que mencionar que la temperatura no solo se adimensionaliza sino que se reescala al desplazarla por una temperatura de referencia θ_0 .

Las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq correspondientes a esta adimensionalización son

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1.55)$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + Pr \nabla^2 \mathbf{v} + Pr Ra T \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (1.56)$$

$$\frac{DT}{Dt} = \nabla^2 T, \quad (1.57)$$

donde se omiten los asteriscos por simplicidad y Pr y Ra están definidos por

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad y \quad Ra = \frac{g\beta\Delta TL^3}{\nu\alpha}. \quad (1.58)$$

De las ecuaciones adimensionales es posible ver que las ecuaciones de movimiento corresponden a un proceso de difusión activa y que los números que caracterizaran la dinámica de la aproximación serán el número de Prandtl Pr y el número de Rayleigh Ra .

Capítulo 2

El método de la ecuación de Boltzmann en Redes

En el capítulo anterior se estableció el modelo bajo el cual se busca estudiar el problema de convección para un fluido contenido entre dos esferas concéntricas a diferentes temperaturas. Aunque lo ideal sería estudiar el problema analíticamente esto en general no es posible; únicamente existen soluciones analíticas a números de Ra bajos [16]. Debido a esto se requiere utilizar un método computacional para poder visualizar los campos de velocidad y temperatura así como para caracterizar las inestabilidades presentadas en el sistema para un rango amplio de números de Ra .

El método a utilizarse pertenece a una familia de métodos conocidos como métodos de Boltzmann en redes ó mejor conocidos por su nombre en inglés “Lattice Boltzmann Methods” (LBM). Los LBM no son métodos convencionales ya que en lugar de resolver directamente las ecuaciones (1.55), (1.56) y (1.57), resuelven la ecuación discreta de Boltzmann en la aproximación BGK.

La ecuación discreta de Boltzmann representa un modelo microscópico que se puede relacionar con las ecuaciones de Navier-Stokes. Es posible extender el método de Boltzmann en redes para resolver ecuaciones semejantes que se relacionen a las ecuaciones de Oberbeck-Bossinesq. A continuación se presentará el modelo cinético del cual se parte para posteriormente presentar el método específico a utilizar, así como su justificación.

2.1. Ecuación de Boltzmann y modelo BGK

La ecuación de transporte de Boltzmann describe el comportamiento de un sistema de partículas a través de la evolución de una función de distribución f . Esta función de distribución se encuentra definida en el espacio fase de una partícula, es decir depende de su posición \mathbf{r} y de su momento \mathbf{p} , y define la densidad de probabilidad para el número de partículas por unidad de volumen en el espacio fase. La forma explícita de la ecuación de Boltzmann, escrita en función de la velocidad de la partícula $\boldsymbol{\xi}$ es

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{1}{m} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}}, \quad (2.1)$$

donde $\nabla_{\mathbf{r}}$ y $\nabla_{\boldsymbol{\xi}}$ son los gradientes respecto a \mathbf{r} y $\boldsymbol{\xi}$ respectivamente, \mathbf{F} es una fuerza externa y se asume que todas las partículas involucradas tienen masa m . El término del lado derecho de la ecuación (2.1) corresponde a la variación de f debido a las colisiones entre partículas [17][pág.84].

Por simplicidad se considerará que la fuerza de cuerpo es cero. También se asumirá que la función de distribución f no se encuentra normalizada sino que al integrarse en el espacio de configuración y velocidad da la masa en el sistema, por lo que ahora tomará el papel de función de distribución de masa en este espacio. Bajo esta reinterpretación se pueden definir las siguientes densidades macroscópicas

$$\rho = \int f d^3 \xi, \quad (2.2)$$

$$\rho \mathbf{v} = \int \boldsymbol{\xi} f d^3 \xi, \quad (2.3)$$

$$\rho u_{\text{int}} = \int \frac{1}{2} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2 f d^3 \xi, \quad (2.4)$$

donde ρ es la densidad de masa, $\rho \mathbf{v}$ la densidad de momento y ρu_{int} la densidad de energía interna [17][pág.93].

Es posible relacionar la densidad de energía interna con la temperatura T a través del teorema de equipartición por medio de

$$\rho u_{\text{int}} = \frac{3}{2} n k_B T, \quad (2.5)$$

donde n es la densidad de número y k_B la constante de Boltzmann.

En la ecuación de Boltzmann se considera que las colisiones entre partículas son binarias y tienden a llevar al sistema a un estado de equilibrio local. Este estado está caracterizado por la función

$$f_{\text{loc}} = \rho \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{m}{2k_B T} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2 \right), \quad (2.6)$$

esta distribución lleva el nombre de distribución de Maxwell-Boltzmann y es solución estacionaria a la ecuación (2.1) para $t \rightarrow \infty$. Es importante mencionar que f_{loc} también satisface las ecuaciones (2.2), (2.3) y (2.4) [17][pág.94].

Al considerar únicamente colisiones binarias el operador de colisión toma la forma de un operador integral [18][pág.5]. Por lo que, para poder obtener un esquema numérico se aproxima este operador integral por

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = -\frac{f - f_{\text{loc}}}{\tau}, \quad (2.7)$$

esta aproximación lleva el nombre de aproximación BGK [17][pág.95]. En ella el término de colisión queda en función de un tiempo de relajación τ , entendido como el inverso del tiempo promedio entre colisiones. Bajo estas consideraciones la ecuación (2.1) se reescribe como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = -\frac{f - f_{\text{loc}}}{\tau}, \quad (2.8)$$

esta ecuación lleva el nombre de ecuación BGK de Boltzmann y es la que típicamente LBM aproxima [19].

2.2. Discretización

A continuación se muestra una forma de estudiar la evolución de la distribución f bajo la aproximación BGK, para obtener un esquema que se pueda implementar numéricamente (LBM). Para comenzar se observa que el lado izquierdo de la ecuación (2.8) representa el límite

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{f(\mathbf{r} + \Delta t \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\Delta t} \right]. \quad (2.9)$$

Al considerar que el paso de tiempo Δt es lo suficientemente pequeño, sin ser cero, es posible aproximar el límite (2.9) por la diferencia. De este modo se obtiene la aproximación de la ecuación (2.8) a primer orden en Δt , dada por

$$f(\mathbf{r} + \Delta t \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) - f_{\text{loc}}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)]. \quad (2.10)$$

Si se conoce f_{loc} a todo tiempo es posible seguir la evolución de f a partir de la ecuación (2.10). Hay que notar que la dependencia temporal de f_{loc} es implícita a través de las variables macroscópicas ρ , T y \mathbf{v} . Por ello conocer las variables macroscópicas a todo tiempo es equivalente a conocer la función de equilibrio. Debido a esto para seguir la evolución de f a cada paso de tiempo se necesita un algoritmo con la siguiente estructura

1. Partiendo de condiciones iniciales a un tiempo t_0 para los campos macroscópicos y para la función de distribución, se calcula la función de distribución local.
2. A partir de f_{loc} y la ecuación (2.10) se calcula la función f a un tiempo $t_0 + \Delta t$.
3. Mediante la distribución f al tiempo $t_0 + \Delta t$ se calculan las variables macroscópicas utilizando las ecuaciones (2.2), (2.3) y (2.4).
4. Por último, se calcula la nueva función de equilibrio y se repite el procedimiento.

Para realizar el paso 3 se utiliza el hecho de que tanto f como f_{loc} satisfacen las ecuaciones (2.2), (2.3) y (2.4). Para esto se simplifica la función de distribución local en el límite incompresible ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$), pidiendo que el sistema tenga un número de Mach (M_a) pequeño [19]. Este número está definido como

$$M_a = \frac{\mathbf{v}}{c}, \quad (2.11)$$

donde c es la velocidad del sonido en el sistema. Se busca escribir f_{loc} como una expansión en el número de Mach para poder despreciar términos de orden superior.

Pero calcular c se utiliza la ecuación (1.42) para un gas ideal, cuya ecuación de estado está dada por

$$\rho = \frac{p}{RT}, \quad (2.12)$$

donde R es la constante de gas específica definida como

$$R = \frac{k_B}{m}. \quad (2.13)$$

La ecuación de estado definida en (2.12) da como resultado una velocidad del sonido de

$$c = \sqrt{RT}. \quad (2.14)$$

Con la velocidad del sonido definida en (2.14), la ecuación de distribución local a orden $\mathcal{O}(M_a^2)$ está dada por [19]

$$f_{\text{loc}} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \left[1 + \frac{\xi \cdot \mathbf{v}}{RT} + \frac{(\xi \cdot \mathbf{v})^2}{2(RT)^2} - \frac{v^2}{2RT}\right]. \quad (2.15)$$

Con la distribución de equilibrio local simplificada, mostrada en (2.15), las integrales (2.2), (2.3) y (2.4) para f_{loc} se vuelven integrales análogas a una integral unidimensional de la forma

$$\int \exp(-x^2) \Psi(x) dx, \quad (2.16)$$

donde $\Psi(x)$ es un polinomio en x [19].

Para poder calcular integrales de este tipo se utiliza una cuadratura de Gauss-Hermite [20]. Dicha cuadratura está dada por

$$\int \exp(-x^2) \Psi(x) dx = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k), \quad (2.17)$$

donde las x_k , llamadas abscisas, son los ceros del polinomio de Hermite de grado n (H_n), definido como

$$H_n = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2), \quad (2.18)$$

y los pesos w_k se definen como

$$w_k = 2^{n+1} n! \frac{\sqrt{\pi}}{[H_{n+1}(x_k)]^2}. \quad (2.19)$$

Las abscisas y pesos se eligen de tal forma que la cuadratura sea exacta para polinomios $\Psi(x)$ de grado $2n-1$ [20].

Con un procedimiento similar al mostrado se pueden aproximar los momentos macroscópicos ρ , \mathbf{v} y T considerándose únicamente un conjunto discreto de velocidades (las abscisas de la cuadratura). Estas velocidades discretas corresponden a una discretización del espacio de momento, dejando el problema como uno a resolverse únicamente en el espacio de configuración.

Para discretizar el espacio de momento en sistemas de más de una dimensión se crean los llamados esquemas DdQq. Estos esquemas buscan resolver las integrales (2.2), (2.3) y (2.4) para la distribución (2.15) utilizando cuadraturas análogas a la ya mencionada. La letra d corresponde a la dimensión del sistema y la letra q representa el número de velocidades discretas y corresponde al número de coordinación del método [21].

A pesar de que todos los esquemas DdQq resuelven exactamente las integrales, el número de velocidades es importante. Esta importancia radica en la relación entre número de velocidades y la simetría esférica del sistema, dicho de otra manera al aumentar el número de velocidades la simetría rotacional aumenta. Esta simetría es necesaria, ya que se busca que los momentos macroscópicos satisfagan las ecuaciones de Navier-Stokes las cuales tienen una simetría rotacional implícita [21]. Sin embargo, como se busca resolver el problema numéricamente, utilizar demasiadas velocidades requeriría de una gran capacidad de cómputo que puede no sea accesible. La elección del esquema a utilizar se vuelve entonces una decisión entre eficiencia computacional y simetría rotacional. Con esto en mente se eligió el esquema D3Q19 ya que cuenta con el balance adecuado de estas características [22].

Para obtener el esquema D3Q19 hay que notar que las integrales (2.2), (2.3) y (2.4), utilizando f_{loc} , se pueden escribir como suma de integrales de la forma

$$\int \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \Psi(\xi) d^3\xi, \quad (2.20)$$

donde $\Psi(\xi)$ es un polinomio de las componentes de la velocidad. Dicho polinomio puede escribirse como

$$\Psi(\xi) = \xi_x^m \xi_y^n \xi_z^p, \quad (2.21)$$

con ξ_x , ξ_y y ξ_z las componentes cartesianas de la velocidad ξ y en donde $0 \leq m + n + p \leq 3$. Esto da lugar a integrales de la forma

$$I_{m,n,p} \equiv \int \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \xi_x^m \xi_y^n \xi_z^p d^3\xi = (2RT)^{\frac{m+n+p+3}{2}} \int \exp(-\zeta^2) \zeta_x^m \zeta_y^n \zeta_z^p d^3\zeta, \quad (2.22)$$

con el cambio de variable

$$\zeta = \frac{\xi}{\sqrt{2RT}}. \quad (2.23)$$

Haciendo uso de la definición (2.22) y de la distribución de equilibrio local (2.15) el cálculo de cualquiera de los momentos macroscópicos se puede escribir como

$$\begin{aligned}
\int \Psi(\boldsymbol{\xi}) f_{\text{loc}} d^3 \xi &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} \left[\left(1 - \frac{v^2}{2RT}\right) I_{m,n,p} \right. \\
&\quad + \frac{1}{RT} (v_x I_{m+1,n,p} + v_y I_{m,n+1,p} + v_z I_{m,n,p+1}) \\
&\quad + \frac{1}{2(RT)^2} (v_x^2 I_{m+2,n,p} + v_y^2 I_{m,n+2,p} + v_z^2 I_{m,n,p+2} \\
&\quad \left. + 2v_x v_y I_{m+1,n+1,p} + 2v_x v_z I_{m+1,n,p+1} + 2v_y v_z I_{m,n+1,p+1}) \right], \tag{2.24}
\end{aligned}$$

donde $\Psi(\boldsymbol{\xi})$ definirá el momento a calcularse.

