



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN

La Ecuación de Redes de Boltzmann: Una Alternativa para la Simulación de Fluidos Newtonianos y de Ostwald de Waele.

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERA QUÍMICO

PRESENTA:

LEYDI RUBÍ PÉREZ VERA

ASESOR: DR. JOSÉ LUIS VELÁZQUEZ ORTEGA

CUAUTITLÁN IZCALLI, ESTADO DE MÉXICO, 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
UNIDAD DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR
DEPARTAMENTO DE EXÁMENES PROFESIONALES**

ASUNTO: VOTO APROBATORIO



**M. en C. JORGE ALFREDO CUÉLLAR ORDAZ
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLÁN
PRESENTE**

**ATN: I.A. LAURA MARGARITA CORTAZAR FIGUEROA
Jefa del Departamento de Exámenes Profesionales
de la FES Cuautitlán.**

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos comunicar a usted que revisamos el: **Tesis y Examen Profesional**

La Ecuación de Redes de Boltzmann: Una Alternativa para la Simulación de Fluidos Newtonianos y de Ostwald de Waele.

Que presenta la pasante: **Leydi Rubí Pérez Vera**
Con número de cuenta: **091133481** para obtener el Título de la carrera: **Ingeniería Química**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO**.

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 13 de Septiembre de 2016.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	I.Q. Margarita Castillo Agreda	
VOCAL	Dr. José Luis Velázquez Ortega	
SECRETARIO	I.A Ana María Sixto Berrocal	
1er. SUPLENTE	I.A. Dulce María Oliver Hernández	
2do. SUPLENTE	Dr. Martín Rogelio Cruz Díaz	

NOTA: los sinodales suplentes están obligados a presentarse el día y hora del Examen Profesional (art. 127).

LMCF/cga*

AGRADECIMIENTOS Y DEDICATORIAS

A la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, por haberme dado la oportunidad de recibir la formación de enseñanza superior y que siempre representaré a la misma con gran orgullo.

A mis padres, por haberme brindado día con día todo su amor y apoyo, además de regalarme la herencia más valiosa que me permitirá realizarme como ser humano.

A mis hermanos por apoyarme y estar conmigo siempre en las buenas y en las malas.

A mis sobrinos por todo el amor que me dan y que me hace feliz día con día.

A todos los sinodales por la disposición en todo momento para revisar este trabajo que hoy se ve concluido.

Al programa UNAM-DGAPA PAPIME PE104614, por el apoyo recibido en la elaboración de este trabajo.

ÍNDICE DE CUADROS

CAPÍTULO 2

Cuadro 2.1	Tipos de fluidos.....	17
-------------------	-----------------------	----

CAPITULO 5

Cuadro 5.1	Variables obtenidas para fluido Newtoniano, $n = 1$	44
Cuadro 5.2	Variables obtenidas para fluido no Newtoniano, $n = 0.33$	45
Cuadro 5.3	Variables obtenidas para fluido no Newtoniano, $n = 0.56$	45
Cuadro 5.4	Variables obtenidas para fluido no Newtoniano, $n = 2$	46
Cuadro 5.5	Obtención de unidades físicas a partir de unidades de rejilla para un fluido Newtoniano, $n = 1.0$	52
Cuadro 5.6	Obtención de unidades físicas a partir de unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, $n = 0.33$	53
Cuadro 5.7	Obtención de unidades físicas a partir de unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, $n = 0.56$	54
Cuadro 5.8	Obtención de unidades físicas a partir de unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, $n = 2.0$	55
Cuadro 5.9	Variables en unidades físicas y unidades de rejilla para un fluido Newtoniano, $n = 1.0$	55
Cuadro 5.10	Variables en unidades físicas y unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, $n = 0.33$	56
Cuadro 5.11	Variables en unidades físicas y unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, $n = 0.56$	56
Cuadro 5.12	Variables en unidades físicas y unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, $n = 2.0$	57
Cuadro 5.13	Presiones obtenidas con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano, $n = 0.33$	58
Cuadro 5.14	Presiones obtenidas con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano, $n = 0.56$	59
Cuadro 5.15	Presiones obtenidas con Lattice Boltzmann para un fluido Newtoniano, $n = 1.0$	60
Cuadro 5.16	Presiones obtenidas con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano, $n = 2.0$	61

ÍNDICE DE FIGURAS

CAPÍTULO 1

Figura 1.1	La solución numérica aproximada de un problema real puede ser más precisa que la solución exacta (analítica) de un modelo simplificado en exceso de ese problema.....	2
Figura 1.2	Modelado matemático de los sistemas físicos.....	3
Figura 1.3	Manual de regla de cálculo editado en 1942.....	6
Figura 1.4	Simulación del campo de presiones con el uso de CFD.....	9

CAPÍTULO 2

Figura 2.1	Comparación de esfuerzos de tensión, compresión y cortante. a) La cuerda está en esfuerzo de tensión; b) la columna está en esfuerzo de compresión; c) pegamento está en esfuerzo cortante.....	11
Figura 2.2	Relación entre el esfuerzo y la rapidez de deformación para fluidos Newtonianos y no Newtonianos.....	19

CAPÍTULO 3

Figura 3.1	Evolución del sistema HPP.....	23
Figura 3.2	Paso de propagación y colisión.....	28

CAPÍTULO 4

Figura 4.1	Esquema de la rejilla para el método de Boltzmann.....	33
Figura 4.2	Modelos $D1Q3$, $D1Q5$, $D2Q9$, $D3Q15$, $D3Q19$	33
Figura 4.3	Principal algoritmo del LBM.....	37
Figura 4.4	Algoritmo de la rutina de inicialización.....	38
Figura 4.5	Bucle de iteración del LBM.....	39
Figura 4.6	Efecto de las condiciones de frontera Bounce-Back en los valores de la función de distribución.....	40
Figura 4.7	Forma cilíndrica del dominio cuando se aplican condiciones de contorno periódicas.....	41

Figura 4.8	Efecto de la condición de frontera periódica en el nodo frontera.....	41
-------------------	---	----

CAPÍTULO 5

Figura 5.1	Flujo de un fluido a través de un canal rectangular.....	43
Figura 5.2	Simulación con Lattice Boltzmann para un fluido Newtoniano $n = 1.0$	47
Figura 5.3	Simulación con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano $n = 0.33$	48
Figura 5.4	Simulación con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano $n = 0.56$	49
Figura 5.5	Simulación con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano $n = 2.0$	50
Figura 5.6	Paso de un fluido Newtoniano a través de un canal rectangular.....	62
Figura 5.7	Perfiles de velocidad para fluido Newtoniano y no Newtoniano, con Lattice Boltzmann en comparación con la solución analítica de las ecuaciones de movimiento para tamaño de rejilla de 24 X 24 (error entre ellas del 2.56%).....	68
Figura 5.8	Perfiles de velocidad para fluido Newtoniano y no Newtoniano, con Lattice Boltzmann en comparación con la solución analítica de las ecuaciones de movimiento para tamaño de rejilla de 64 X 64 (error entre ellas del 2.0%).....	69
Figura 5.9	Perfiles de velocidad para fluido Newtoniano y no Newtoniano, con Lattice Boltzmann en comparación con la solución analítica de las ecuaciones de movimiento para tamaño de rejilla de 114 X 114 (error entre ellas del 0.9%).....	70

RESUMEN

A principios de los 80's, el Método de Lattice Boltzmann (LBM) ha sido ampliamente utilizado por la comunidad científica como una alternativa a las soluciones numéricas convencionales para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes (NS). El presente trabajo de esta tesis tiene como objetivo mostrar el LBM para la dinámica fluidos. Los temas principales se concentran en tres aspectos: la descripción de la modelo y la validación del mismo.

En el capítulo 1, se muestran aspectos de las modelaciones como parte introductoria e importancia de las mismas para la solución de ecuaciones como son las que se presentan en la mecánica de fluidos. En el capítulo 2, se presentan algunos fundamentos de la mecánica de fluidos entre los que se encuentran las ecuaciones de continuidad y de movimiento, así como algunos tipos de fluidos. En lo que se refiere al capítulo 3, en este se presentan las dos formas de obtener las ecuaciones del RBM, pasando por los métodos de gases en redes, así como la ecuación de Boltzmann y la función de distribución de equilibrio, revisando la aproximación BGK. En el capítulo 4, se describe la técnica de redes de Boltzmann con el acercamiento BGK para una rejilla D2Q9, el cual fue utilizado para las simulaciones. Por último en el capítulo 5, se presentan los resultados de las simulaciones con el RBM aplicados al flujo de un fluido Newtoniano y no Newtoniano en un canal rectangular, para lo cual fue necesario realizar conversiones de unidades de redes a unidades físicas y viceversa, con la finalidad de realizar comparaciones entre la solución analítica y las simulaciones realizadas.