Para proceder se utiliza una cuadratura análoga a (2.17) para las integrales $I_{m,n,p}$ [19]. Dicha cuadratura está dada por

$$I_{m,n,p} = (2RT)^{\frac{m+n+p+3}{2}} \sum_{(i,j,k) \in J} w_{ijk} \zeta_i^m \zeta_j^n \zeta_k^p, \tag{2.25}$$

donde se utilizarán los ceros del polinomio H_3 como abscisas, dando lugar a

$$\zeta_1 = -\sqrt{\frac{3}{2}}, \quad \zeta_2 = 0, \quad \zeta_3 = \sqrt{\frac{3}{2}}. \tag{2.26}$$

La suma en los índices únicamente se realizará para las combinaciones pertenecientes a J , definido por

$$\begin{aligned}
J = \{ &(2, 2, 2); (3, 2, 2); (2, 3, 2); (1, 2, 2); (2, 1, 2); (2, 2, 3); (2, 2, 1); \\
&(3, 3, 2); (1, 3, 2); (1, 1, 2); (3, 1, 2); (3, 2, 3); (1, 2, 3); \\
&(1, 2, 1); (3, 2, 1); (2, 3, 3); (2, 1, 3); (2, 1, 1); (2, 3, 1) \} \tag{2.27}
\end{aligned}$$

mientras que los pesos estarán dados por

$$w_{ijk} = \pi^{\frac{3}{2}} \begin{cases} \frac{1}{3} & \text{para } (i, j, k) = (2, 2, 2) \\ \frac{1}{18} & \text{para } (i, j, k) \in \{(1, 2, 2); (2, 1, 2); (2, 2, 1); \\ & (2, 2, 3); (2, 3, 2); (3, 2, 2)\} \\ \frac{1}{36} & \text{otros} \end{cases} \quad (2.28)$$

Esta cuadratura permite escribir las integrales (2.24) como

$$\int \Psi(\boldsymbol{\xi}) f_{\text{loc}} d^3 \xi = \sum_{\alpha=0}^{18} \rho w_{\alpha} \xi_i^m \xi_j^n \xi_k^p \left\{ 1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}_{\alpha}}{RT} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}_{\alpha}}{RT} \right)^2 - \frac{v^2}{2RT} \right\}, \quad (2.29)$$

donde α enumera a los elementos del conjunto J , de acuerdo al orden mostrado en (2.27), y

$$\xi_i = \sqrt{2RT} \zeta_i \quad \text{y} \quad w_{\alpha} = \frac{w_{ijk}}{\pi^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.30)$$

Las 19 velocidades $\boldsymbol{\xi}_{\alpha} = (\xi_i, \xi_j, \xi_k)$ están dadas por

$$\boldsymbol{\xi}_{\alpha} = c_l \mathbf{c}_{\alpha}, \quad (2.31)$$

donde a c_l se le denomina la velocidad del lattice y está dada por

$$c_l = \sqrt{3RT}. \quad (2.32)$$

Los vectores \mathbf{c}_{α} están dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_0 &= (0, 0, 0), & \mathbf{c}_1 &= (1, 0, 0), & \mathbf{c}_2 &= (0, 1, 0) \\ \mathbf{c}_3 &= (-1, 0, 0), & \mathbf{c}_4 &= (0, -1, 0), & \mathbf{c}_5 &= (0, 0, -1) \\ \mathbf{c}_6 &= (0, 0, 1), & \mathbf{c}_7 &= (1, 1, 0), & \mathbf{c}_8 &= (1, -1, 0) \\ \mathbf{c}_9 &= (-1, 1, 0), & \mathbf{c}_{10} &= (-1, -1, 0), & \mathbf{c}_{11} &= (1, 0, 1) \\ \mathbf{c}_{12} &= (1, 0, -1), & \mathbf{c}_{13} &= (-1, 0, -1), & \mathbf{c}_{14} &= (0, 1, 1) \\ \mathbf{c}_{15} &= (0, 1, -1), & \mathbf{c}_{16} &= (0, -1, -1), & \mathbf{c}_{17} &= (0, -1, 1) \\ & & & & \mathbf{c}_{18} &= (0, -1, -1) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Los pesos para las velocidades definidas en (2.31) son

$$w_\alpha = \begin{cases} \frac{1}{3} & \alpha = 0 \\ \frac{1}{18} & \alpha = 1 \text{ a } 6 \\ \frac{1}{36} & \alpha = 7 \text{ a } 18 \end{cases} \quad (2.34)$$

En la figura (2.1) se muestra esquemáticamente la discretización dada por las velocidades definidas en (2.31).

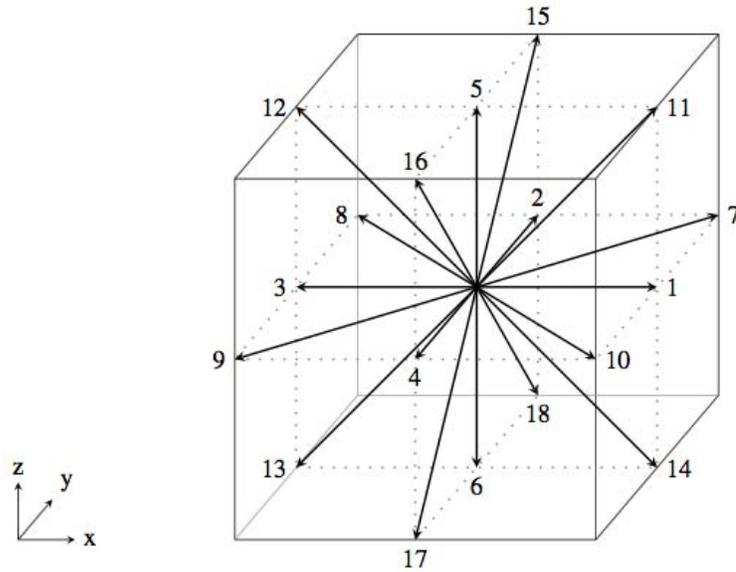


Figura 2.1: Esquema de velocidades discretas D3Q19. Se debe notar que la selección de velocidades es congruente con una malla cúbica espacial.

La integral (2.29) se puede reescribir, utilizando (2.21), como

$$\int \Psi(\boldsymbol{\xi}) f_{\text{loc}} d^3 \boldsymbol{\xi} = \sum_{\alpha=0}^{18} \Psi(\boldsymbol{\xi}_\alpha) f_\alpha^{\text{loc}}(\mathbf{r}, t), \quad (2.35)$$

donde f_α^{loc} se define como

$$f_\alpha^{\text{loc}} \equiv \rho w_\alpha \left[1 + \frac{3(\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{v})}{c_l^2} + \frac{9(\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{v})^2}{2c_l^4} - \frac{3v^2}{2c_l^2} \right], \quad (2.36)$$

y se relaciona con la función de equilibrio f_{loc} de acuerdo a

$$f_\alpha^{\text{loc}}(\mathbf{r}, t) = (2\pi RT)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\xi_\alpha^2}{2RT}\right) \omega_\alpha f_{\text{loc}}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}_\alpha, t). \quad (2.37)$$

Como tanto f y f_{loc} satisfacen las integrales (2.35) es posible reescribir estas integrales en función de una f_α análoga a f_α^{loc} como

$$\int \Psi(\boldsymbol{\xi}) f d^3\xi = \sum_{\alpha=0}^{18} \Psi(\boldsymbol{\xi}_\alpha) f_\alpha(\mathbf{r}, t), \quad (2.38)$$

siempre que f_α se relacione a f mediante

$$f_\alpha(\mathbf{r}, t) = (2\pi RT)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\xi_\alpha^2}{2RT}\right) \omega_\alpha f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}_\alpha, t). \quad (2.39)$$

Si f_α tiene la forma mostrada en (2.39), de acuerdo a la ecuación (2.8), ésta evolucionará como

$$f_\alpha(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{r}, t) - f_\alpha^{\text{loc}}(\mathbf{r}, t)], \quad (2.40)$$

$$\alpha = 0, \dots, 18$$

esta ecuación lleva el nombre de ecuación LBGK (“Lattice Boltzmann BGK”) y es la versión discretizada en el espacio de momento de la ecuación BGK.

La ecuación LBGK da la evolución de las funciones de distribución discretas f_α y, al igual que la ecuación BGK, será posible resolverla en cada paso de tiempo si se cuenta con f_α^{loc} .

Por último hay que notar que con la ecuación (2.38) es posible calcular ρ y \mathbf{v} a partir de f_α por medio de

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha=0}^{18} f_\alpha(\mathbf{r}, t), \quad (2.41)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha=0}^{18} \xi_\alpha f_\alpha(\mathbf{r}, t). \quad (2.42)$$

El campo de temperatura se calculará de una forma diferente ya que, como se verá en la siguiente sección, el procedimiento descrito no permite ajustar independientemente la difusividad térmica y la viscosidad cinemática.

En resumen, el algoritmo para implementar el método LBM tiene la siguiente estructura

1. Partiendo de condiciones iniciales a tiempo t_0 para los campos macroscópicos y para f_α , se calcula la función f_α^{loc} .
2. A partir de f_α^{loc} y la ecuación (2.40) se calcula función f_α a un tiempo $t_0 + \Delta t$.
3. Mediante la distribución f_α al tiempo $t_0 + \Delta t$ se calculan las variables macroscópicas utilizando (2.41) y (2.42).
4. Por último, se calcula la nueva función de equilibrio f_α^{loc} y se repite el procedimiento.

Aunque este algoritmo originalmente se pensó para seguir la evolución de f_α su propósito real será el de calcular los campos macroscópicos para todo paso del tiempo. En la siguiente sección se muestra como se relacionan ρ y \mathbf{v} con los campos de densidad y velocidad de las ecuaciones de Navier-Stokes.

2.3. Expansión de Chapman-Enskog

La relación entre las ecuaciones LBGK y las ecuaciones de Navier-Stokes puede obtenerse utilizando el procedimiento conocido como expansión de Chapman-Enskog. Este procedimiento consiste en escribir f así como los operadores $\frac{\partial}{\partial t}$ y ∇ en una serie perturbativa en función un parámetro pequeño ϵ . Este parámetro se asocia al número de Knudsen, definido como

$$K_n = \frac{l}{L}, \quad (2.43)$$

donde l corresponde a la distancia media entre colisiones y L es una dimensión característica del sistema macroscópico a estudiarse. El límite cuando K_n es pequeño corresponde a medio continuo.

Las series perturbativas tienen la forma

$$f_\alpha = f_\alpha^{(0)} + \epsilon f_\alpha^{(1)} + \epsilon^2 f_\alpha^{(2)} + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial}{\partial t^{(1)}} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t^{(2)}} + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (2.45)$$

$$\nabla = \epsilon \nabla^{(1)}. \quad (2.46)$$

Este tipo de expansión es conocida como expansión multiescala, ya que cada uno de los términos correspondientes a cada orden de la expansión se le asocia una escala de tiempo diferente [18][pág. 11]. Los operadores $\nabla^{(1)}$ y $\frac{\partial}{\partial t^{(1)}}$ corresponden a una escala “rápida” mientras que $\frac{\partial}{\partial t^{(2)}}$ describe la dinámica a una escala de tiempos largos. Los operadores a diferentes escalas de tiempo son independientes entre sí.

La expansión de los operadores comienza en ϵ ya que el orden $\mathcal{O}(\epsilon^0)$ está relacionado al estado de equilibrio. La razón por la cuál el operador ∇ únicamente se expande hasta ϵ es debido a que los fenómenos de advección y difusión se pueden distinguir por sus escalas de tiempo mientras que actúan igual en las escalas espaciales [23][cap.5].

Debido a que la escala $\mathcal{O}(\epsilon^0)$ está asociada con el estado de equilibrio, se considera que

$$f_\alpha^{(0)}(\mathbf{r}, t) = f_\alpha^{loc}(\mathbf{r}, t). \quad (2.47)$$

Esto implica que $f_\alpha^{(0)}$ satisface

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^{18} f_\alpha^{(0)} \quad \text{y} \quad \rho \mathbf{v} = \sum_{\alpha=0}^{18} \boldsymbol{\xi}_\alpha f_\alpha^{(0)}, \quad (2.48)$$

lo que impone sobre $f^{(k)}$, con $k \geq 1$, las condiciones

$$\sum_{\alpha=0}^{18} f_\alpha^{(k)} = 0 \quad \text{y} \quad \sum_{\alpha=0}^{18} \boldsymbol{\xi}_\alpha f_\alpha^{(k)} = 0. \quad (2.49)$$

Para utilizar las expansiones (2.44), (2.45) y (2.46) se expande el lado izquierdo de la ecuación (2.40) en su serie de Taylor en Δt . De acuerdo a esto, la ecuación LBGK queda escrita a orden $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ como

$$\Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{v} \right) f_\alpha + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{v} \right)^2 f_\alpha = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_\alpha - f_\alpha^{loc}). \quad (2.50)$$

Al sustituir esta expresión en las expansiones (2.44), (2.45) y (2.46) y comparar términos del mismo orden en ϵ , se obtiene para orden $\mathcal{O}(\epsilon)$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t^{(1)}} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla^{(1)} \right) f_\alpha^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^{(1)}. \quad (2.51)$$

Mientras que al comparar términos de orden $\mathcal{O}(\epsilon^2)$, utilizando (2.51), se obtiene

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t^{(1)}} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \boldsymbol{\nabla}^{(1)}\right) f_\alpha^{(1)} + \frac{\partial}{\partial t^{(2)}} f_\alpha^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^{(2)}. \quad (2.52)$$

Si se multiplican las ecuaciones (2.51) y (2.52) ya sea por 1 o $\boldsymbol{\xi}_\alpha$, llamados invariantes de colisiones, y se suma sobre los valores de α ($\alpha = 0, \dots, 18$) se encuentran ecuaciones macroscópicas a través de las definiciones (2.48) [19].

De multiplicar la ecuación (2.51) por el invariante 1 y posteriormente sumar respecto a α se obtiene

$$\frac{\partial \rho}{\partial t^{(1)}} + \boldsymbol{\nabla}^{(1)} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.53)$$

Y al multiplicar la ecuación (2.51) por el invariante $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ y posteriormente sumar respecto a α se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t^{(1)}} (\rho \mathbf{v}) + \boldsymbol{\nabla}^{(1)} \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\boldsymbol{\nabla}^{(1)} p, \quad (2.54)$$

donde la presión p es la definida por la ecuación de estado (2.12), que en función de la velocidad del lattice c_l queda escrita como

$$p = \frac{c_l^2}{3} \rho. \quad (2.55)$$

Las ecuaciones (2.56) y (2.54) son las ecuaciones de Euler para un fluido inviscido.

De multiplicar la ecuación (2.52) por el invariante 1 y posteriormente sumar respecto a α se obtiene

$$\frac{\partial \rho}{\partial t^{(2)}} = 0. \quad (2.56)$$

Y al multiplicar la ecuación (2.52) por el invariante ξ_α y posteriormente sumar respecto a α se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t^{(2)}} (\rho \mathbf{v}) = \left(\frac{\tau - \frac{\Delta t}{2} c_l^2}{3} \right) \nabla^{(1)} (2\rho \mathbf{e}). \quad (2.57)$$

Si se suman las ecuaciones (2.53) y (2.56) multiplicadas por ϵ y ϵ^2 respectivamente se puede utilizar la definición de las expansiones (2.45) y (2.46) para obtener

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) + \mathcal{O}(\epsilon^3) = 0. \quad (2.58)$$

De igual manera si se suman las ecuaciones (2.54) y (2.57) multiplicadas por ϵ y ϵ^2 respectivamente se puede utilizar la definición de las expansiones (2.45) y (2.46) para llegar a

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) + \mathcal{O}(\epsilon^3) = -\nabla p + \left(\frac{\tau - \frac{\Delta t}{2} c_l^2}{3} \right) \nabla \cdot [2\rho \mathbf{e}]. \quad (2.59)$$

Las ecuaciones (2.58) y (2.59) se pueden asociar a las ecuaciones de continuidad y momento de Navier-Stokes en ausencia de fuerzas de cuerpo.

Como se busca reproducir las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq se impondrá la condición de incompresibilidad. Esta suposición junto con el truncamiento a orden $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ permite que las ecuaciones (2.58) y (2.59) se reduzcan a

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.60)$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \left(\frac{\tau - \frac{\Delta t}{2} c_l^2}{3} \right) \nabla^2 \mathbf{v}. \quad (2.61)$$

Por lo tanto el método LBM aproxima indirectamente las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles donde la viscosidad cinemática ν esta dada por

$$\nu = \frac{\tau - \frac{\Delta t}{2}}{3} c_l^2. \quad (2.62)$$

Como $\nu > 0$ se necesita que $\tau > \frac{\Delta t}{2}$.