CONTENIDO

	Índice de cuadros.....	i
	Índice de figuras.....	ii
	Resumen.....	iv
CAPÍTULO 1	IMPORTANCIA DE LAS MODELACIONES Y LAS SIMULACIONES.....	1
CAPÍTULO 2	FUNDAMENTOS DEL FLUJO DE LOS FLUIDOS.....	10
	2.1 Introducción.....	10
	2.2 Enfoque microscópico y macroscópico de un fluido.....	12
	2.3 El fluido como medio continuo.....	14
	2.4 Las ecuaciones en la mecánica de fluidos.....	14
	2.5 Métodos computacionales.....	16
	2.6 Tipos de fluidos.....	16
	2.7 Regímenes de flujo.....	19
CAPÍTULO 3	BASES TEÓRICAS DEL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMANN.....	21
	3.1 Introducción.....	21
	3.2 Modelo de Autómata de Gas Reticular.....	22
	3.3 Modelo HPP.....	23
	3.4 Modelo FHP.....	24
	3.5 Modelo de Redes de Boltzmann a partir de modelos de gases en redes.....	24
	3.6 La ecuación de Boltzmann.....	25
	3.7 La ecuación de redes de Boltzmann.....	27
	3.8 Función de distribución de equilibrio.....	29
CAPÍTULO 4	EL MODELO DE REJILLA BHATNAGAR-GROSS-KROOK (LBGK).....	30
	4.1 Introducción.....	30
	4.2 La simulación de fluidos.....	30
	4.3 Descripción General del modelo LBGK.....	32
	4.4 Configuración de rejillas.....	33
	4.5 Cantidades macroscópicas.....	35
	4.6 Algoritmo del método de redes de Boltzmann.....	36
	4.6.1 Inicialización.....	37
	4.6.2 Bucle de iteración.....	39
	4.7 Condiciones de frontera.....	39

4.7.1 Fronteras Bounce-Back.....	40
4.7.2 Fronteras Periódicas.....	40
4.7.3 Fronteras de velocidad (fronteras Von Neumann), fronteras de presión (fronteras Dirichlet) y condiciones de frontera abiertas	42
CAPÍTULO 5 SIMULACIÓN DE UN FLUIDO NEWTONIANO Y NO NEWTONIANO A TRAVES DE UN CANAL RECTANGULAR.....	43
5.1 Solución analítica del paso de un fluido a través de un canal rectangular.....	43
5.2 Simulaciones con redes de Boltzmann.....	47
5.3 Solución analítica de la ecuación de Navier– Stokes para un fluido Newtoniano y no Newtoniano.....	62
CONCLUSIONES	71
REFERENCIAS	72

CAPÍTULO I. IMPORTANCIA DE LAS MODELACIONES Y LAS SIMULACIONES

En la solución de problemas y el desarrollo de sistemas de procesos químicos o bioquímicos, el ingeniero químico se ve enfrentado a realizar algún tipo de análisis para la formulación de alternativas y selección de alguna propuesta de solución. El *análisis* significa examinar un sistema para identificar sus elementos constitutivos, relaciones y escritura, con el propósito de conocer sus características y funcionamiento.

Es amplio el ámbito de problemas y variados los objetivos en los que resulta de utilidad el análisis en ingeniería química. La investigación y el desarrollo de procesos, el diseño, el mejoramiento y la optimización de procesos, operaciones y equipos, son áreas en donde con mayor frecuencia se realizan estudios analíticos. Y en cualesquiera de ellas, los problemas objeto de análisis generalmente involucran fenómenos de transferencia de cantidad de movimiento, transferencia de calor, transferencia de masa y cinética química.

Para llevar a cabo estos análisis es necesario que el ingeniero formule correctamente el problema u objeto de análisis, y lo interprete con ayuda de los conocimientos disponibles: leyes, principios, teorías, paradigmas, etc. Es decir, necesita del análisis, y utilizar las herramientas a disposición para generar la información requerida y aproximaciones a la solución de problemas a enfrentar.

La comprensión que se obtiene del sistema ofrece la posibilidad de usar modelos para simular su comportamiento, sin intervención en el sistema real, cambiando parámetros y condiciones de variables, con el fin de decidir sobre las transformaciones que deben introducirse para obtener un comportamiento deseado, o para diseñar y generar uno completamente nuevo.

Las soluciones analíticas se limitan a problemas que se simplifican al eliminar un número considerable de términos en las ecuaciones fundamentales, lo que conlleva a una idealización de los mismos. La configuración geométrica debe ser tal que toda su superficie se pueda describir matemáticamente en un sistema de

coordenadas al igualar las variables a constantes. Es decir, deben ajustarse a configuraciones geométricas regulares. Más aún, en las configuraciones sencillas los problemas de la mecánica de fluidos no se pueden resolver en forma analítica si las condiciones límite no son suficientemente simples.

Se dice que las soluciones analíticas son exactas por que no comprenden aproximaciones. Pero esta afirmación necesita ser aclarada. Se debe establecer una distinción entre un problema del mundo real y el modelo matemático, que es una representación idealizada de él. Los resultados que se obtienen son las soluciones de los modelos matemáticos, y el grado de aplicabilidad de estas soluciones a los problemas físicos reales depende de la precisión del modelo. Una solución “aproximada” de un modelo real de un problema físico suele ser más precisa que la solución “exacta” de un modelo matemático burdo, ver figura 1.

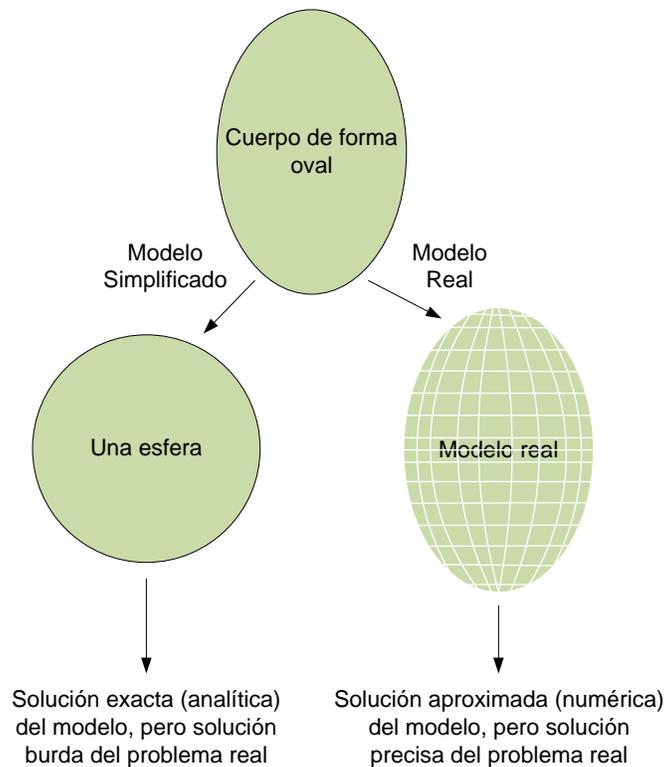


Figura 1.1 La solución numérica aproximada de un problema real puede ser más precisa que la solución exacta (analítica) de un modelo simplificado en exceso de ese problema

Un dispositivo o proceso de ingeniería se puede estudiar ya sea de forma *experimental* (haciendo pruebas y tomando mediciones) o analíticamente (por medio de análisis o cálculos). El enfoque experimental tiene la ventaja de que trata con el sistema físico real y la cantidad deseada se determina por medición, dentro de los límites del error experimental. No obstante, este procedimiento es caro, tardado y, a menudo, poco práctico. El procedimiento analítico (incluye el numérico también) tiene la ventaja de que es rápido y no tan caro, pero los resultados obtenidos están sujetos a la exactitud de las hipótesis, aproximaciones e idealizaciones establecidas en el análisis.

Las descripciones de la mayor parte de los problemas científicos comprenden ecuaciones que relacionan los cambios entre sí en algunas variables clave. Por lo general, cuanto más pequeño sea el incremento elegido en las variables cambiantes, mas general y exacta es la descripción. En el caso límite de cambios infinitesimales o diferenciales en las variables, se obtienen *ecuaciones diferenciales* que suministran formulaciones matemáticas precisas para los principios físicos y leyes para representar las razones de cambio como *derivadas*. Por lo tanto, las ecuaciones diferenciales se usan para investigar una amplia variedad de problemas en las ciencias y la ingeniería, ver figura 2.