Se esperaría que al utilizar como invariante de colisión a ξ^2 y realizar el mismo procedimiento, se podría obtener una ecuación de energía. Sin embargo al realizar dicho procedimiento se llega a una ecuación del tipo (1.18), en donde es necesario identificar a la difusividad térmica α con [24]

$$\alpha = 2 \left(\frac{\tau - \frac{\Delta t}{2}}{3} c_l^2 \right) = 2\nu. \quad (2.63)$$

Esto implica que el número de Prandtl, que compara los tiempos propios de difusión de momento y energía, será fijo y estará dado por

$$Pr = \frac{1}{2}. \quad (2.64)$$

Esto indica que debido a la simplicidad del modelo de colisión BGK es imposible ajustar independientemente la viscosidad cinemática y la difusividad térmica, ya que únicamente se cuenta con un único tiempo de relajación τ y por lo tanto no se puede imponer tiempos de difusión de momento y energía de forma independiente.

En la siguiente sección se muestra una extensión al modelo LBM en la cuál se incorpora el cálculo de la temperatura para un número de Prandtl arbitrario, así mismo se muestra la forma en la que se reintroducirá el término de fuerza de cuerpo al método.

2.4. Modelo Térmico

Existen diversas formas de extender el método de Lattice Boltzmann mostrado en la sección anterior. En la tesis se trabajó con un modelo que entra en la categoría de los llamados métodos de densidad de energía [25]. El principio básico de esta extensión consiste en introducir una nueva distribución g , análoga a f , que evoluciona de forma similar a LBGK y que está relacionada a la temperatura T de forma que, tras realizar el procedimiento de Chapman-Enskog, se obtiene la ecuación de evolución deseada (1.18).

La forma de g fue propuesta por Inamuro en 2002 [26]. La idea está inspirada en los sistemas multicomponentes. En estos sistemas coexisten diferentes sustancias y la forma en la que cada componente se difunde tiene la forma de la ecuación (1.18). Debido a esto Inamuro propone tratar a la temperatura como una componente extra del sistema.

El modelo multicomponente parte de que las distribuciones asociadas a los elementos de la mezcla satisfacen una ecuación similar a LBGK por lo que se trabajara con funciones g_α , análogas a f_α , que satisfagan la ecuación de evolución dada por

$$g_\alpha(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - g_\alpha(\mathbf{r}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau_g} [g_\alpha(\mathbf{r}, t) - g_\alpha^{\text{loc}}(\mathbf{r}, t)], \quad (2.65)$$

$$\alpha = 0, \dots, 18$$

en donde las velocidades $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ son las mismas que para el modelo LBM ya introducido, mientras que τ_g es un tiempo de relajación análogo a τ .

En la ecuación (2.65), al igual que en la ecuación LBGK, se tiene un tiempo de relajación τ_g y funciones de equilibrio local g_α^{loc} . De igual manera es posible definir los momentos relevantes para esta distribución, no obstante únicamente será de interés el primer momento, dado por

$$T = \sum_{\alpha=0}^{18} g_\alpha. \quad (2.66)$$

Al relacionar el primer momento de la distribución directamente con la temperatura es posible interpretar a g como una densidad de temperatura en el espacio fase. La razón por la cual se considera una densidad de temperatura y no una de energía, como sugeriría el nombre de la categoría a la que pertenece este método, es que se busca recuperar una ecuación para T en la aproximación de Oberbeck-Boussinesq (1.57) y no la ecuación de balance de energía de Navier-Stokes (1.12).

Se puede definir a g_α^{loc} de forma análoga a f_α^{loc} con la diferencia de que se conservan únicamente términos lineales en la velocidad, ya que los términos de mayor orden ocasionan desviaciones en la difusión de la temperatura. Estos términos no son deseados ya que se busca llegar a la ecuación de temperatura para la aproximación de Oberbeck-Boussinesq [26]. La distribución de equilibrio está dada entonces por

$$g_\alpha^{\text{loc}} = Tw_\alpha \left[1 + \frac{3(\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{v})}{c_l^2} \right], \quad (2.67)$$

la velocidad del lattice c_l pierde su carácter físico y su relación con la temperatura, ya que la temperatura relacionada a la distribución g fue introducida como una componente extra al sistema y no está relacionada a la temperatura asociada al segundo momento de la distribución f , por lo que consideraremos a c_l como un parámetro asociado a la magnitud de las velocidades discretas.

Las ecuaciones (2.65) y (2.40) se acoplan agregando un término de fuerza de cuerpo a la ecuación (2.40). Esta ecuación queda modificada como

$$f_\alpha(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{r}, t) - f_\alpha^{\text{loc}}(\mathbf{r}, t)] + 3w_\alpha g \beta c_l \Delta t (T - \theta_0) \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (2.68)$$

$$\alpha = 0, \dots, 18$$

donde θ_0 es una temperatura de referencia, g es la aceleración debida a la gravedad y β es el coeficiente de expansión térmica definido en (1.19).

Esta forma de acoplar las dos distribuciones permite que, tras una expansión multiescala, se recupere el término de fuerza de cuerpo en el modelo de Oberbeck-Boussinesq [26]. Las ecuaciones resultantes de realizar el procedimiento de Chapman-Enskog a las distribuciones g_α y f_α acopladas son

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.69)$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}p + \left(\frac{\tau - \frac{\Delta t}{2}}{3} c_l^2 \right) \nabla^2 \mathbf{v} + g\beta (T - \theta_0) \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (2.70)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \left(\frac{\tau_g - \frac{\Delta t}{2}}{3} c_l^2 \right) \nabla^2 T. \quad (2.71)$$

Y las ecuaciones (2.69), (2.70) y (2.71) corresponden a las ecuaciones (1.16), (1.17) y (1.18) del modelo de Oberbeck-Boussinesq siempre que

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right) c_l^2, \quad (2.72)$$

$$\alpha = \frac{1}{3} \left(\tau_g - \frac{\Delta t}{2} \right) c_l^2. \quad (2.73)$$

Con la introducción del nuevo tiempo de relajación τ_g la viscosidad y la difusividad térmica se vuelven independientes. Esto permite modelar sistemas con números de Prandtl arbitrarios.

Introducir la temperatura como una componente extra ocasiona que el método pierda interpretación física. Es decir, el método introducido está inspirado en la ecuación de Boltzmann pero en realidad carece de carácter físico y puede considerarse como un artificio para resolver ecuaciones de la forma deseada.

2.5. Discretización Espacial

En la sección anterior se mostró el método térmico de Lattice Boltzmann a utilizar. Hasta este punto las distribuciones f_α y g_α del método se encuentran discretizadas en el tiempo y en el espacio de velocidades. Para poder implementar el método numérico, se debe discretizar además el espacio de configuración en una red de nodos. Una vez discretizado el espacio se define a las funciones f_α y g_α en cada nodo para posteriormente seguir su evolución temporal a partir de las ecuaciones (2.68) y (2.65).

La discretización se realizó en una malla cúbica con distancia entre nodos dada por

$$\Delta x = \frac{D}{N}, \quad (2.74)$$

donde D será la longitud máxima del sistema y N será el número de nodos.

De observar las ecuaciones (2.68) y (2.65) es posible notar que durante la evolución temporal las funciones de distribución f_α y g_α definidas en \mathbf{r} transfieren información a las distribuciones definidas en $\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t$. Es posible que la posición $\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t$ no se encuentre dentro de la malla por lo que sería necesario realizar una interpolación. Para evitar esto y asegurar que las nuevas posiciones en cada paso del tiempo sean parte de la malla basta con pedir que la distancia entre nodos esté dada por

$$\Delta x = c_l \Delta t. \quad (2.75)$$

La relación (2.75) entre Δx y Δt permite que el avance $\boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t$ nos lleve a otro nodo dentro de la malla [25].

Es posible especificar las unidades espaciales y temporales de tal forma que se tenga espaciamiento espacial y temporal unitario, es decir

$$\Delta x = 1, \quad \Delta t = 1, \quad y \quad c_l = 1. \quad (2.76)$$

En caso de que se desee recuperar las unidades espaciales y temporales es necesario realizar un análisis dimensional.

2.6. Condiciones de Frontera

Como se mencionó en la sección anterior, durante la evolución temporal las funciones f_α y g_α en la posición \mathbf{r} reciben información de alguno de sus vecinos espaciales para actualizarse. Para algunas de las funciones definidas en los nodos cercanos a la frontera sólida no existirán dichos vecinos, por lo que se debe imponer alguna condición de frontera sobre estas funciones que les permita actualizar su información en cada paso de tiempo.

Entre las diversas formas que existen de imponer condiciones de frontera se utilizó las condiciones conocidas por su nombre en inglés “Half-way Bounce-back Conditions”. Estas condiciones consisten en tomar la información que las funciones en la frontera mandan a sus vecinos fuera del dominio y reflejarlas sobre ellas mismas en las direcciones carentes de vecinos. De esta manera las condiciones quedan escritas como

$$f_{-\alpha}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = f_\alpha(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{r}, t) - f_\alpha^{\text{loc}}(\mathbf{r}, t)], \quad (2.77)$$

$$g_{-\alpha}(\mathbf{r}, t + \Delta) = g_\alpha(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [g_\alpha(\mathbf{r}, t) - g_\alpha^{\text{loc}T_b}(\mathbf{r}, t)], \quad (2.78)$$

con $g_\alpha^{\text{loc}T_b}$ definido como

$$g_\alpha^{\text{loc}T_b}(\mathbf{r}, t) = T_b w_\alpha \left[1 + \frac{3(\boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{v})}{c_l^2} \right], \quad (2.79)$$

donde $f_{-\alpha}$ y $g_{-\alpha}$ representan las distribuciones asociadas a la velocidad $-\boldsymbol{\xi}_\alpha$ y T_b representa la temperatura en la frontera.

Estas condiciones pueden aplicarse de la siguiente forma: al momento de identificar que el vecino al cual se le proporcionará información está fuera del dominio, y se encuentra en la posición $\boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta t$ relativa al nodo, se pide que esta información se refleje a la distribución $f_{-\alpha}$ del nodo, que carece de vecino que le proporcione esta información para actualizarse.

Como consecuencia, la velocidad es cero en un punto intermedio entre un nodo fluido con vecino sólido y su correspondiente nodo sólido vecino. Y de igual forma, se tendrá una temperatura constante T_b en un punto intermedio entre nodos vecinos. Esto se puede ver en la sección 3.3 en donde se muestra la magnitud del campo de velocidad y el campo de temperatura como función del radio en una dirección angular específica del problema a estudiarse.

Es importante mencionar que para ajustar las condiciones en fronteras curvas existen condiciones sobre f_α y g_α más sofisticadas [27].

Capítulo 3

Simulación numérica de la convección natural entre dos esferas concéntricas

En este capítulo se muestran los resultados de la simulación numérica del problema de convección entre dos esferas concéntricas descrito en la introducción, así como la metodología para obtenerlos. Este problema se estudió bajo el contexto de la aproximación de Oberbeck-Boussinesq utilizando el método térmico de Lattice-Boltzmann expuesto en el capítulo §2.

Hay que recordar que las ecuaciones termohidrodinámicas en la aproximación de Oberbeck-Boussinesq están caracterizadas por dos parámetros adimensionales: el número de Rayleigh Ra y el número de Prandtl Pr . Estos números, en función de los parámetros del método numérico (2.72) y (2.73), se escriben como

$$Ra = \frac{36g\beta\Delta TL}{(2\tau - 1)(2\tau_g - 1)}, \quad (3.1)$$

$$Pr = \frac{2\tau - 1}{2\tau_g - 1}. \quad (3.2)$$

Las dimensiones características de temperatura y longitud utilizadas fueron

$$\begin{aligned}\Delta T &= T_i - T_e, \\ L &= 2r_i,\end{aligned}\tag{3.3}$$

donde r_i es el radio de la esfera interna, T_i y T_e son las temperaturas de las esferas interna y externa respectivamente. Los valores ΔT y L son los utilizados en el trabajo experimental con el que se compararon los resultados [2].

La discretización se realizó en una malla cúbica considerándose $\Delta x = \Delta t = c_l = 1$, elección usual en el método térmico de Lattice-Boltzmann [28]. El número de nodos por lado de la malla cúbica N se relacionó al diámetro de la esfera externa, es decir: $N \equiv 2r_e$. De acuerdo a esto L se escribe como

$$L = \eta N,\tag{3.4}$$

donde η es la razón de aspecto dada por

$$\eta = \frac{r_i}{r_e}.\tag{3.5}$$

Hay que notar que se utilizan dimensiones del lattice por lo que en el trabajo no se especificarán las unidades físicas (algo usual en LBM).

La temperatura de referencia θ_0 usada fue

$$\theta_0 = \frac{T_e + T_i}{2}.\tag{3.6}$$

El método numérico cuenta con cuatro parámetros libres a ajustarse $g\beta$, τ , τ_g y ρ_0 [28]. Estos parámetros deben ajustarse de forma que el método numérico reproduzca adecuadamente algún resultado teórico o experimental. Dado que no existen resultados teóricos para rangos amplios de Ra o η se buscó comparar con el trabajo experimental presentado en 2006 por Teertstra *et al.* [2]. La razón para ello fue que éste es el único trabajo experimental con un rango amplio de números de Ra que incluye la transición entre regímenes convectivos.

Teertstra *et al.* obtuvieron las curvas $Nu = Nu(Ra)$ utilizando aire ($Pr = 0.7$) para 4 diferentes razones de aspecto. Las mediciones para obtener estas curvas se realizaron en estados estacionarios y cubrieron 6 ordenes de magnitud en el número de Rayleigh. Para comparar con los resultados experimentales las simulaciones se realizaron bajo las mismas condiciones. Esto permitió corroborar los datos obtenidos de las simulaciones y otorga certidumbre a los campos de temperatura y velocidad obtenidos.

3.1. Ajuste de parámetros

En esta sección se muestra la forma en la que los parámetros del método numérico fueron ajustados. El ajuste se realizó en base a la curva $Nu = Nu(Ra)$ obtenida por Teertstra *et al.* para $\eta = \frac{1}{2}$ y $Pr = 0.7$, mostrada en la figura 3.1. Es decir, se realizaron simulaciones para estas condiciones y se buscó ajustar los parámetros libres de forma que la curva numérica coincidiera cualitativamente con la curva experimental.

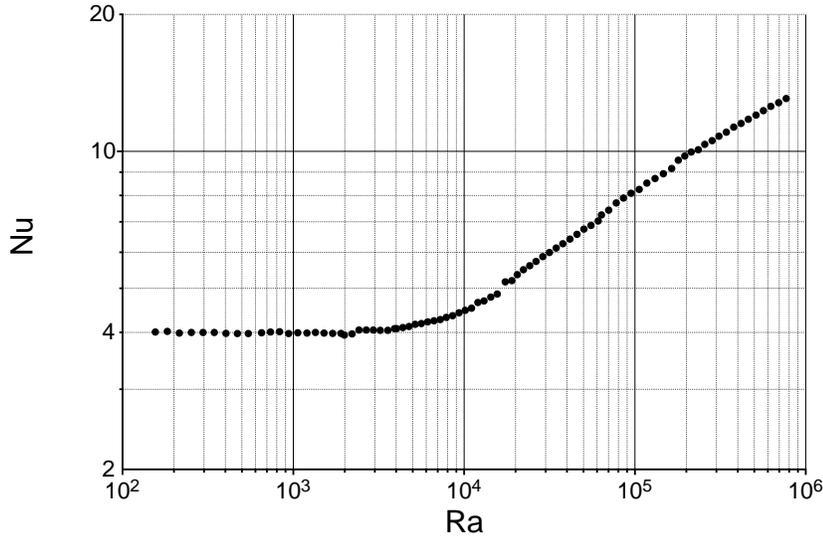


Figura 3.1: Resultados de Teertstra *et. al.* para $\eta = \frac{1}{2}$ [2].

De la curva 3.1 se pueden identificar 3 regiones, estas regiones se muestran esquemáticamente en la figura 3.2. La región I es la zona donde Nu parece ser independiente de Ra . La región II es una zona de transición entre la región I y la región III. En la región III se presenta un incremento en el número de Nusselt que a primera instancia pareciera corresponder a una ley de potencia $Nu \propto Ra^m$. El comportamiento cualitativo en estas zonas se utilizará para realizar el ajuste de los parámetros libres.

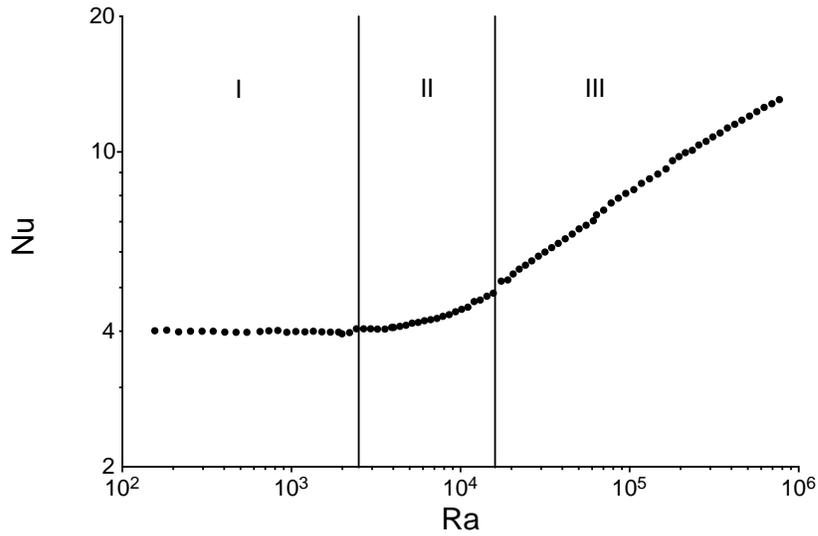


Figura 3.2: Zonas identificadas en el espacio $Ra - Nu$.

El procedimiento utilizado en las simulaciones para obtener cada punto en el espacio $Ra-Nu$ fue el siguiente

1. Se comienza con un sistema con condiciones iniciales para f_α , g_α , T , ρ y \mathbf{v} para un número de Ra específico y $Pr = 0.7$.
2. Se evoluciona al sistema de acuerdo al método térmico de Lattice-Boltzmann.
3. Se da un tiempo de relajación numérica de 7000 pasos, correspondiente a la termalización del método.

4. Posteriormente se calcula el número de Nusselt cada 200 pasos de tiempo, como se mostrará más adelante, y se calcula $\Delta Nu = |Nu(t + \Delta t) - Nu(t)|$ que sirve como medida de la estacionaridad del sistema, ya que idealmente en un estado estacionario $\Delta Nu \approx 0$.
5. Cuando $\Delta Nu < 8 \times 10^{-5}$ se considera se ha llegado a un estado estacionario para el número Ra dado y $Pr = 0.7$.

Es posible fijar la temperatura de alguna de las esferas para toda la simulación, ya que Ra está caracterizado únicamente por ΔT . Tomando esto en cuenta se fijó la temperatura externa en $T_e = 0.1$, T_i quedo determinada por $T_i = \Delta T + T_e$. A su vez ΔT esta determinada por el resto de los parámetros libres de forma que se obtenga el Ra deseado.

El procedimiento para obtener una gráfica completa en el espacio $Ra-Nu$ fue el siguiente

1. Se parte de un número de Rayleigh inicial Ra_0 y se utilizan las siguientes condiciones iniciales

$$T = \frac{T_e + T_i}{2}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \rho = \rho_0, \quad (3.7)$$

$$f_\alpha = \rho_0 w_\alpha, \quad g_\alpha = \frac{T_e + T_i}{2} w_\alpha. \quad (3.8)$$

La densidad inicial ρ_0 es uno de los parámetros a ajustar.

2. Se deja evolucionar al sistema hasta llegar a un estado estacionario, con el procedimiento ya descrito.
3. Una vez obtenido un estado estacionario se aumenta el número de Rayleigh mediante ΔT .
4. Se utilizan los resultados obtenidos para T , \mathbf{v} , ρ , f_α y g_α del estado estacionario calculado como condiciones iniciales para el nuevo número de Rayleigh.
5. Los últimos 3 pasos se repiten hasta que el número de Rayleigh alcanza un valor máximo. Usualmente se dejó evolucionar la simulación hasta que aparecieran inestabilidades numéricas, lo que determinaba el valor del Rayleigh máximo. Por lo tanto, las gráficas obtenidas corresponden al rango de estados estacionarios que el método numérico permite calcular.

3.1.1. Cálculo del número de Nusselt

Antes de proseguir con el ajuste de parámetros es importante mencionar cómo se calculó el número de Nusselt. Para comparar con los experimentos de Teertstra *et al.* el número de Nusselt debe ser calculado sobre la superficie interna. Sin embargo, al calcular sobre esta superficie, se observa que el número de puntos que se pueden utilizar dependerá de la razón de aspecto. Para evitar una diferencia en el error al calcular la integral se puede utilizar el número de Nusselt calculado en la esfera externa para posteriormente relacionarlo con el número de Nusselt de la esfera interna mediante la relación

$$Nu_i = -\frac{A_e}{A_i} Nu_e. \quad (3.9)$$

donde Nu_i es el número de Nusselt calculado en la esfera interna, Nu_e es el número de Nusselt calculado en la esfera externa, A_e es el área de la esfera externa y A_i es el área de la esfera interna. La ecuación (3.9) es válida para un estado estacionario ya que en estos la energía que entra al sistema debe ser igual a la que sale de él.

La ecuación (3.9) se puede escribir en función de la razón de aspecto η como

$$Nu_i = -\left(\frac{1}{\eta}\right)^2 Nu_e. \quad (3.10)$$

Considerando la ecuación (3.10), el número de Nusselt que se utilizó queda explícitamente escrito como

$$Nu = \left(\frac{1}{\eta}\right)^2 \frac{L}{\Delta T} \frac{1}{A_e} \int \int_{A_e} \frac{\partial T}{\partial r} dS. \quad (3.11)$$

Si el número de Nusselt se calcula de acuerdo a la ecuación (3.11) el error al momento de aproximar la integral será el mismo para todas las razones de aspecto ya que el tamaño de la esfera externa no cambia (todas las simulaciones se realizaron para la misma resolución L).

Para calcular el flujo sobre la esfera externa primero se aproximó la derivada normal de la temperatura por su diferencia finita para cada nodo localizado en la frontera, es decir

$$\frac{\partial T}{\partial r}(r_n) = \frac{T(r_n) - T_e}{r_e - r_n}, \quad (3.12)$$

donde r_n indica la posición radial de un nodo cuyo vecino se encuentre dentro de la frontera sólida, es decir son todos los nodos sobre los que aplicaremos las condiciones de frontera para la esfera externa.

El flujo por unidad de área no es más que el promedio de las derivadas normales sobre la esfera externa y es este promedio el que se aproximó utilizando únicamente los nodos en la frontera de la siguiente manera

$$\frac{1}{A_e} \int \int_{A_e} \frac{\partial T}{\partial r} dS = \left\langle \frac{\partial T}{\partial r} \right\rangle \approx \frac{1}{N_b} \sum_n^{N_b} \frac{T(r_n) - T_e}{r_e - r_n}, \quad (3.13)$$

donde N_b es el número total de nodos cuyos vecinos se encuentran fuera del dominio del fluido. Considerando las ecuaciones (3.11) y (3.13) la forma en la que Nu se calculó es

$$Nu \approx \left(\frac{1}{\eta}\right)^2 \frac{L}{\Delta T} \frac{1}{N_b} \sum_n^{N_b} \frac{T(r_n) - T_e}{r_e - r_n}. \quad (3.14)$$

Se observó que el error al calcular el número de Nusselt directamente en la esfera interna se manifiesta al cambiar la razón de aspecto. Los resultados no coinciden con los experimentales al ajustar los parámetros calculando Nu de esta forma. De hecho, la condición (3.9) en general no se cumple y la diferencia entre el número de Nusselt calculado directamente y el calculado indirectamente llegó a ser en algunos casos del 50 %. Por ello es fundamental calcular el número de Nusselt indirectamente como se mostró en esta sección, para realizar una sola calibración de parámetros. Estas discrepancias pueden no deberse únicamente a la resolución sino a la suavidad de las condiciones de frontera utilizadas sobre las funciones de distribución f_α y g_α , ver sección §2.6.

3.1.2. Ajuste para τ y $g\beta$

La selección para los parámetros τ y $g\beta$ se obtuvo al realizar simulaciones variando independientemente los dos parámetros. Es importante notar que τ_g deja de ser un parámetro libre ya que queda determinado por τ y $Pr = 0.7$, mediante la relación (3.2).

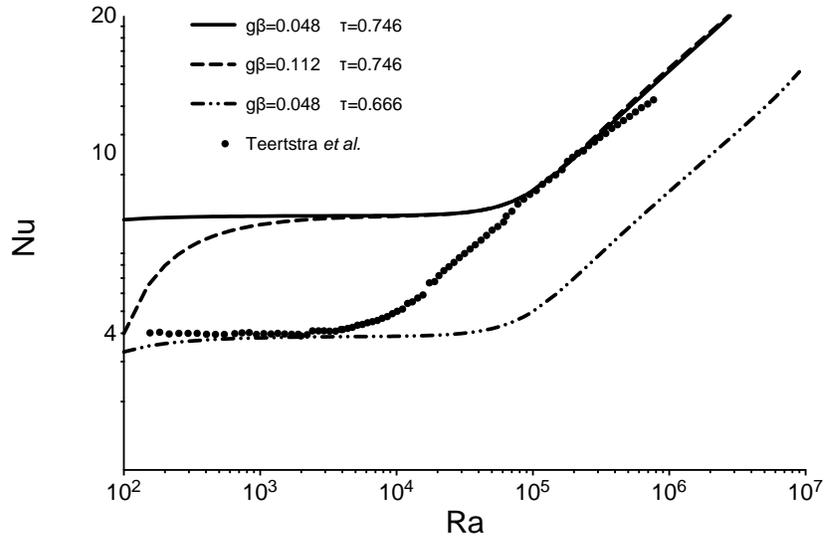


Figura 3.3: Curvas $Nu(Ra)$ para diferentes combinaciones τ y $g\beta$.

La figura 3.3 muestra un ejemplo de las curvas obtenidas para 3 diferentes combinaciones de τ y $g\beta$, con $L=160$ y $\rho_0 = 10$. De las curvas obtenidas se pueden hacer las siguientes observaciones

1. τ desplaza verticalmente la curva (aumenta o disminuye Nu) sin alterar el comportamiento cualitativo general.
2. A medida que $g\beta$ crece, Nu se aleja de un valor constante para Ra bajos en la zona I.
3. Los valores críticos de Ra en los cuales ocurren las transiciones entre zonas no parecen ser sensibles a la variación de τ y $g\beta$.

En consecuencia el valor que determina el comportamiento cuantitativo a Ra suficientemente altos será τ . Para ajustar τ se busca que cuando Nu se vuelva aproximadamente constante en la zona I tome el valor experimental de $Nu \approx 4$. Considerando esto, el valor al cual se ajustó τ fue

$$\tau = 0.686. \quad (3.15)$$

Como $g\beta$ parece únicamente controlar el comportamiento no constante a Ra bajos es posible fijarse únicamente en el número de Rayleigh más bajo a trabajar y observar cómo cambia Nu con $g\beta$. Se ajustó $g\beta$ de forma que el valor de Nu para el Ra considerado se aproxime al valor constante $Nu = 4$. Esto permitirá rectificar la curva y reproducir el comportamiento en la zona I.

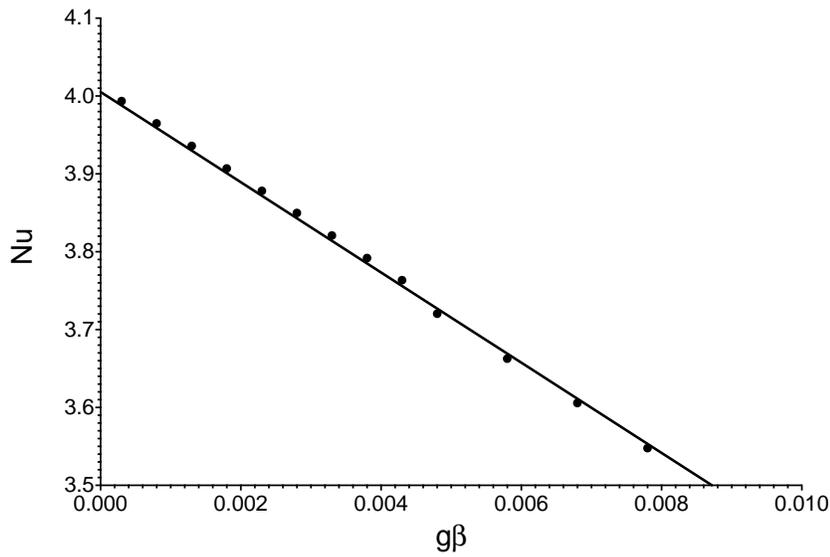


Figura 3.4: Número de Nusselt como función de $g\beta$ junto con su ajuste lineal para $Ra = 100$ y $\tau = 0.686$.

De la figura 3.4 se puede concluir que $g\beta$ debe tomar un valor numérico pequeño. El valor que se utilizó, y que rectifica hasta $Ra \propto 10^{-1}$, fue

$$g\beta = 5 \times 10^{-9}. \quad (3.16)$$

3.1.3. Ajuste para ρ_0

Como ya se mencionó previamente los parámetros τ y $g\beta$ no permiten modificar los valores críticos en el número de Rayleigh. El parámetro que permite ajustar estos puntos es la densidad inicial ρ_0 .