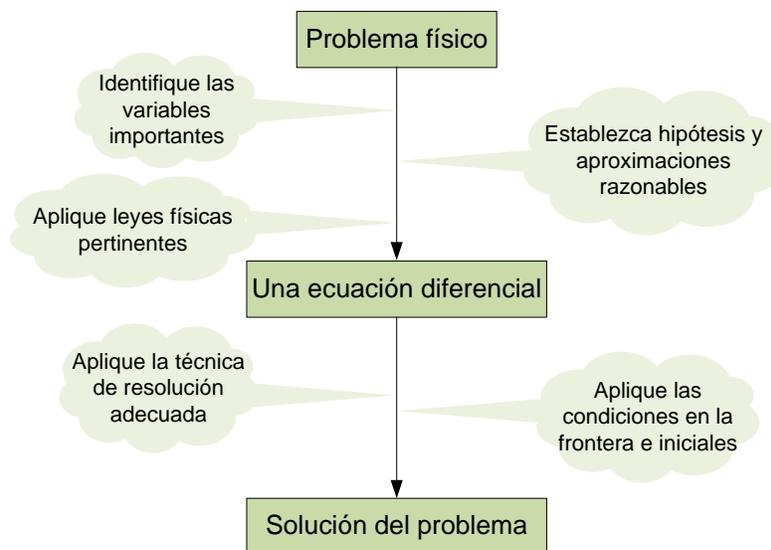


Figura 1.2 Modelado matemático de los sistemas físicos

El estudio de los fenómenos físicos comprende dos pasos importantes. En el primero se identifican todas las variables que afectan a los fenómenos, se establecen hipótesis y aproximaciones razonables y se estudia la interdependencia de estas variables. Se apela a las leyes físicas y los principios pertinentes y el problema se formula en términos matemáticos. La propia ecuación resulta muy instructiva, ya que muestra el grado de dependencia de algunas variables en relación con otras y la importancia de los diversos términos. En el segundo paso el problema se resuelve aplicando un procedimiento adecuado y se interpretan los resultados.

En el análisis de sistemas de ingeniería química es un proceso sistemático que entre sus etapas involucra la descripción matemática del sistema, la manipulación del modelo matemático, la comparación de los resultados suministrados por el modelo con la situación real y el estudio cuidadoso de las limitaciones del modelo, para efectos de la toma de decisiones de acuerdo con el objetivo último del análisis. Este proceso puede organizarse como una secuencia lógica de las siguientes etapas generales: 1) definición del problema, 2) teoría, 3) modelo matemático, 4) algoritmo, 5) soluciones y 6) análisis de la solución.

1. La definición del problema es una de las etapas más importante, porque es la que establece el objetivo del análisis. Normalmente este objetivo está asociado a un requerimiento de información sobre el comportamiento del sistema, para efectos de su diseño, transformación, control o cualquier otra situación relacionada con dicho sistema.

2. La segunda etapa es una definición o búsqueda de la teoría que explica el fenómeno o conjunto de fenómenos presentes en el sistema bajo análisis. Generalmente esta teoría existe, pero, en caso contrario, la solución del problema requiere inicialmente una investigación, en la que deben formularse hipótesis o postularse una teoría y constatar su validez, mediante la comparación de resultados experimentales con una solución obtenida con un modelo matemático construido con base en esta teoría.

3. *Una vez conocida la teoría, el problema se convierte en un problema matemático, mediante la definición de variables y parámetros, y la construcción de un modelo matemático ensamblado con el conjunto de relaciones o ecuaciones entre parámetros y variables asociadas a características del sistema objeto de análisis.*
4. *El algoritmo de solución o procedimiento de solución del problema matemático, esta construido por el conjunto de etapas secuenciales de operación sobre el modelo para obtener los valores de las variables desconocidas.*
5. *La ejecución de las operaciones específicas y detalladas en el algoritmo proveen una solución del problema.*
6. *Esta solución es posible obtenerla mediante técnicas analíticas, cuando existen estos procedimientos y los modelos no son ni muy extensos ni muy complejos, o mediante métodos numéricos para modelos extensos y complejos, o para los cuales no existen las técnicas analíticas de solución. Ambos procedimientos se pueden desarrollar manualmente, pero hoy es posible generar la solución del problema matemático con el uso de computadoras como herramienta y con lenguajes de programación.*

En relación al último punto nos centraremos en lo que sigue de este capítulo.

La mayor parte de los cálculos que realizaban los ingenieros antes de que aparecieran las calculadoras de mano (antes de 1970), era la regla de cálculo, ver figura 3.

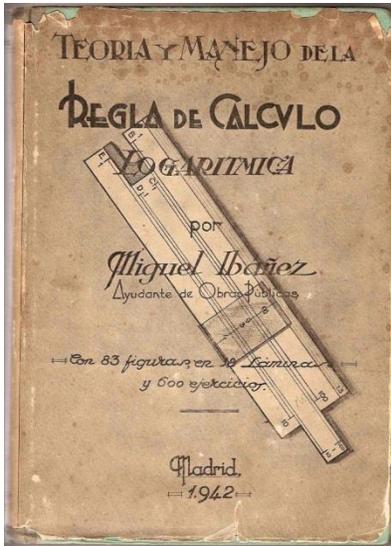


Figura 1.3 Manual de regla de cálculo editado en 1942

Esta forma de trabajar requería realizar las operaciones aritméticas de forma separada y escribir sus resultados. La precisión máxima que se conseguía a partir de estos cálculos era como mucho de tres dígitos decimales. Si se detectaba un error de cálculo, se tenían que repetir todos los cálculos aritméticos y los realizados con la regla de cálculo, desde el punto en donde se había detectado el error. Los resultados se escribían a máquina y los gráficos se solían dibujar a mano. Las propiedades físicas y termodinámicas, dependientes de la temperatura o de la composición, que se necesitaba para la resolución del problema se representaban con gráficos y nomogramas. Los valores se leían con una línea recta trazada con una regla entre dos puntos. La precisión máxima conseguida de los valores obtenidos utilizando esta técnica era solo de dos dígitos decimales. En resumen, la resolución de problemas de forma manual era tediosa, consumía mucho tiempo y era un proceso propenso a los errores.

Durante la era de la regla de cálculo, se desarrollaron varias técnicas que permitieron resolver problemas reales a partir de los instrumentos disponibles en esa época. Se preferían las soluciones analíticas (de forma cerrada) de los problemas antes que las numéricas. Sin embargo, en muchos casos, era difícil o casi imposible encontrar soluciones analíticas. En estos casos, se dedicaba un

esfuerzo considerablemente en manipular el modelo de ecuaciones del problema para transformarlo en un modelo que se pudiese solucionar. Las simplificaciones de los modelos se llevaban a cabo despreciando los términos de la ecuación que se consideraban poco importantes. Se desarrollaron técnicas de resolución simplificadas que consistían en transformar un problema complejo en un problema simple que pudiera ser resuelto. Las técnicas de resolución gráfica, como los métodos de McCabe-Thiele y Ponchon-Savarit para el diseño de columnas de destilación, se utilizaron ampliamente.

Con la aparición de computadoras digitales a comienzo de la década de 1960 se vio claramente la utilidad de las computadoras en la resolución de problemas complejos en ingeniería- uno de los primeros libros de texto sobre la resolución numérica de problemas de ingeniería química fue el de Lapidus. El libro de texto de Canahan, Luther y Wilkes sobre métodos numéricos y el libro de texto de Henley and Rosen sobre balances de materia y energía contienen muchos ejemplos de resolución numérica de problemas, así como los programas de software asociados para grandes computadoras (escritos en lenguaje de programación FORTRAN). En esta época, la solución de un problema de ingeniería, utilizando computadoras digitales, incluía los siguientes pasos: 1) derivar el modelo de ecuaciones para el problema a resolver, 2) encontrar el método numérico adecuado (algoritmo) para solucionar el modelo, 3) escribir y compilar el programa en el computador (utilizando el lenguaje FORTRAN) para solucionar el problema utilizando el algoritmo anterior, 4) validar los resultados y preparar el informe.

La resolución de problemas utilizando métodos numéricos con las primeras computadoras digitales era muy tediosa y consumía mucho tiempo. Requería un alto conocimiento de programación y de métodos numéricos para poder realizar los pasos 2) y 3) del proceso de resolución del problema. Así, entre los años de la década de 1960 y 1980, se utilizaron computadoras sólo para la resolución de problemas complejos a gran escala.

A través de la historia, las matemáticas y en consecuencia los métodos numéricos han jugado un rol muy importante y han sido utilizados para resolver y explicar

fenómenos y que habían quedado sin resolver, en décadas pasadas. Sin embargo, los paquetes de software matemático comenzaron aparecer en el decenio de 1980 después de la introducción de los computadores personales de APPLE e IBM.

A lo largo de las últimas décadas se han acumulado una gran cantidad de experiencias en el diseño y uso de los lenguajes de programación. A pesar de que existen todavía aspectos del diseño de los lenguajes de programación que no se han entendido completamente, los principios básicos y los conceptos corresponden ahora al acervo fundamental de conocimientos de la ciencia de la computación. Hoy en día existen muchos lenguajes de programación, entre los que se encuentran C, Java, C++, Ada, ML, LISP, FORTRAN, Pascal y Prolog, por mencionar algunos.

Como se ha mencionado en párrafos anteriores, es imposible en muchos campos recurrir a soluciones analíticas debido a la tremenda complejidad de los sistemas que estudia la dinámica de fluidos, por lo que se recurre a soluciones numéricas que pueden ser computadas por ordenadoras.

Surge así una rama de la dinámica de fluidos denominada “Computational fluid dynamics” (CFD) por su siglas en inglés, que se basa en aproximaciones numéricas de las ecuaciones físicas empleadas en la dinámica de fluidos.

La historia de la CFD, va ligada a la evolución de los ordenadores y surgió en la década de los 70's como medio para simular fluidos en movimiento. A principios de los 80's resolvían las ecuaciones de Euler en dos y posteriormente en tres dimensiones. A mediados de la década de los 80's se fue extendiendo el interés hacia fluidos viscosos y por tanto hacia la resolución completa de la ecuación de Navier-Stokes.

En los 90's el uso de la CFD se ha expandido de forma significativa a distintas aplicaciones y procesos industriales en los que intervienen los procesos de transferencia de calor, reacciones químicas (como combustión), flujos bifásicos, cambios de fase, flujos turbulentos y procesos de transferencia de masa, por citar algunos.

Hoy en día, son múltiples los campos a los que se aplican los CFD's, por ejemplo la industria automotriz, donde se puede simular el comportamiento aerodinámico del coche, de hecho las escuderías de fórmula uno emplean este tipo de software para mejorar el rendimiento de sus coches. También en el ámbito deportivo el uso de los CFD's en estudios aerodinámicos en el ciclismo, de diseño de embarcaciones e incluso en diseño de ropa de baño de alta competición, ver figura 4.

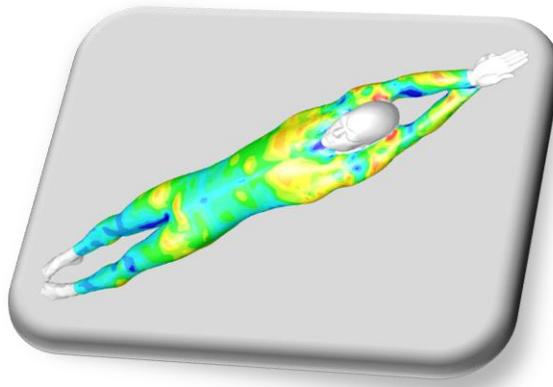


Figura 1.4 Simulación del campo de presiones con el uso de CFD

El método de redes de Boltzmann es un acercamiento relativamente nuevo a las simulaciones hidrodinámicas. A diferencia del método tradicional de los CFD's, el soporte físico de redes de Boltzmann se basa en la teoría cinética y es un enfoque de un nivel mesoscópico hacia un macroscópico. Es decir, en la teoría cinética, el movimiento del fluido se describe en el nivel de colisión de partículas.

Recientemente se ha hecho mucho esfuerzo en investigar el uso de Redes de Boltzmann para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes. Ha sido un área de investigación muy activa en CFD desde hace veinte años.

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTOS DEL FLUJO DE LOS FLUIDOS

2.1 Introducción

La mecánica es la ciencia física más antigua que trata tanto de los cuerpos en reposo así como de aquellos en movimiento bajo la influencia de fuerzas. La rama de la mecánica que trata de los cuerpos en reposo se llama estática, y la que trata de los cuerpos en movimiento se llama dinámica. La subcategoría mecánica de fluidos se define como la ciencia que estudia el comportamiento de los fluidos en reposo (estática de fluidos) o en movimiento (dinámica de fluidos), y la interacción de estos con los sólidos o con otros fluidos en las fronteras.

La mecánica de fluidos también se divide en varias categorías. El estudio del movimiento de fluidos que son prácticamente incompresibles (como los líquidos, en especial el agua y los gases a bajas velocidades) suele mencionarse como hidrodinámica. Una subcategoría de ésta es la hidráulica, que estudia los flujos de líquidos en tubos y canales abiertos. La dinámica de gases trata del flujo de fluidos que sufren cambios significativos en la densidad, como el flujo de gases a través de toberas a altas velocidades. La categoría aerodinámica se ocupa del flujo de gases (en especial el aire) sobre los cuerpos como aviones, cohetes y automóviles a altas o bajas velocidades. Algunas otras categorías como la meteorología, la oceanografía y la hidrología tratan de flujos que ocurren de manera natural. Otra ciencia que estudia la continuidad y deformación de los cuerpos aparentemente continuos y coherentes es la reología. En la actualidad se ha convertido en una herramienta básica para el manejo de fluidos, dimensionamiento de bombas e impulsores y diseño de biorreactores entre otros aspectos.

Ahora bien, el tratar de definir la palabra fluido, nos conlleva a un número de aspectos, por ejemplo, todos podemos pensar acerca de algunas cosas que obviamente son fluidos: aire, agua, gasolina, aceite para lubricación y leche entre otros. También podemos pensar acerca de algunas otras cosas que obviamente

no son fluidos: acero, diamantes, bandas de caucho y papel; a estos los denominamos sólidos. Pero existen algunos tipos intermedios de materia muy interesante: gelatina, crema de cacahuete, crema humectante para el cuerpo, mayonesa, pasta dentífrica, asfalto para impermeabilizar, engrudo, masa para pan y grasa automotriz, por mencionar algunos.

Para decidir que se quiere expresar mediante la palabra “fluido”, primero se tiene que considerar la idea de esfuerzo cortante. Es más fácil analizar el esfuerzo cortante en comparación con los esfuerzos de tensión y compresión (figura 2.1).

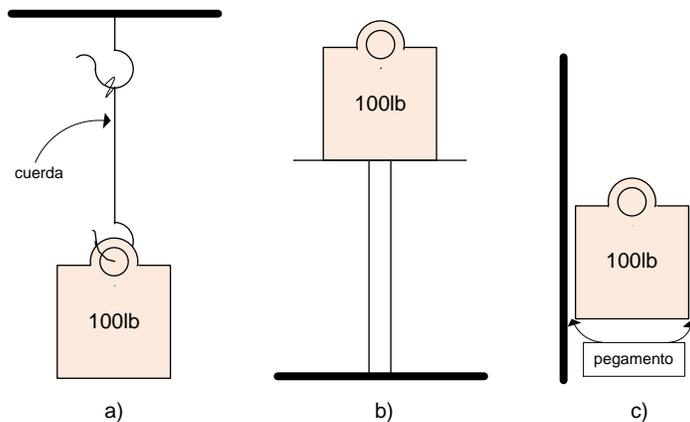


Figura 2.1 Comparación de esfuerzos de tensión, compresión y cortante. a) La cuerda está en esfuerzo de tensión; b) la columna está en esfuerzo de compresión; c) pegamento está en esfuerzo cortante

En la figura 2.1a, se muestra una cuerda que sostiene un peso. El peso ejerce una fuerza que tiende a jalar la cuerda. Un esfuerzo es la relación de la fuerza aplicada al área sobre la cual ejerce esta fuerza; es decir, fuerza por unidad de área. Así, el esfuerzo en la cuerda es la fuerza ejercida por el peso dividida entre el área transversal de la cuerda. La fuerza que trata de jalar cosas se denomina *fuerza de tensión* y el esfuerzo que causa se denomina *esfuerzo de tensión*.