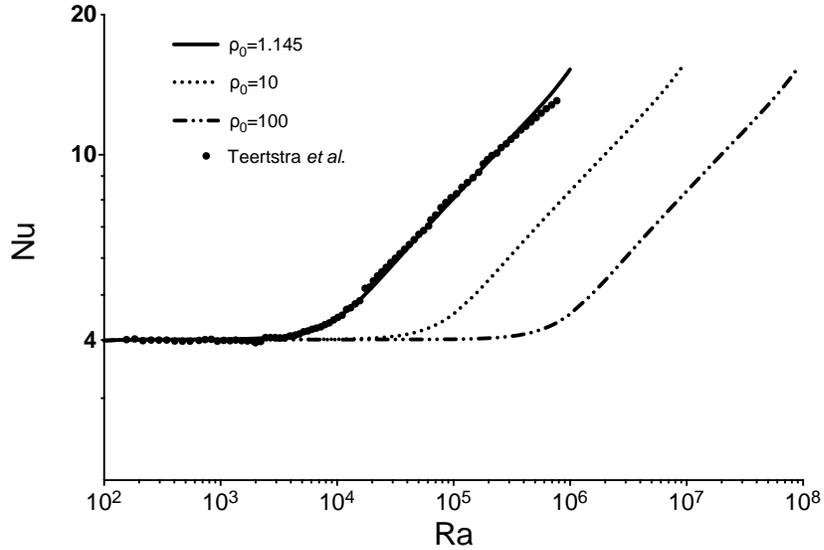


Figura 3.5: Curvas $Nu(Ra)$ para diferentes densidad iniciales ρ_0 .

En la figura (3.5) se muestra el cambio de la curva en el espacio $Ra - Nu$ al variar la densidad inicial. Se observa que al aumentar la densidad se presenta un desplazamiento de la curva hacia la derecha mientras que al disminuirla se desplaza hacia la izquierda. El valor de ρ_0 estimado para ajustar la curva experimental fue

$$\rho_0 = 1.145. \quad (3.17)$$

Los valores críticos no se calcularon explícitamente, por lo que el ajuste se realizó de forma gráfica.

3.1.4. Cambio de Resolución

Para el ajuste de parámetros se utilizó una resolución de $L = 160$, pero la resolución máxima permitida por la tarjeta de vídeo es de $L = 256$. Es deseable utilizar la máxima resolución posible para disminuir el error en el cálculo del número de Nusselt.

Para asegurar que un ajuste de τ , $g\beta$ y ρ_0 para esta nueva resolución no era necesario se realizaron simulaciones para 6 diferentes resoluciones.

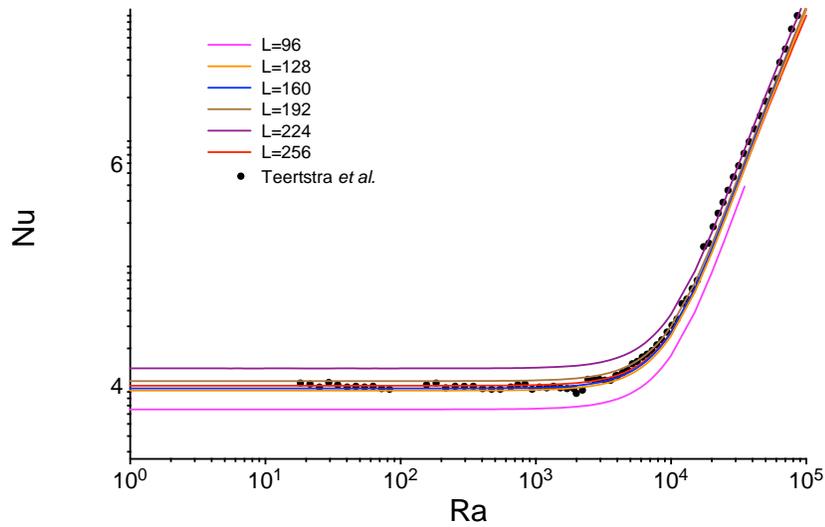


Figura 3.6: Curvas $Nu(Ra)$ para diferentes resoluciones.

En la figura 3.6 se muestra la comparación entre las diferentes resoluciones. Se puede observar que salvo para $L = 96$ y $L = 224$ las curvas obtenidas parecen no diferir en más del 5%. Así mismo parece no existir un comportamiento uniformemente convergente al aumentar la resolución sino uno oscilatorio alrededor de la curva esperada. Se encontró que para $L = 256$ el valor constante de Nusselt se aproximaba a $Nu = 4$ hasta dos cifras significativas, por lo que se decidió utilizar esta resolución para las simulaciones finales.

3.2. Comparación experimental Ra vs Nu

Se realizaron simulaciones para las 4 diferentes razones de aspecto utilizadas por Teertstra *et al.*: $\eta = \left\{ \frac{5}{24}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3} \right\}$, con una resolución de $L = 256$ y $Pr = 0.7$. En esta resolución la cantidad de nodos efectivos (nodos entre las dos esferas) es aproximadamente 8.0×10^6 , 7.6×10^6 , 7.0×10^6 , 5.6×10^6 para η igual a $\frac{5}{24}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}$ respectivamente.

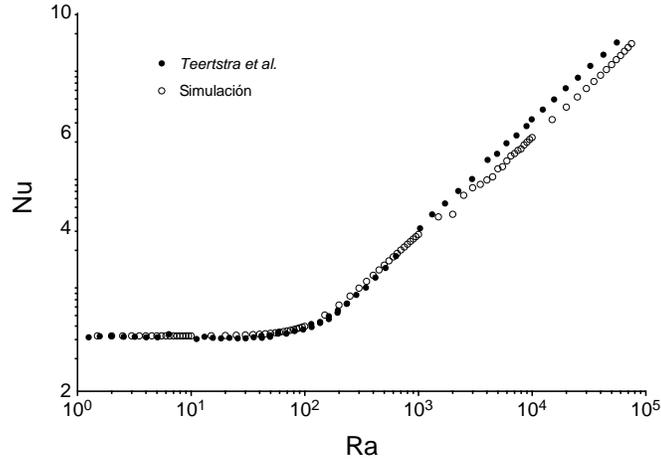


Figura 3.7: Comparación de resultados numéricos y experimentales para la razón de aspecto $\eta = \frac{5}{24}$.

En las figuras 3.7, 3.8, 3.9 y 3.10 se muestra el resultado de las simulaciones realizadas junto con los datos experimentales de Teertstra *et al.* Para obtener las curvas se consideraron 20 puntos por cada orden de magnitud. Esto tomó en promedio una semana de cómputo para obtener cada una de las curvas (se utilizó una tarjeta NVIDIA[©] GeForce GTX TITAN con 6GB VRAM). Los parámetros τ , $g\beta$ y ρ_0 utilizados fueron los mismos para todas las razones de aspecto. En la figura 3.11 se muestra una comparación entre todas las razones de aspecto, en esta figura para una mejor visualización se muestran los datos experimentales junto con la línea que une los datos numéricos.

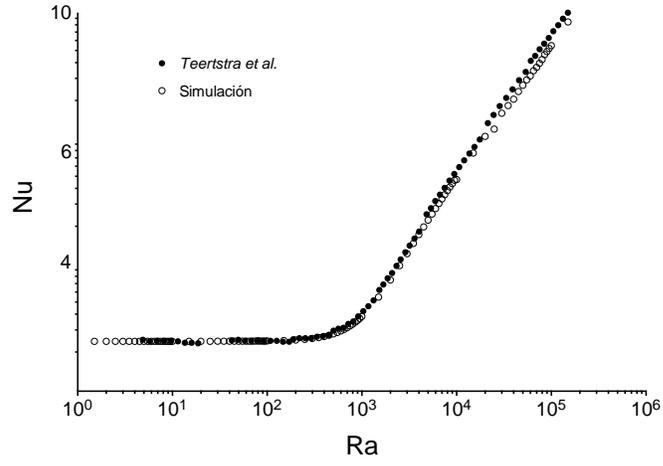


Figura 3.8: Comparación de resultados numéricos y experimentales para la razón de aspecto $\eta = \frac{1}{3}$.

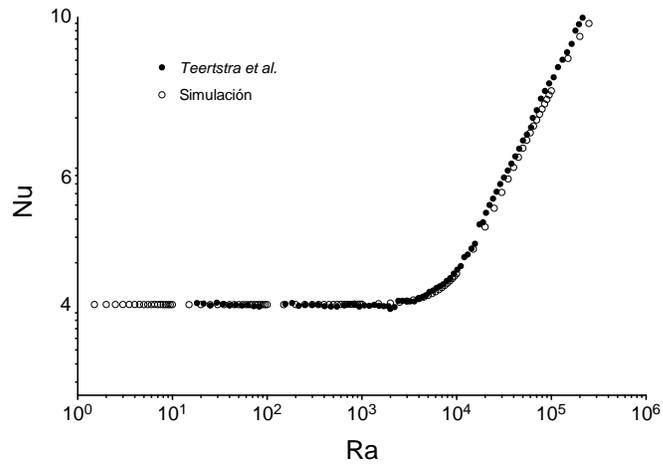


Figura 3.9: Comparación de resultados numéricos y experimentales para la razón de aspecto $\eta = \frac{1}{2}$.

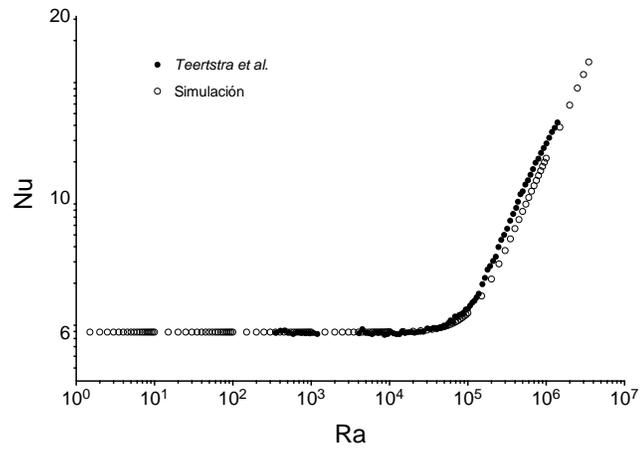


Figura 3.10: Comparación de resultados numéricos y experimentales para la razón de aspecto $\eta = \frac{2}{3}$.

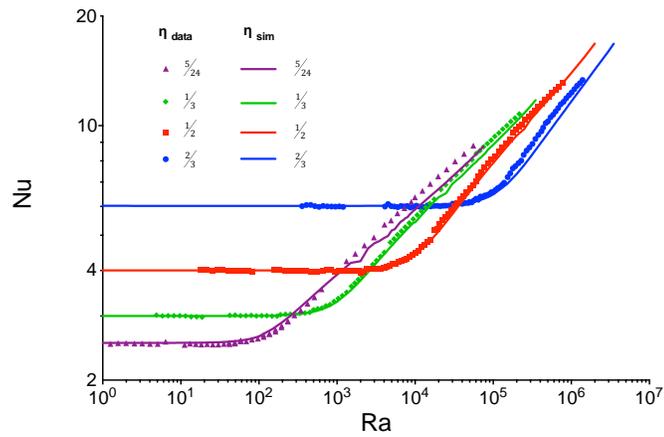


Figura 3.11: Comparación de resultados numéricos y experimentales para las cuatro diferentes razones de aspecto η

Aunque no se encontraron explícitamente los puntos críticos, estos serán denotados como Ra_{sc} (Rayleigh subcrítico) y Ra_c (Rayleigh crítico). Ra_{sc} determina el cambio entre la región I y II mientras que Ra_c denota el cambio entre la región II y III.

De la figura 3.11 se observa que $Nu = Nu(Ra, \eta)$ parece tener un comportamiento en las regiones I y III de la forma

$$Nu(Ra, \eta) = \begin{cases} Nu_I(\eta) & Ra < Ra_{sc}(\eta) \\ Nu_{III}(\eta)Ra^{m(\eta)} & Ra > Ra_c(\eta) \end{cases} \quad (3.18)$$

Es posible realizar un ajuste mediante mínimos cuadrados para todas las razones de aspecto en estas dos regiones, con el fin de calcular $Nu_I(\eta)$ y $m(\eta)$. Esto permitirá comparar los coeficientes de las simulaciones y los experimentos. La importancia radica en que estos coeficientes determinan la eficiencia en la transferencia de calor, por lo que al compararlos se tendrá una idea cuantitativa de la fiabilidad del método. Las curvas $Nu_I(\eta)$ y $m(\eta)$ encontradas fueron

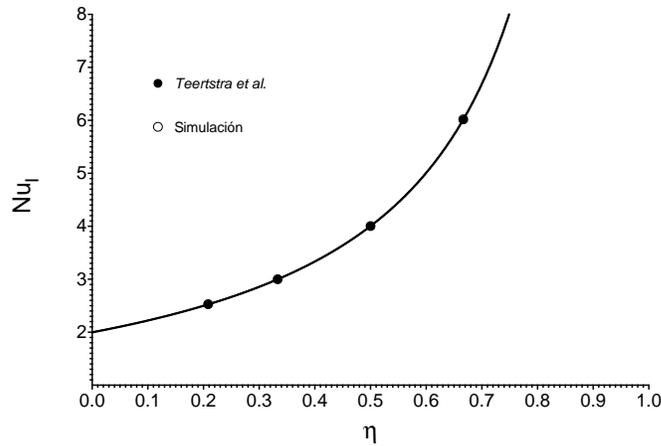


Figura 3.12: Comparación entre los resultados numéricos y experimentales para los coeficientes $Nu_I(\eta)$, junto con la curva que ajusta los datos

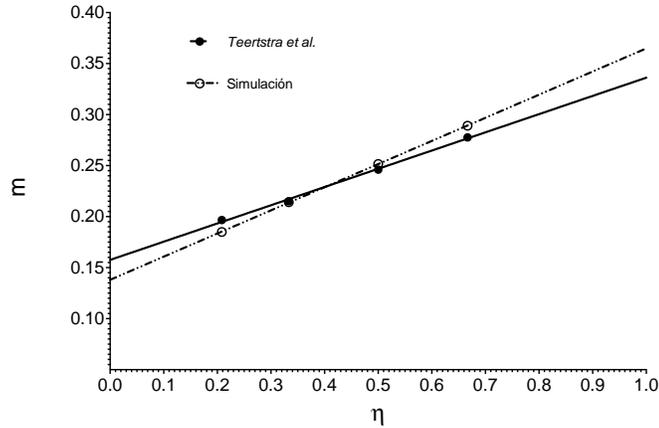


Figura 3.13: Comparación entre los resultados numéricos y experimentales para los coeficientes $m(\eta)$, junto con las curvas que ajustan los datos

El coeficiente $Nu_I(\eta)$ se ajusta a una curva de la forma

$$Nu_I = \frac{2}{1 - \eta}. \quad (3.19)$$

Esta curva corresponde a la solución del problema de conducción entre dos esferas a temperatura constante en ausencia de fuerzas de cuerpo, y se puede observar que tanto las simulaciones numéricas como los datos experimentales siguen este comportamiento. Esto muestra que a pesar de existir movimiento el transporte de energía está dominado por la conducción. La diferencia porcentual máxima entre los coeficientes Nu_I calculados a partir de las simulaciones numéricas y de los datos experimentales fue del 0.1 %.

El coeficiente $m(\eta)$ tiene un comportamiento lineal tanto para los resultados numéricos como para los datos experimentales. De la figura (3.13) se puede observar que la pendiente de la recta ajustada para la simulación es mayor a la de los datos experimentales. La intersección entre las dos curvas corresponde a $\eta \approx 0.4$ por lo que las simulaciones numéricas dan una mejor aproximación a los resultados experimentales para razones de aspecto medias. Para razones de aspecto grandes se sobreestima la transferencia de energía y para razones de aspecto pequeñas se subestima. La diferencia porcentual máxima entre los coeficientes m calculados a partir de las simulaciones numéricas y de los datos experimentales fue del 5 %.