En la figura 2.1b, se muestra una columna de acero que sostiene un peso. En este caso el peso ejerce una fuerza que tiende a aplastar la columna. Esta clase de fuerza se denomina *fuerza de compresión*, y el esfuerzo en la columna, la fuerza dividida entre el área transversal de la columna, se denomina *esfuerzo de compresión*.

Por último, en la figura 2.1c, un poco de pegamento sostiene un peso, que ejerce una fuerza que tiende a dirigirse hacia abajo por las paredes y de esta forma arrastrar el pegamento. Esta fuerza, la cual tiende hacer que una superficie se *deslice* paralela a una superficie adyacente, se denomina *fuerza cortante*, y el esfuerzo en el pegamento, la fuerza dividida entre el área de la junta de pegamento, se denomina *esfuerzo cortante*.

Los sólidos son sustancias que pueden resistir permanentemente fuerzas cortantes muy elevadas. Cuando se someten a una fuerza cortante, se mueven una distancia corta (deformación elástica), y por tanto desarrollan esfuerzos cortantes internos que resisten la fuerza externa, *y luego dejan de moverse*. Los materiales que obviamente son fluidos no pueden resistir de manera permanente una fuerza cortante, sin importar que tan pequeña sea. Cuando se someten a una fuerza cortante, comienzan a moverse *y continúan moviéndose durante la aplicación de la fuerza*.

Las sustancias intermedias entre sólidos y fluidos pueden resistir de forma permanente una fuerza cortante pequeña, pero no pueden resistir permanentemente una fuerza elevada. Por ejemplo, si se pone una gota de cualquier líquido en una pared vertical, la gravedad hará que se deslice hacia abajo por la pared. En cambio, si se sujeta de manera firme una pieza de acero o diamante a una pared, permanecerá allí, sin importar cuanto se espere. Si se coloca un poco de crema de cacahuate en una pared, probablemente permanecerá allí, pero si se incrementa el esfuerzo cortante sobre esta sustancia al untarla con un cuchillo, fluirá como un fluido.

2.2 Enfoque microscópico y macroscópico de un fluido

Un fluido puede ser descrito o caracterizado en tres niveles, (a) *Dinámica Molecular*, se basa en la mecánica Newtoniana y trabaja con la posición y la velocidad. El sistema normalmente mantiene el orden del número de Avogadro de moléculas. La descripción de la dinámica molecular incluye el seguimiento de las

trayectorias las cuales son acordes con la ecuación de Newton-Hamilton. (b) *Teoría cinética*, se sustenta en la termodinámica estadística de equilibrio y no-equilibrio y trabaja con la función de distribución de partículas (masa), definida como la densidad de probabilidad de que una partícula se encuentre en una posición x , en un tiempo t con una velocidad \mathbf{v} . La ecuación de cinética clásica es la célebre ecuación de Boltzmann; y (c) *Hidrodinámica*, se apoya en las leyes de conservación de la física macroscópica, en la que el fluido se trata como un continuo, y caracterizado por medio de variables tales como densidad (ρ), velocidad (\mathbf{v}), presión (P), temperatura (T), etc. Las variables continuas resultan del promedio colectivo de un gran número de trayectorias individuales. Este es el nivel macroscópico en el cual el fluido es gobernado por la ecuación de continuidad, ecuaciones de Navier-Stokes (ENS) y la ecuación de energía. La teoría cinética juega un papel de puente para relacionar las propiedades moleculares de los coeficientes de transporte en el nivel de la hidrodinámica del continuo. El número de Knudsen, definido como $Kn = \ell/L$, que usa como una medida conveniente para categorizar el régimen del flujo. Aquí, L es la longitud macroscópica característica del flujo y ℓ es la longitud media entre las moléculas (mean free path). Los modelos continuos que se basan en las ENS y la ecuación de Euler son generalmente válidos cuando $Kn < 0,01$, pero pueden ampliar su aplicación dentro del régimen de flujo-deslizado ($0,01 < Kn < 0,1$), utilizando unas apropiadas condiciones de frontera. Mientras el modelo de partículas discretas que se basa en la ecuación de Boltzmann gobierna casi todos los regímenes de flujo ($Kn < 100$). Indiscutiblemente, las aproximaciones numéricas que usan la ecuación de Boltzmann son fundamentales y convenientes para amplios rangos de aplicaciones prácticas.

2.3 El fluido como medio continuo

Desde el punto de vista de la mecánica de fluidos interesa el comportamiento del material en un sentido global, macroscópico, considerándolo en su conjunto como un medio continuo y por ende sin vacíos intermedios.

Un medio continuo se caracteriza por que sus átomos o moléculas, están tan próximos unos con otros, que el conjunto puede considerarse macroscópicamente como una masa homogénea, cuyo comportamiento puede preverse sin tener en cuenta el movimiento de cada una de sus partículas elementales que lo componen. En este sentido se supone que no existen vacíos o separaciones entre las partículas.

En un medio continuo pueden definirse propiedades intensivas y extensivas. Las propiedades intensivas, o de intensidad, no dependen de la cantidad de materia involucrada, de modo que pueden asociarse a un punto. Ejemplos son la temperatura, humedad, color, presión, porosidad, electricidad y otras similares.

Las propiedades extensivas, o de extensión por el contrario dependen de la cantidad de materia que se considere. Este es el caso del calor, peso, masa, energía, forma y otras.

2.4 Las ecuaciones en la mecánica de fluidos

El movimiento de fluidos puede tener una gran variedad de comportamientos tanto para flujos simples, así como complejos (sistemas biológicos y alimentarios). Aunado a esto, de acuerdo al número de Reynolds, con este se podría saber si el flujo está en régimen laminar o pudiendo inclusive tratarse de flujo turbulento. El movimiento de fluidos es gobernado en forma general por la ecuación de continuidad.

La conservación de masa es el principio básico del movimiento de los fluidos, la cual requiere que cuando el fluido está en movimiento, se mueva de manera que la masa se conserve.

Una manera de obtener la ecuación de continuidad, es considerar un elemento de volumen fijo en el espacio, dentro del campo de velocidades de un fluido, al cual se le aplica un balance de materia, obteniendo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \quad (2.1)$$

Las ecuaciones de continuidad son cinemáticas ya que describe el movimiento de un cuerpo sin considerar las causas que lo producen.

Por otra parte, la ecuación de Navier-Stokes que en términos generales corresponde a la aplicación de la segunda ley de Newton de la mecánica clásica al movimiento del fluido, se describe de la siguiente manera

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

Para un fluido con velocidad \mathbf{v} , densidad ρ , presión p y viscosidad cinemática de cizalla μ . La ecuación de Navier-Stokes es una ecuación diferencial parcial de segundo orden, la cual puede tener una solución analítica solamente para un número reducido de casos, en donde la mayoría de los términos en las ecuaciones componentes se eliminan y las ecuaciones diferenciales resultantes son solucionables de manera analítica. Por desgracia, en la literatura no existen muchas soluciones analíticas conocidas y que estén disponibles; de hecho, puede contarse el número de estas soluciones con los dedos de pocos estudiantes. La mayoría de los problemas prácticos de la mecánica de fluidos no puede resolverse de manera analítica y demanda o 1) mayores aproximaciones o 2) ayuda de computadora, que con el avance tecnológico de las estas, hoy en día resulta posible hacer simulaciones numéricas de flujo de fluidos.

2.5 Métodos computacionales

Como se mencionó en el capítulo uno, tal vez el método más popular en la Dinámica de Fluidos Computacional (DFC), es la solución numérica de la ecuación de Navier-Stokes. Un ejemplo sencillo es, dada la ecuación de Navier-Stokes y tomando un grupo de condiciones de frontera e iniciales apropiado, es posible la solución en una retícula, por diferencias finitas entre otros métodos. Estos trabajos pueden resultar cómodos para flujos simples, no siendo así para flujos complejos o bien en geometrías complejas.

Un camino para la simulación de flujo de fluidos con ayuda de una computadora, es la aproximación en la que se consideran moléculas individuales.

La principal “desventaja” con ésta aproximación es que se requiere de computadoras de gran capacidad, y en muchas simulaciones toma horas el cómputo para pasos de tiempo pequeños. El sistema debe ser actualizado en estos, y la nueva posición y velocidad de todas las partículas se calcula a cada tiempo de paso, para conocer sus posiciones y velocidades previas, tomando en cuenta interacciones y alguna fuerza externa que actúe en las moléculas. Algunas partículas que chocan durante los tiempos de paso previo, tienen que ser identificadas y por tanto tienen que ser calculadas sus nuevas trayectorias.