3.3. Verificación de condiciones de frontera

Se había mencionado en el capítulo 2 que las condiciones de frontera impuestas sobre el método darían condiciones isotermas y de no deslizamiento en un punto intermedio entre un nodo sólido y un nodo fluido. Para mostrar que en efecto esto es lo que sucede se obtuvo para la razón de aspecto $\eta = \frac{1}{2}$ en la zona I el campo de temperatura adimensional T^* , dado por

$$T^* = \frac{T - T_e}{T_i - T_e}, \quad (3.20)$$

y la magnitud del campo de velocidad $\|\mathbf{v}\|$, en unidades del lattice, como función del radio para $\theta = \frac{\pi}{2}$ y $\phi = 0$.

En esta combinación de ángulos el primer nodo sólido ocurre a una distancia (en unidades de nodos) de 128 y el último nodo fluido es el que se encuentra a una distancia de 127. Las condiciones de frontera isotermas y de no deslizamiento exigen que $T^*(128) = 0$ y $\|\mathbf{v}\|(128) = 0$. En la figura 3.14 se muestra una extrapolación lineal así como los datos numéricos para la magnitud del campo de velocidad y para el campo de temperatura como función del radio en los nodos cercanos a la frontera.

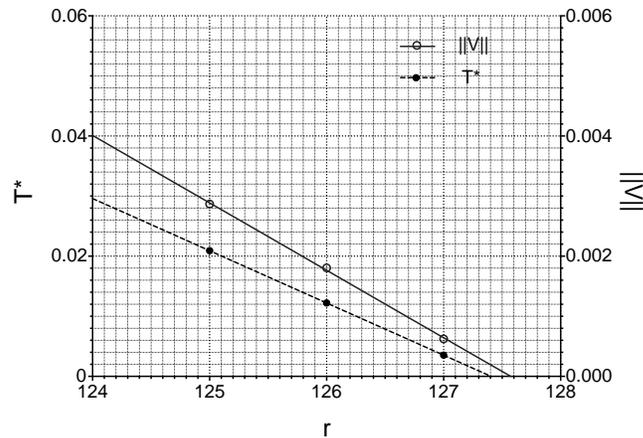


Figura 3.14: Extrapolación en la zona I para $\eta = \frac{1}{2}$, $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\phi = 0$ del campo de temperatura y de la magnitud del campo de velocidad

Como se puede ver de la figura 3.14 las condiciones de frontera se satisfacen en una vecindad de radio 0.1 en un punto intermedio entre el último nodo fluido y el primer nodo sólido. Esto se cumple para todos los nodos fluidos que tengan un vecino sólido.

3.4. Isotermas y líneas de corriente

La transferencia de calor en el sistema obtenida por las simulaciones y por los experimentos coinciden razonablemente bien. Se observó que la diferencia entre ambos resultados van del 0.1 % al 5%. Debido a esto se espera que tanto el campo de velocidades como el de temperatura obtenidos numéricamente exhiban el comportamiento físico correcto. Para visualizar estos campos se hace uso de las superficies isotermas y las líneas de corriente, de esta forma se podrá entender el flujo de masa y energía en el sistema.

Las simulaciones realizadas almacenaban la información de los campos de temperatura y velocidad para números de Rayleigh específicos, de igual forma se contaba con un despliegue gráfico en tiempo real. De estas visualizaciones se observó que no existía ruptura de la simetría axial presente en el problema físico por lo que es posible observar tanto las superficies isotermas como las de corriente en un plano axial paralelo a la fuerza gravitacional, como por ejemplo el plano $y - z$ de la malla cartesiana.

Los resultados del campo de temperatura se muestran en la temperatura adimensional T^* dada por la ecuación (3.20).

A continuación se presentan las isotermas y líneas de corriente para todas las razones de aspecto en cada una de las tres regiones. Adicionalmente se incluye una visualización 3D de las isotermas. Nos referiremos a la zona I como zona conductiva, a la zona II como zona de transición y a la zona III como zona convectiva.

3.4.1. Zona Conductiva

Los resultados numéricos en esta zona, figuras 3.15 a 3.18, muestran que el transporte de energía está dominado por la conducción. Esto puede verse por la forma esférica de las isothermas. Las líneas de corriente tienen una forma tipo “banana” con simetría de reflexión respecto al ecuador, observada en otras simulaciones presentes en la literatura [29].

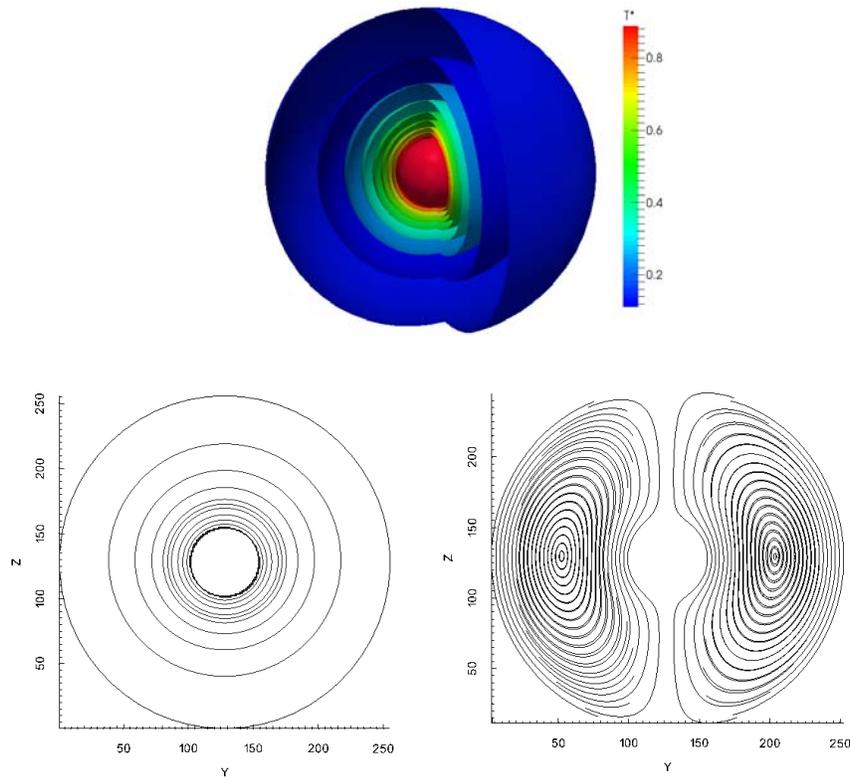


Figura 3.15: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{5}{24}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10$, $Ra < Ra_{sc}$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isothermas. *Abajo Izquierda*: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo derecha*: Líneas de corriente.

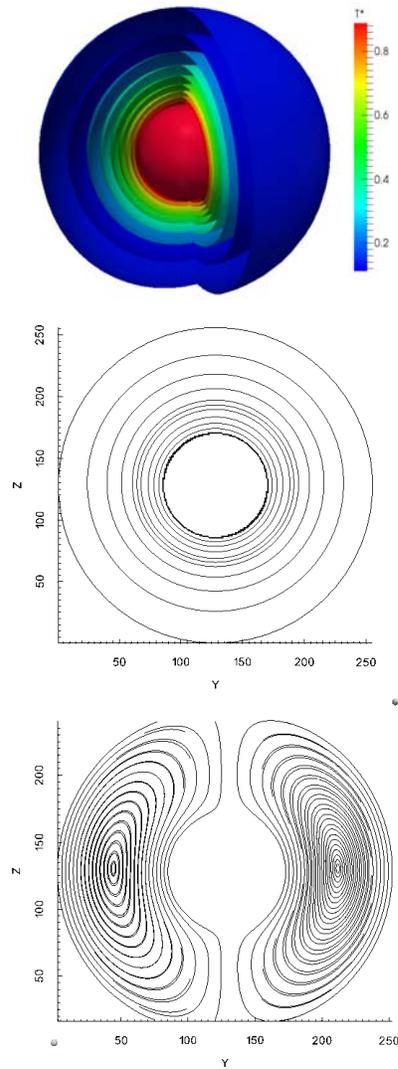


Figura 3.16: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{1}{3}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^2$, $Ra < Ra_{sc}$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isothermas. *Enmedio*: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

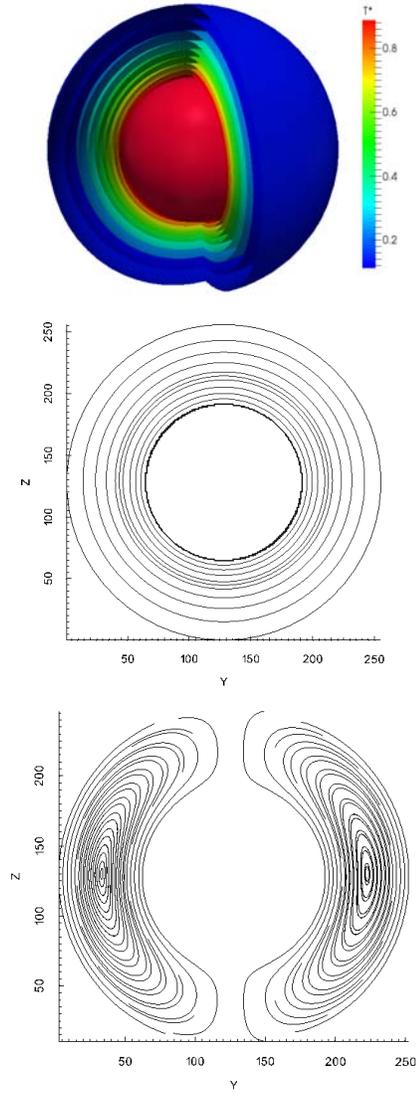


Figura 3.17: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{1}{2}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^3$, $Ra < Ra_{sc}$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isothermas. *Enmedio*: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

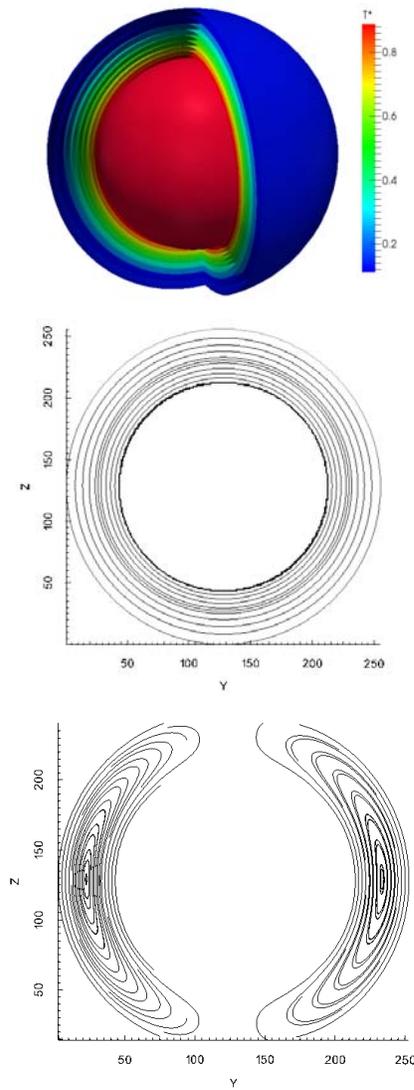


Figura 3.18: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{2}{3}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^4$, $Ra < Ra_{sc}$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isothermas. *Enmedio*: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

3.4.2. Zona de Transición

Los resultados numéricos en esta zona, figuras 3.19 a 3.22, muestran que las superficies isotermas se deforman en ovoides pero mantienen su convexidad. Las líneas de corriente mantienen su forma tipo “banana” pero pierden la simetría de reflexión respecto al ecuador, mostrando un ligero desplazamiento en dirección contraria a la fuerza gravitacional.

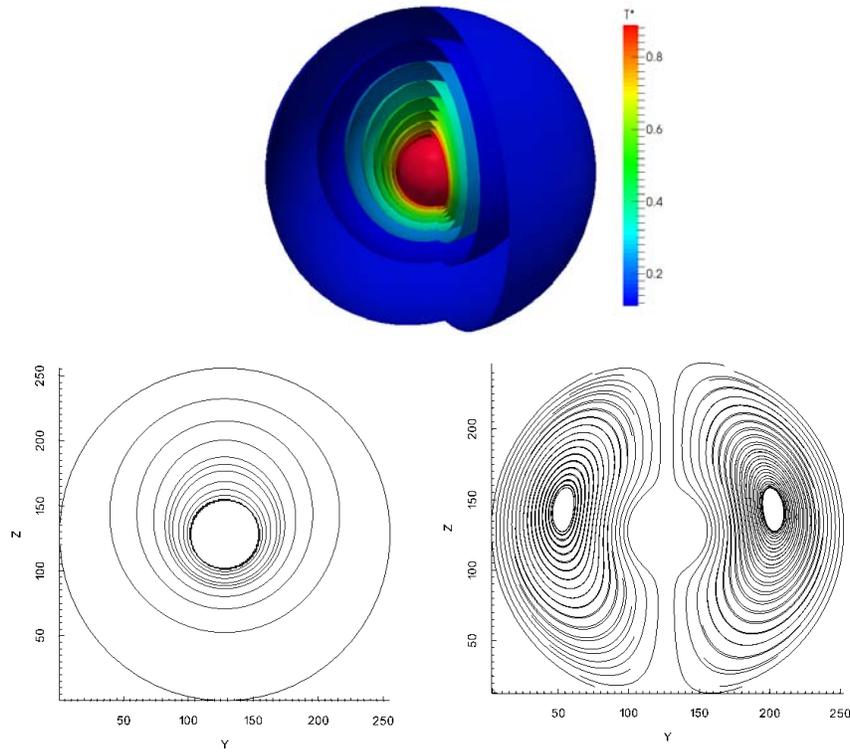


Figura 3.19: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{5}{24}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^2$, $Ra_{sc} < Ra < Ra_c$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isotermas. *Abajo Izquierda*: 10 líneas isotermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo derecha*: Líneas de corriente.