2.6 Tipos de fluidos

Existen básicamente tres tipos de fluidos desde el punto de vista de la dinámica de fluidos, los cuales se les denomina Newtonianos, no-Newtonianos y Viscoelásticos.

Un esquema general que muestra los tipos de fluidos es el siguiente:

		Fluidos no newtonianos			
		Independientes del tiempo		Dependientes del tiempo	
Fluidos Newtonianos	sin esfuerzo inicial	con esfuerzo inicial	Tixotrópicos	Reopéticos	Viscoelásticos
	<ul style="list-style-type: none"> • Pseudoplásticos • Dilatantes 	Plásticos			

Cuadro 2.1 Tipos de fluidos

Fluidos Newtonianos. En este tipo de fluido la fuerza de cizalla o de corte por unidad de área es proporcional al gradiente de la viscosidad

$$\tau_{xy} = -\mu \left(\frac{dv_x}{dy} \right) \quad (2.3)$$

En la ecuación (2.3), τ_{xy} es el esfuerzo de corte, dv_x/dy es la velocidad de deformación y μ es la viscosidad. Todos los gases, agua líquida y líquidos de moléculas sencillas (amoníaco, alcohol, benceno, petróleo, cloroformo, butano, etc.) son newtonianos. Muchos materiales alimenticios como leche, jugo de manzana, jugo de naranja, vino y cerveza tienen un comportamiento newtoniano.

Fluidos Pseudoplásticos. Son aquellos líquidos cuya viscosidad disminuye con el incremento del gradiente de velocidad; estos comienzan a fluir tan pronto como se les aplica un esfuerzo cortante. Por lo general pueden representarse mediante una ecuación exponencial, que suele llamarse ecuación de Ostwald-de Waele

$$\tau_{yx} = k \left(-\frac{dv_x}{dy} \right)^n \quad (n < 1), \quad (2.4)$$

En la ecuación (2.4), τ_{yx} es el esfuerzo de corte, dv_x/dy es la velocidad de deformación, k es el índice de consistencia y n es el índice de comportamiento al

fluido. Ejemplos de fluidos pseudoplásticos son: algunos tipos de ketchup, mostaza, algunas clases de pinturas, suspensiones acuosas de arcilla, etc.

Fluidos Dilatantes. Estos líquidos, la viscosidad aumenta con el incremento del gradiente de velocidad. Estos fluidos son mucho menos comunes que los Pseudoplásticos. Para caracterizarlos, puede aplicarse la expresión (2.4), pero para valores de $n > 1$. Ejemplos de este tipo de fluidos son: la harina de maíz, las disoluciones de almidón muy concentradas, la arena mojada, dióxido de titanio, etc.

Fluidos con esfuerzo inicial: Plásticos de Bingham. Son materiales que poseen una estructura determinada, por lo que, para que se comporten como un fluido, es necesario romper esa estructura. Por esta razón, estos materiales comienzan a fluir para un valor de $\tau > \tau_0$, donde τ_0 es el esfuerzo cortante inicial que se requiere aplicar para destruir la estructura. Su modelo reológico es de la siguiente forma

$$\tau = \tau_0 + \mu \dot{\gamma} \quad \text{para } |\dot{\gamma}| > \dot{\gamma}_0, \quad (2.5)$$

En la ecuación (2.5), μ es la viscosidad cinemática. Otro tipo de fluido que entra en esta clasificación son los Casson.

La figura siguiente muestra la relación entre el esfuerzo de corte (τ) y la rapidez de deformación cortante ($\dot{\gamma}$). Algunos ejemplos de comportamiento plástico son el chocolate, la arcilla, la mantequilla, la mayonesa, la pasta de dientes, las emulsiones, las espumas, etc.

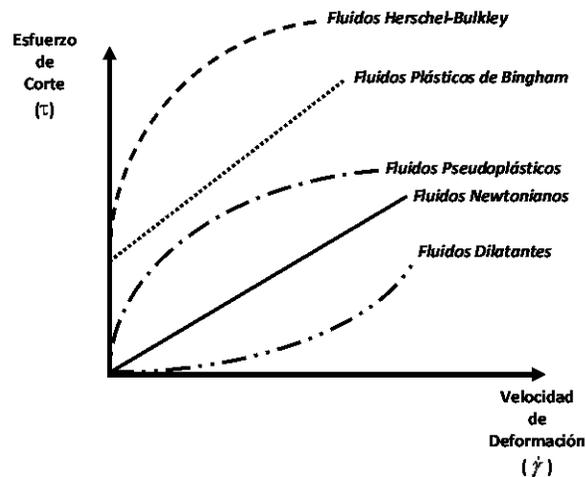


Figura 2.2 Relación entre el esfuerzo y la rapidez de deformación para fluidos Newtonianos y no Newtonianos

Fluidos dependientes del tiempo. Existen sustancias no Newtonianas que, al ser sometidas a un gradiente de velocidad constante durante un periodo de tiempo, sus viscosidades cambian en el tiempo. Este es el caso de los materiales tixotrópicos, en los que la viscosidad disminuye con el tiempo. Por otra parte existen los fluidos reopécticos, en los que, por el contrario, la viscosidad aumenta con el tiempo.

2.7 Regímenes de flujo

El flujo de un fluido a velocidades bajas, donde las capas de fluido parecen desplazarse unas sobre otras sin remolinos o turbulencias, se llama flujo laminar. A velocidades altas, donde se forman remolinos que imparten al fluido una naturaleza fluctante, se llama flujo turbulento. La existencia de flujo laminar y turbulento puede visualizarse con facilidad por medio de las investigaciones Oswald Reynolds, quien demostró que los dos regímenes antes mencionados en tuberías, dependen del diámetro de tubería, de la densidad, la viscosidad del fluido y de la velocidad del flujo.

El número de Reynolds para un fluido Newtoniano está dado por la siguiente expresión

$$\text{Re} = \frac{Dv\rho}{\mu}, \quad (2.6)$$

En la ecuación (2.6), Re es el número de Reynolds, D es el diámetro, ρ es la densidad y μ es la viscosidad.

Para el caso de fluidos no-Newtonianos, se utiliza el Reynolds generalizado

$$\text{Re}_{\text{generalizado}} = \frac{D^3 v^{2-n} \rho}{8^{n-1} k} \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n, \quad (2.7)$$

En la ecuación (2.7), Re_{gen} es el número de Reynolds generalizado, ρ es la densidad, v es la velocidad promedio, k es el índice de consistencia y n es el índice de comportamiento al fluido. Para el caso de un fluido incompresible, cuando el número de Reynolds es menor a 2100 el flujo es laminar, para valores superiores a 10000, el flujo es turbulento completamente desarrollado.

CAPITULO 3. BASES TEÓRICAS DEL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMANN

3.1 Introducción

La simulación del comportamiento de fluidos realizado por ordenadores de gran capacidad, se ha realizado tradicionalmente desde dos puntos de vista complementarios pero contrapuestos, el nivel microscópico y el macroscópico. En el primer nivel, se resuelven numéricamente las ecuaciones de Newton que gobiernan la dinámica de todas las moléculas del fluido. Y en lo que respecta al nivel macroscópico, las simulaciones se basan en la solución numérica de las ecuaciones de la hidrodinámica.

En el nivel microscópico el fluido está descrito por las posiciones y velocidades de las moléculas o átomos que lo constituyen, la interacción de estas partículas se modela a través de potenciales efectivos (como por ejemplo el potencial de Lennard-Jones). Existen principalmente dos técnicas básicas para la simulación del sistema desde el punto de vista microscópico: el método de Monte Carlo y la Dinámica Molecular.

Desde un punto de vista macroscópico, la simulación de fluidos se hace discretizando las ecuaciones de conservación de la masa, momento y energía que gobiernan los campos hidrodinámicos, lo que se conoce con el nombre de Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD). El caso más conocido en CFD es la solución numérica de las ecuaciones de NavierStokes. La resolución numérica de las ecuaciones hidrodinámicas para fluidos simples (Newtonianos) tiene una larga historia y se han utilizado una gran variedad de técnicas para la discretización espacial de dichas ecuaciones. Entre ellas se encuentran el método de diferencias finitas, elementos finitos, volúmenes finitos, y los métodos espectrales, por citar algunos.

En las dos décadas pasadas han aparecido una gran variedad de técnicas de simulación de fluidos que no se basan directamente en la discretización de las

ecuaciones de la hidrodinámica ni se corresponden con el nivel microscópico de la Dinámica Molecular. Estas técnicas se han venido englobando bajo el nombre de técnicas mesoscópicas de simulación. En términos generales estas técnicas discretas involucran colisiones de “partículas” que conservan la masa, el momento y, en algunos casos, la energía y, consecuentemente, dan lugar a un comportamiento hidrodinámico macroscópico. Estos métodos son capaces de capturar las propiedades hidrodinámicas con más eficiencia que la Dinámica Molecular. Estos métodos son el Lattice Gas Automata y el Lattice Boltzmann Equation.

3.2 Modelo de Autómata de Gas Reticular

El método de redes de Boltzmann tiene su origen en los llamados Autómatas de Gas Reticular o de Red (Lattice gas automata, LGA) fue inicialmente propuesto como una estrategia alternativa a la dinámica de fluidos computacional. Los gases reticulares pertenecen a una clase de autómatas celulares que se utilizan para simular sistemas fluidos. Un autómata celular consiste en una red regular cuyos nodos, los puntos de intersección de la red, pueden tener un conjunto finito de estados. El autómata evoluciona en pasos de tiempo discretos. El estado de cada nodo en cada instante está determinado por su propio estado y el estado del conjunto de los nodos vecinos en el paso de tiempo anterior. Esencialmente el LGA es una caricatura de la Dinámica Molecular porque se trata de “partículas” definidas exclusivamente con posiciones y velocidades, que se mueven libremente, en pasos discretos de tiempo, por una red regular. Esta técnica representa una enorme ventaja computacional, al tratarse de un sistema discreto, con partículas que interaccionan con potenciales tipo “esfera dura”.

3.3 Modelo HPP

El primer esfuerzo para simular sistemas de flujo de fluidos, fue la realizada en 1973 por Hardí, Pomeau, y de Pazzis, los cuales introdujeron el modelo HPP. En el cual, todas las partículas tienen masa y velocidad unitaria, las partículas son restringidas a viajar en eslabones o direcciones $(\mathbf{e}_i, i=1,..,4)$ de una rejilla cuadrada. Se utiliza una variable Boleana para indicar la presencia o la ausencia de una partícula de fluido en cada sitio de rejilla en una dirección dada. Una regla de exclusion es aplicada, es por esto, que solamente a una partícula se le permite viajar en cada dirección a lo largo del eslabón por etapa. Cuando varias partículas llegan a un sitio, estas colisionan de acuerdo a reglas de colisión pre-establecidas en el modelo. La colisión es gobernada por la conservación de la masa (o el número total de partículas) y conservación de momento. Si no se presentara dicha colisión, entonces las partículas continuarían su viaje en línea recta (ver figura 3.1 y 3.2). El modelo HPP es absolutamente estable, pero presenta falta de isotropía en algunos términos tensoriales involucrados en la ecuación de Navier-Stokes. Así mismo, los resultados del modelo no recuperan las ecuaciones de Navier-Stokes (ENS) en el nivel macroscópico. Esta deficiencia es debido al inadecuado grado de simetría rotacional de la rejilla cuadrada.

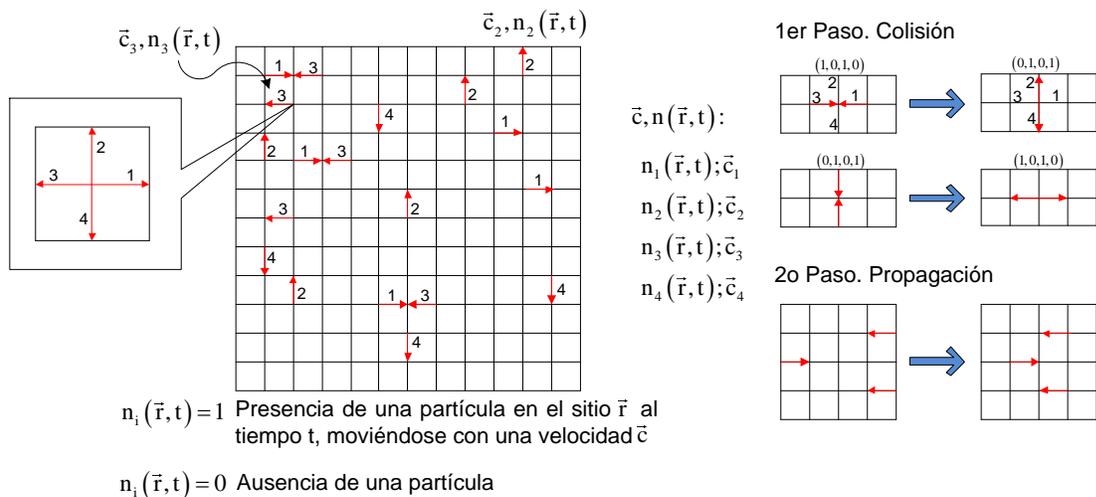


Figura 3.1 Evolución del sistema HPP

3.4 Modelo FHP

En 1986, Frisch, Hasslacher, y Pomeau descubrieron que las ENS pueden ser recobradas usando una rejilla hexagonal. Su modelo es conocido como el modelo FHP. Este modelo es similar al HPP, solo que las partículas con masa y velocidad unitaria se mueven en los vértices de una rejilla hexagonal discreta. Una variable Boleana es usada en cada dirección de la rejilla para indicar la presencia o la ausencia de una partícula en esa dirección. Las partículas son actualizadas por colisión y fluyendo. Las colisiones de las partículas son determinadas por una prescripción de reglas de colisión que contienen todos los posibles estados de colisiones. Este modelo presenta dos problemas principales, la presencia de ruido estadístico y la incapacidad para simular flujos en tres dimensiones.

3.5 Modelo de Redes de Boltzmann a partir de modelos de gases en redes

El modelo de redes de Boltzmann se ha desarrollado a partir del modelo de redes de gas. El modelo es actualizado en la misma forma como el modelo de redes de gas, excepto que ahora, en lugar de considerar “partículas” individuales viajando a lo largo de los vínculos de la retícula, es la función de distribución la que será analizada.

El primer MBE fue propuesto por McNamara y G. Zannetti en 1988 tratando de eliminar el ruido estadístico que presentaba su antecesor el FHP. La idea básica es simple; reemplazar el número de ocupaciones Boleano n_i por poblaciones promedio correspondientes $f_i = \langle n_i \rangle$. La ecuación en la forma de diferencias finitas no lineal para la función de distribución de una partícula f_i es $\Delta f_i = C_i(f_1, \dots, f_b)$. Esta es la primera ecuación de rejilla de Boltzmann, que se conoció como la LBE no lineal, la cual elimina el ruido estadístico, pero incluye un operador colisional multicuerpo matricial, muy complejo. La ecuación anterior presenta una inviabilidad para la simulación de tres dimensiones computacional, esto fue solucionado por Higuera y Jiménez, los cuales proponen finalmente la LBE

cuasilineal $\Delta f_i = A_{ij}(f_j - f_j^{\text{eq}})$. La no linealidad cuadrática es ahora incluida en el término local de equilibrio f_j^{eq} .

Ahora que dos problemas de los modelos de LGCA (FHP), ruido estadístico e inviabilidad práctica para simulaciones de tres dimensiones, han sido eliminados, se puede volver la atención a la tercera limitación principal del LGCA (FHP); números de Reynolds pequeños. Este problema se logró superar por Higuera, Succi y Benzi.

3.6 La ecuación de Boltzmann

Otro acercamiento a la ecuación de redes de Boltzmann es a través de la ecuación de Boltzmann, este tipo de métodos se basa en la aproximación del fluido como un gas rarificado (o gas diluido) de partículas. Tal gas rarificado puede ser descrito por la ecuación de Boltzmann, la cual fue derivada por primera vez en 1872 por Ludwig Boltzmann. Las ecuaciones de Navier-Stokes pueden obtenerse de la ecuación de Boltzmann en un cierto límite.