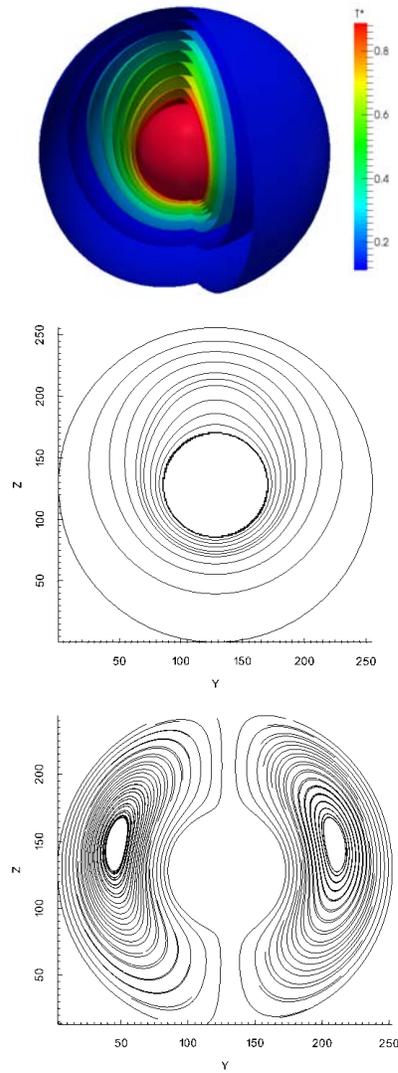


Figura 3.20: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{1}{3}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^3$, $Ra_{sc} < Ra < Ra_c$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isothermas. *Enmedio*: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

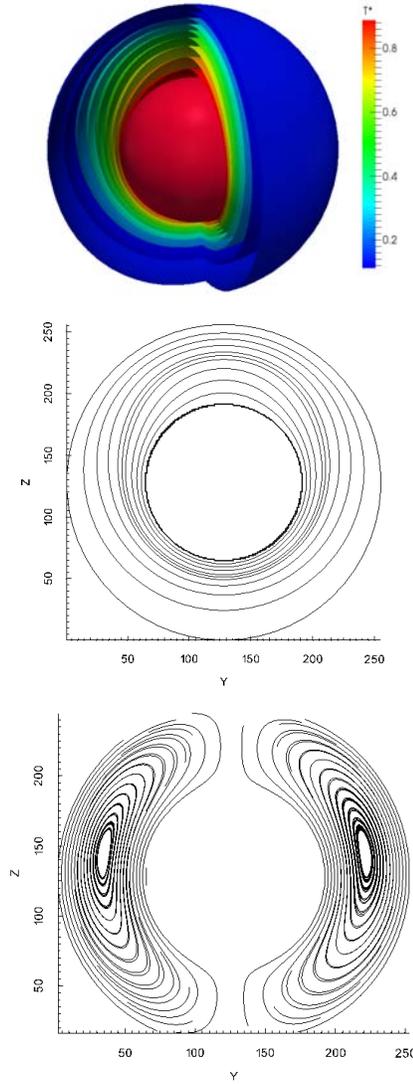


Figura 3.21: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{1}{2}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^4$, $Ra_{sc} < Ra < Ra_c$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isotermas. *Enmedio*: 10 líneas isotermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

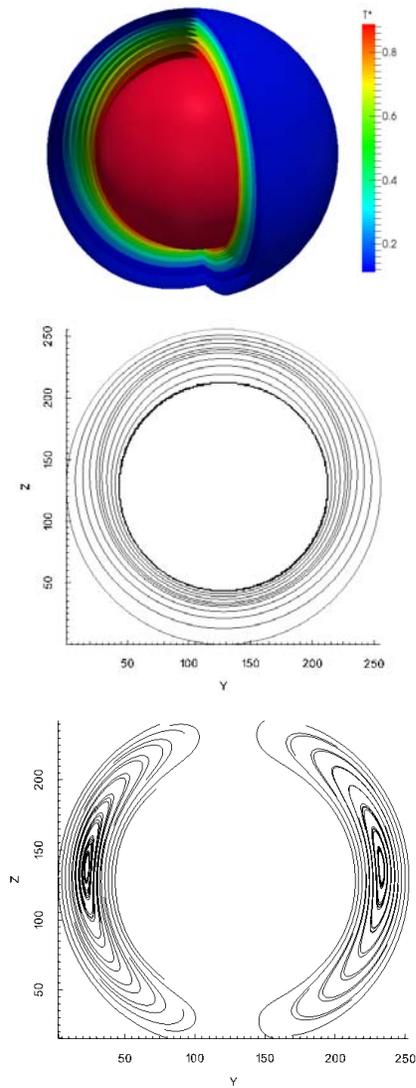


Figura 3.22: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{2}{3}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^5$, $Ra_{sc} < Ra < Ra_c$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isothermas. *Enmedio*: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

3.4.3. Zona Convectiva

Los resultados numéricos en esta zona, figuras 3.23 a 3.26, muestran una gran deformación de las isothermas, cambiando su convexidad al tomar una forma tipo “hongo”. Las isothermas de mayor temperatura se encuentran ahora más cercanas a la superficie externa y la convección domina el transporte de energía. Las líneas de corriente se desplazan en mayor medida verticalmente.

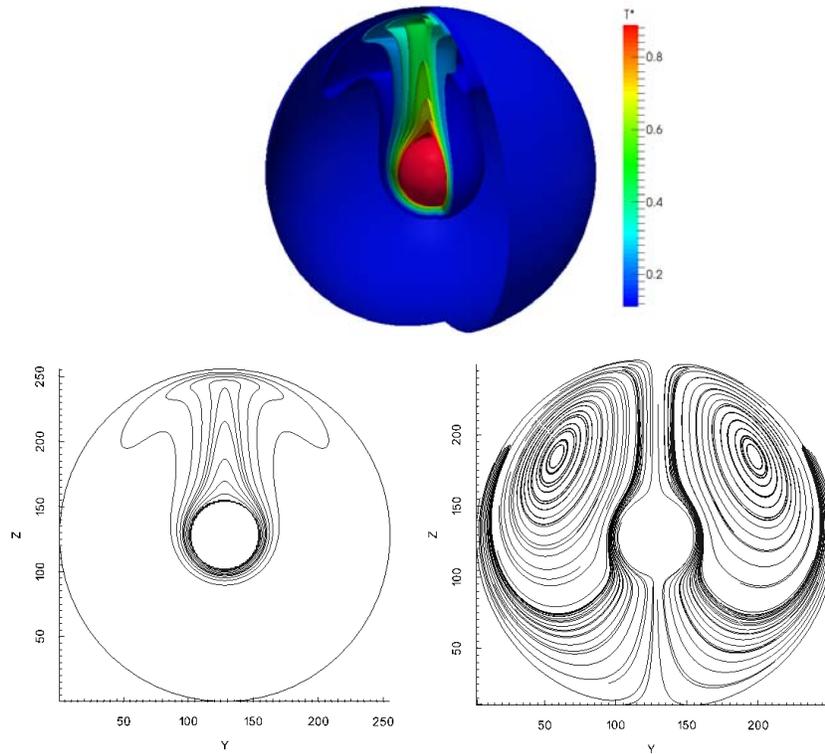


Figura 3.23: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{5}{24}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^4$, $Ra > Ra_c$. Arriba: Visualización 3D de curvas isothermas. Abajo Izquierda: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. Abajo derecha: Líneas de corriente.

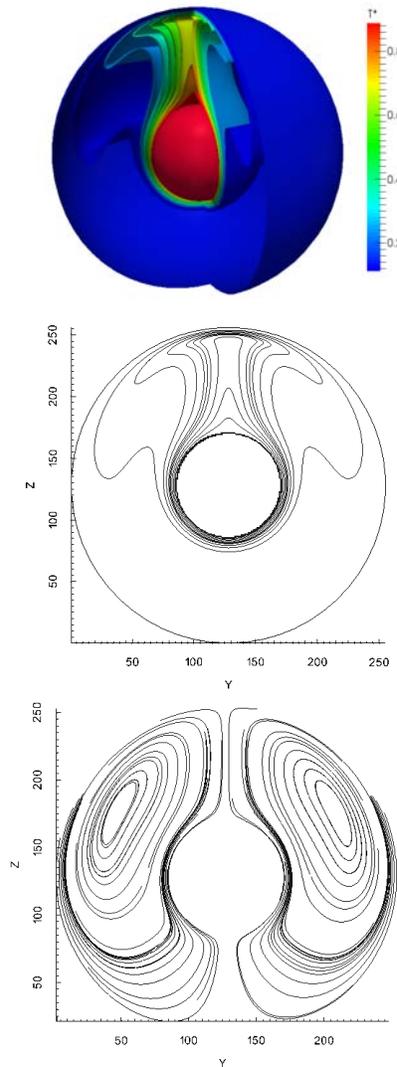


Figura 3.24: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{5}{24}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^5$, $Ra > Ra_c$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isothermas. *Enmedio*: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

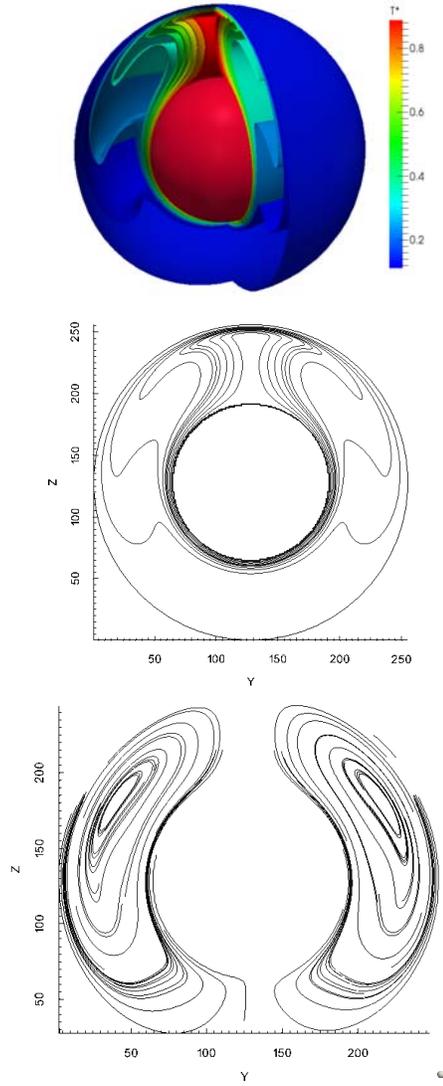


Figura 3.25: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{5}{24}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^6$, $Ra > Ra_c$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isotermas. *Enmedio*: 10 líneas isotermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

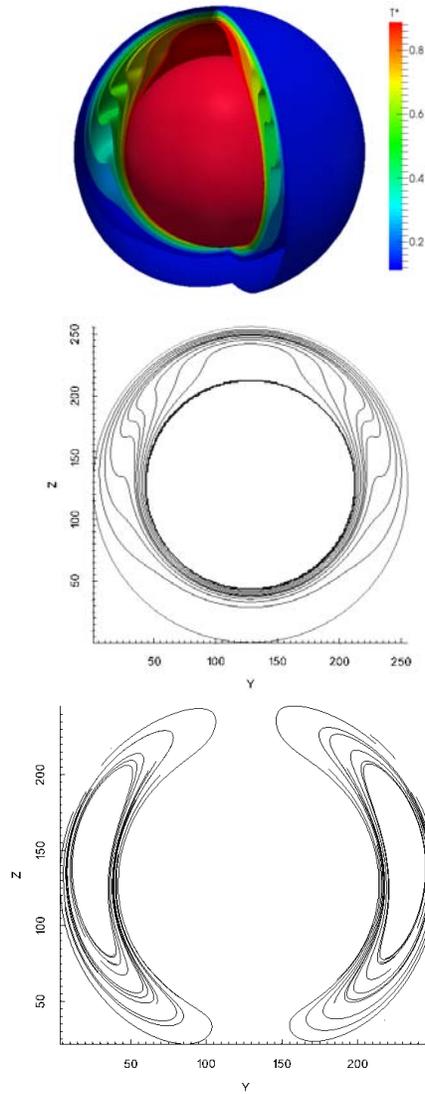


Figura 3.26: Curvas obtenidas para $\eta = \frac{5}{24}$ y $Pr = 0.7$ a $Ra = 10^6$, $Ra > Ra_c$. *Arriba*: Visualización 3D de curvas isothermas. *Enmedio*: 10 líneas isothermas de contorno distribuidas uniformemente en el intervalo $[0,1]$. *Abajo*: Líneas de corriente.

Capítulo 4

Conclusiones y Perspectivas

En este capítulo se presentan las observaciones y conclusiones obtenidas de los resultados mostrados en el capítulo anterior. Para dar un mejor contexto a las conclusiones que aquí se presentan, se enfatiza el objetivo del presente trabajo: Estudiar numéricamente el proceso de convección natural en un fluido contenido entre dos esferas concéntricas a temperatura constante mediante la obtención del comportamiento global de transferencia de energía y la caracterización de los diferentes regímenes a través de la forma de las isotermas y las líneas de corriente del flujo.

Se estudió el proceso de convección en la aproximación de Oberbeck-Boussinesq utilizando un método térmico de Lattice-Boltzmann [30]. El sistema termohidrodinámico estudiado se encuentra caracterizado por tres números adimensionales: el número de Prandtl Pr , el número de Rayleigh Ra y la razón de aspecto entre las esferas η . La transferencia global de calor se caracteriza por el número de Nusselt Nu y por su dependencia con los parámetros adimensionales ya introducidos. Nu es el parámetro de orden que permite determinar los diferentes mecanismos de transporte de energía. Como se buscó una comparación directa de las curvas $Nu = Nu(Ra, \eta)$ con resultados experimentales, únicamente se realizaron simulaciones para $Pr = 0.7$ y para $\eta = \{\frac{5}{24}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}\}$ [2].

Debido a que el método numérico cuenta con parámetros libres fue necesario ajustar una de las curvas $Nu = Nu(Ra, 0.7, \eta)$ a los resultados experimentales conocidos. Se ajustó el valor de los parámetros libres τ , ρ_0 y $g\beta$ utilizando la curva experimental para $\eta = \frac{1}{2}$ y las simulaciones para el resto de las razones de aspecto se realizaron sin variar estos parámetros. Al calibrar el método numérico y determinar los parámetros libres se observó lo siguiente

- *Ajuste de τ .* El parámetro τ está relacionado a la viscosidad cinemática del fluido. En el método se observó que determina el valor numérico de Nu en la zona conductiva, por lo que sirve para ajustar verticalmente la curva $Nu = Nu(Ra)$ (ver figura 3.3).
- *Ajuste de ρ_0 .* El parámetro ρ_0 representa la densidad inicial y de referencia del fluido. En el método determina las transiciones entre zonas. Por lo que sirve para ajustar horizontalmente la curva $Nu = Nu(Ra)$ (ver figura 3.5).
- *El ajuste de $g\beta$.* El parámetro $g\beta$ corresponde al término de acoplamiento entre la ecuación de momento y la ecuación de energía en el método térmico de Lattice-Boltzmann. Su contraparte en el modelo de Boussinesq corresponde a la compresibilidad térmica incluida en la fuerza de cuerpo. Al calibrar este parámetro para reproducir los resultados experimentales se obtuvo como única condición que fuera pequeño (ver figura 3.4). Que tan pequeño debe ser depende del rango de Ra a estudiar. Podríamos entender esta condición como el requerimiento sobre el segundo número de Froude $Fr^2 = \beta\Delta T$ para derivar las ecuaciones de Oberbeck-Boussinesq de las ecuaciones de Navier-Stokes (ver sección 1.2). Esto parece indicar que el método numérico es congruente con las condiciones físicas impuestas por la aproximación de Oberbeck-Boussinesq.

A pesar de que el método numérico es relativamente simple, se observó que fue capaz de reproducir con un error entre el 0.1% (zona I) y el 5% (zona III) los resultados experimentales (ver figuras 3.7, 3.8, 3.9 y 3.10). De los resultados es posible realizar las siguientes observaciones

- El método numérico tiene menor error ($\approx 0.4\%$) para razones de aspecto medias. Para razones de aspecto grandes se sobrestima en $\approx 5\%$ la transferencia de energía mientras que para razones de aspecto pequeñas se subestima igual en $\approx 5\%$ (ver figura 3.13).

- Se puede observar que se presentan tres zonas características. Nos referimos a estas como la zona conductiva, la zona de transición y la zona convectiva (ver figura 3.11). Existen dos números de Rayleigh críticos (Ra_{sc} y Ra_c) que determinan cuándo se darán las transiciones entre cada zona. Cada una de las zonas se encuentra caracterizada por la forma de $Nu = Nu(Ra)$, de las isothermas y de las líneas de corriente de la siguiente forma

1. Zona Conductiva:

En esta zona Nu sigue un comportamiento constante. Las isothermas presentan simetría esférica y son equivalentes a la solución al problema de conducción en ausencia de fuerzas de cuerpo (ver figuras 3.15, 3.16, 3.17 y 3.18). Lo que indica que a pesar de existir movimiento este no es lo suficientemente intenso como para afectar el transporte de energía.

Los líneas de corriente muestran que solo existe una celda convectiva tipo “banana” con simetría axial y simetría de reflexión $\theta \rightarrow -\theta$ (ver figuras 3.15, 3.16, 3.17 y 3.18).

2. Zona Transición:

En esta zona Nu comienza a aumentar como función de Ra . Las isothermas pierden la simetría esférica y conservan únicamente la simetría axial, pasan de ser esferas a ser ovoides (ver figuras 3.19, 3.20, 3.21 y 3.22).

Los líneas de corriente comienzan a perder la simetría de reflexión $\theta \rightarrow -\theta$ y comienzan a desplazarse en dirección contraria al campo gravitacional (ver figuras 3.19, 3.20, 3.21 y 3.22).

3. Zona Conectiva:

En esta zona Nu crece con Ra aproximadamente de la forma $Nu \propto Ra^{m(n)}$. Hay que recordar que Grossman y Lohse demostraron que para el caso clásico de Rayleigh-Bénard no es posible expresar la relación entre el número de Nusselt y el número de Rayleigh como una ley de potencias pura, sino como una serie de leyes de potencias, por lo que en un futuro se podría realizar un análisis más detallado para ver si en el caso estudiado esto mismo ocurre [31].

Las isotermas mantienen la simetría axial pero cambian su curvatura, pasan de ser ovoides a ser figuras tipo “hongos” (ver figuras 3.23, 3.24, 3.25 y 3.26).

Las líneas de corriente siguen teniendo una única celda con forma tipo “banana” y conservan la simetría axial, pero se desplazan en mayor medida en dirección contraria al campo gravitacional (ver figuras 3.23, 3.24, 3.25 y 3.26).

Es posible concluir que la geometría de las curvas isotermas caracteriza las regiones. Pasan de ser esferas a superficies no convexas en forma de “hongo”. Las líneas de corriente siempre cuentan con una única celda convectiva y siguen la geometría impuesta por las isotermas (ver figuras 3.15-3.26).

También se pudo observar que para los Ra obtenidos no se encontró un estado no estacionario, primero se encontraron inestabilidades numéricas dentro de la simulación.

La simetría axial se conservó durante todas las simulaciones. Esto hace pensar que el método completamente tridimensional es innecesario, pero debido a que en un futuro se desea extender el problema a un problema de fuerza central donde hay soluciones que no tienen simetría axial, las simulaciones realizadas sirven como una primera validación [1].

Para concluir esta sección, se presentan las perspectivas del trabajo mostrando algunas posibles extensiones a realizarse en el futuro

■ Fuerza Central

Como ya se mencionó se pretende extender el método para tratar el problema bajo un campo central. Para fuerzas de este tipo sí existen estados hidrostáticos por lo que el problema se vuelve el análogo esférico al problema clásico de Rayleigh-Bénard. Este tipo de fuerzas pueden añadirse fácilmente al algoritmo cambiando el término de acoplamiento en la ecuación (2.68) por

$$3w_{\alpha}c_l\Delta t(T - \theta_0)g(r)\xi_{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (4.1)$$

donde $g(r)$ denota la forma de la fuerza de cuerpo y $\hat{\mathbf{e}}_r$ el vector director radial esférico. A manera de prueba se realizó una simulación con $\eta = \frac{1}{2}$ para el caso

$$g(r) \propto r. \quad (4.2)$$

El problema de estabilidad lineal para este tipo de fuerza fue tratado por Chandrasekhar en su libro de estabilidad hidrodinámica e hidromagnética en 1961 [1]. Chandrasekhar propone una perturbación a la solución hidrostática para el campo de temperatura de la forma

$$T(r, \theta, \phi) = \Theta(r)Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.3)$$

donde $\Theta(r)$ es una función que depende únicamente del radio y Y_l^m son los esféricos armónicos. Para el caso $\eta = \frac{1}{2}$ Chandrasekhar muestra que el primer modo en aparecer es el modo $l = 4$. Para validar la simulación de prueba realizada se obtuvieron las figuras mostradas en 4.1.

Como se puede apreciar en la figura 4.1 el campo de temperatura se asemeja al comportamiento angular descrito por Chandrasekhar. Aunque el comportamiento angular no se ajusta exactamente al modo deseado se puede suponer que se debe a que la predicción de Chandrasekhar es para $Ra \approx Ra_c$ y las figuras se obtuvieron a un número de Rayleigh $Ra = 400$ mayor al Rayleigh crítico $Ra_c \approx 250$ observado en la simulación.

Es importante mencionar que las figuras en 4.1 fueron obtenidas para un sistema de $L = 224$, para otros tamaños se observó que la malla imponía su simetría y en lugar de dominar un modo $l = 4$ se observaba un modo $l = 2$. Esto puede deberse a las condiciones de frontera, que para fronteras curvas no son las más adecuadas [27]. También se observó que los estados convectivos estacionarios presentaban inestabilidad numérica después de largos intervalos de tiempo.

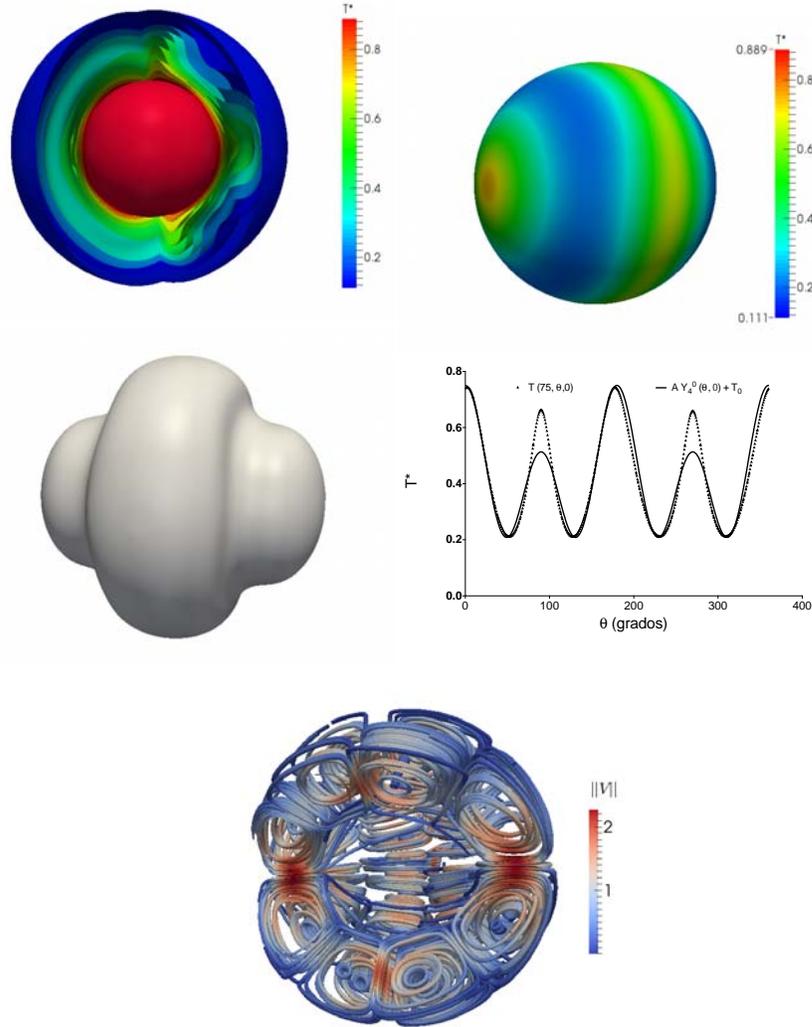


Figura 4.1: Fuerza central $\propto r$ para $\eta = \frac{1}{2}$, $Pr = 0.7$ y $Ra = 400 > Ra_c$. *Arriba Izquierda:* Visualización 3D de las superficies isoterma. *Arriba Derecha:* Campo de temperatura sobre una superficie con r constante. *En medio Izquierda:* Forma general de las superficies isoterma. *En medio Derecha:* Campo de temperatura para $\phi = 0$ y r constante como función de θ , también se muestra un ajuste al modo $l = 4$ de los esféricos armónicos. *Abajo* Líneas de corriente coloreadas con la magnitud del campo de velocidad

- **Condiciones de Frontera Curvas**

Otra de las extensiones a realizarse es la inclusión de condiciones de frontera más adecuadas, utilizando las propuestas por Huang *et al.* en 2006 [27]. Estas condiciones podrían solucionar los problemas con las fuerzas de cuerpo discutidos anteriormente y de esta forma sería posible extender el estudio a este tipo de problemas

- **Rotación**

Otra extensión directa, pero sensible a las condiciones de frontera, es la implementación de rotación de las esferas externa e interna. Esto se podría añadir una vez implementadas las condiciones de frontera ya mencionadas.

Bibliografía

- [1] S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Dover Publications, Inc, 1a ed., 1981.
- [2] P. M. Teertstra, M. M. Yovanovich, and J. R. Culham, “Natural convection measurements for a concentric spherical enclosure,” *J. Heat Transfer*, vol. 128, pp. 580–587, 2005.
- [3] E. Bodenschatz, W. Pesch, and G. Ahlers, “Recent developments in Rayleigh-Bénard convection,” *Annu. Rev. Fluid Mech*, vol. 32, pp. 709–778, 2000.
- [4] E. H. Bishop, L. R. Mack, and J. A. Scanlan, “Heat transfer by natural convection between concentric spheres,” *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 9, pp. 649–662, 1966.
- [5] G. K. Batchelor, *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 3a ed., 2000.
- [6] M. Lappa, *Thermal Convection: Patterns, Evolution and Stability*. Wiley, 1a ed., 2010.
- [7] B. Straughan, *The Energy Method, Stability, and Nonlinear Convection*. Springer, 2nd ed., 2004.
- [8] M. Gad-El-Hak, “Stokes hypothesis for a newtonian, isotropic fluid,” *Journal of Fluids Engineering*, vol. 117, pp. 3–5, 1995.
- [9] C. Jog, *Foundations and Applications of Mechanics. Vol 1: Continuum Mechanics*. 2a ed., (www.hyfem.com/HyFem/continuum_csj.pdf).
- [10] K. R. Rajagopal, M. Ruzicka, and A. R. Srinivasa, “On the Oberbeck-Boussinesq approximation,” *Math. Models and Meth. in Appl. Sci*, vol. 6, pp. 1157–1167, 1996.

- [11] E. Spiegel and G. Veronis, “On the boussinesq approximation for a compressible fluid,” *Astrophys. J.*, vol. 131, pp. 442–447, 1960.
- [12] S. Genieys and M. Massot, “From Navier-Stokes equations to Oberbeck-Boussinesq approximation: a unified approach,” *Paru comme un rapport interne de l’unité MAPLY (UMR5585 - Lyon)*, 2001.
- [13] J. M. Mihaljan, “A rigorous exposition of the Boussinesq approximations applicable to a thin layer of fluid,” *Astrophys. J.*, vol. 136, pp. 1126–1133, 1962.
- [14] D. D. Gray and A. Giorgini, “The validity of the boussinesq approximation for liquids and gases,” *Int. J. Heat Mass transfer*, vol. 19, pp. 545–551, 1976.
- [15] R. W. Ogden, *Non-linear Elastic Deformations*. Dover Publications, 1a ed., 1997.
- [16] L. R. Mack and H. C. Hardee, “Natural convection between concentric spheres at low Rayleigh numbers,” *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 11, pp. 387–396, 1968.
- [17] R. Zwanzig, *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, 1a ed., 2001.
- [18] S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation for fluid dynamics and beyond*. Oxford University Press, 1a ed., 2001.
- [19] D. Heubes, A. Bartel, and M. Ehrhardt, *An Introduction to the Lattice Boltzmann Method for Coupled Problems*. Institute of Mathematical Modelling, Analysis and Computational Mathematics, 2011.
- [20] P. J. Davis and P. Rabinowitz, *Methods of Numerical Integration*. Academic Press, Inc, 2a ed., 1984.
- [21] Y. H. Qian, S. Succi, and S. A. Orszag, “Recent advances in Lattice Boltzmann computing,” *Annual Reviews of Computational Physics*, vol. III, pp. 195–242, 1995.
- [22] R. Mei, W. Shyy, D. Yu, and L.-S. Luo, “Lattice Boltzmann method for 3-d flows with curved boundary,” *Journal of Computational Physics*, vol. 161, pp. 680–699, 2000.
- [23] P. Asinari, *Multi-Scale Analysis of Heat and Mass Transfer in Mini/Micro Structures*. Ph.D. Thesis, 2005.

- [24] F. J. Alexander, S. Chen, and J. D. Sterling, “Lattice Boltzmann thermohydrodynamics,” *Physical Review E*, vol. 47, pp. 2249–2252, 1993.
- [25] X. He, S. Chen, and G. D. Doolen, “A novel thermal model for the Lattice Boltzmann method in incompressible limit,” *Journal of Computational Physics*, vol. 146, pp. 282–300, 1998.
- [26] T. Inamuro, M. Yoshino, H. Inoue, R. Mizuno, and F. Ogino, “A Lattice Boltzmann method for a binary miscible fluid mixture and its application to a heat-transfer problem,” *Journal of Computational Physics*, vol. 179, pp. 201–215, 2002.
- [27] H. Huang, T. Lee, and C. Shu, “Thermal curved boundary treatment for the thermal Lattice Boltzmann equation,” *International Journal of Modern Physics C*, vol. 17, pp. 631–643, 2006.
- [28] X. Shan, “Simulation of Rayleigh-Bénard convection using lattice boltzmann method,” *Phys. Rev. E*, vol. 55, pp. 2780–2788, 1997.
- [29] N. Scurtu, B. Futterer, and C. Egbers, “Three-dimensional natural convection in spherical annuli,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 127, pp. 01–09, 2008.
- [30] R. Rechtman and F. Mandujano, “Thermal levitation,” *J. Fluid Mech.*, vol. 606, pp. 105–114, 2008.
- [31] S. Grossmann and D. Lohse, “Scaling in thermal convection: A unifying theory,” *J. Fluid Mech.*, vol. 407, pp. 27–56, 2000.