La ecuación de Boltzmann describe la evolución de la densidad de partículas o función de distribución $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, dicha función da la probabilidad continua dependiente del tiempo de encontrar una partícula de fluido dentro de un pequeño volumen ubicado en posición \mathbf{x} con una velocidad \mathbf{v} en el tiempo t , bajo condiciones de temperatura constante, y cuando no hay fuerzas externas actuando sobre el fluido. La función de distribución evoluciona de acuerdo a la siguiente ecuación cinética

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = \Omega(f) \quad (3.1)$$

El término de colisión referido a dos partículas $\Omega(f)$ en la ecuación (3.1) modela la forma en que la distribución cambia como resultado de la colisión entre estas

partículas. El término $\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{f}$ modela el cambio en la función de distribución como resultado de la propagación de las partículas debido a su movimiento. Las colisiones entre partículas generan un intercambio de energía y de momento, estos cambios se describen a través de la función de distribución f . La teoría cinética de los gases trata con la evolución en el tiempo de dichas funciones de distribución y relaciona cantidades macroscópicas tales como la densidad del fluido, la presión, la temperatura, entre otras.

En lo que refiere al término de colisión, en general tiene una forma integral compleja. En muchas aplicaciones de la teoría cinética a la dinámica de fluidos, se busca que la integral de colisión se aproxime a formas simples. Un ejemplo es la aproximación BGK (Bhatnagar–Gross–Krook), en esta se reemplaza el término $\Omega(f)$ por el término:

$$\Omega_{\text{BGK}}(f) = \frac{f^{\text{eq}} - f}{\tau}. \quad (3.2)$$

Este operador modela el efecto de la colisión como una relajación de la distribución hacia una distribución de equilibrio de Maxwell $f^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. El parámetro τ (tiempo de relajación) tiene dimensiones de tiempo y controla la frecuencia con que la función de distribución se relaja para alcanzar el equilibrio, es decir, este tiempo determina la tasa en que las fluctuaciones en el sistema conducen a este a un estado de equilibrio. La aproximación BGK es conocida como la aproximación de tiempo de relajación único, aunque existen otras aproximaciones de la integral de colisión, (por ejemplo, la descripción de colisión de tiempo de relajación múltiple). El acercamiento antes descrito, aun no es la técnica de redes de Boltzmann, lo que hace falta para serlo es la discretización del espacio fase de la misma.

3.7 La ecuación de redes de Boltzmann

Es importante mencionar que el espacio de velocidades en la ecuación de Boltzmann es continuo, esto significa que la partícula es libre de moverse con cualquier velocidad. Por lo que, lo primero es discretizar la ecuación (3.1) restringiendo el espacio de velocidades continuo a un conjunto discreto de velocidades \mathbf{e}_i donde $i = 0, 1, \dots, n-1$, es decir, ahora la partícula localizada en \mathbf{x} tiene una de las n velocidades \mathbf{e}_i . La función de distribución $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ se reduce a la función $f_i(\mathbf{x}, t)$, de esta forma, la ecuación discreta de Boltzmann con término de colisión BGK puede escribirse como

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + \tau) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)], \quad (3.3)$$

En la ecuación (3.3), $f_i(\mathbf{x}, t)$ es la probabilidad de encontrar una partícula con velocidad \mathbf{e}_i en la posición \mathbf{x} y tiempo t . En la ecuación anterior τ es el parámetro de relajación, el cual se relaciona con la viscosidad para simulaciones hidrodinámicas, $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ es la función de distribución de equilibrio. La elección de esta última, es muy importante ya que de ella depende recobrar las ecuaciones de Navier Stokes.

Prácticamente la ecuación (3.3), presenta dos pasos: propagación y la colisión. El primer paso está dado por la ecuación siguiente

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.4)$$

Y es la transferencia de direcciones específicas de las densidades f_i hacia los siguientes nodos vecinos de la rejilla. Esto puede ser entendido como si un grupo de partículas localizadas en los nodos se mueven a sus vecinos próximos modificando su densidad y por tanto su velocidad.

El paso de la colisión es la relajación de los valores de la nueva función de distribución, actualizada por el paso de propagación, hacia la distribución de equilibrio.

$$\omega = \frac{\Delta t}{\tau} (f_i^{\text{eq}} - f_i) \quad (3.5)$$

Este paso de colisión dado en la ecuación (3.5), introduce los efectos de las colisiones entre las partículas en el modelo. En la figura (3.2), se puede ver el efecto de la aplicación de los dos pasos en un nodo específico.

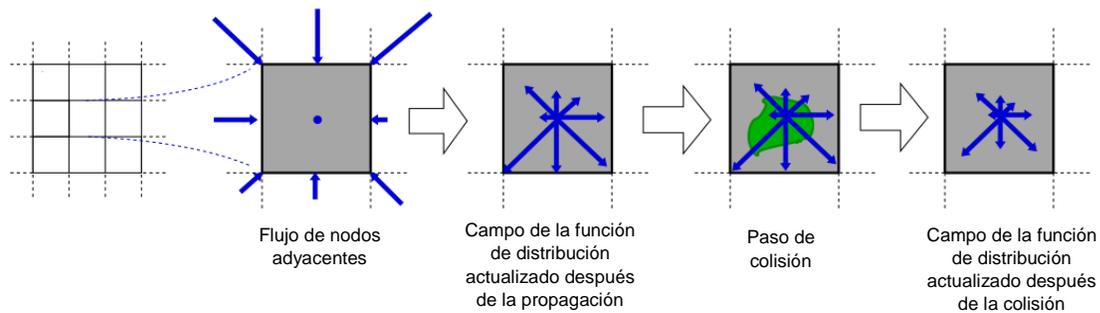


Figura 3.2. Paso de propagación y colisión

La longitud de las flechas representa los valores normalizados de la función de distribución para cada dirección discreta. Es importante notar que la longitud de las flechas no es homogénea. Si la partícula tiene velocidad nula (es decir, los valores de la función de distribución son los valores de la función de distribución de equilibrio) la longitud de las flechas sería homogénea. En este caso, el nodo tiene una velocidad dada, por tanto los valores de la función de distribución difieren de la función de distribución de equilibrio.

3.8 Función de distribución de equilibrio

La función de distribución de equilibrio f_i^{eq} que aparece en el operador de colisión es un elemento crucial en el método de redes de Boltzmann. Esta función de distribución es la distribución Maxwelliana de Boltzmann, que es expandida para números pequeños de Mach para asegurar que el fluido pueda considerarse incompresible.

La distribución normalizada de Maxwell-Boltzmann es

$$f_a = \frac{\rho}{2\pi/3} e^{-\frac{3}{2}(\mathbf{e}_a - \mathbf{u})^2} = \frac{\rho}{2\pi/3} e^{-\frac{3}{2}(\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_a)} e^{\frac{3}{2}(2\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u})} \quad (3.6)$$

Donde \mathbf{u} es la velocidad macroscópica y \mathbf{e} son los vectores de velocidad en la configuración de la rejilla.

Si la ecuación (3.6) es expandida usando la expansión polinomial de Taylor para exponenciales, se tiene la ecuación (3.7) de segundo orden para que coincida con el orden de las ecuaciones de Navier-Stokes.

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots \quad (3.7)$$

$$f_a = \frac{\rho}{2\pi/3} e^{-\frac{3}{2}(\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_a)} = \left[1 + 3(\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}) - \frac{3}{2}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u})^2 \right] \quad (3.8)$$

Así, la función de distribución de equilibrio toma la forma siguiente

$$f_a^{\text{eq}} = \rho \omega_a = \left[1 + 3(\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}) - \frac{3}{2}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u})^2 \right] \quad (3.9)$$

CAPITULO 4. EL MODELO DE REJILLA BHATNAGAR-GROSS-KROOK (LBGK)

4.1 Introducción

En la década de los ochenta, el método de la redes de Boltzmann ha surgido como una nueva y efectiva técnica numérica para la solución de ecuaciones de flujo de fluidos. El método ha demostrado habilidad para la simulación de sistemas hidrodinámicos, sistemas magnetohidrodinámicos, fluidos multifásicos y multicomponentes, incluyendo suspensiones, y emulsiones, flujos químicamente reactivos, y flujos multicomponentes a través de medios porosos, entre otros. En conjunto, con el uso de computadoras modernas de procesadores paralelizables, el método ha resultado ser muy eficiente para el estudio de sistemas complejos. Una de las ventajas más importantes es que el método es completamente paralelizable (se desarrollan los mismos cálculos en todos los sitios de la rejilla) y local (solamente para partículas que estén cercanas y que interactúen con otras), se tiene simplicidad al programar y la capacidad para incorporar modelos interaccionantes.

4.2 La Simulación de fluidos

La simulación del comportamiento de fluidos realizado por ordenadores de gran capacidad, se ha realizado tradicionalmente desde dos puntos de vista complementarios pero contrapuestos, el nivel microscópico y el macroscópico. En el primer nivel, se resuelven numéricamente las ecuaciones de Newton que gobiernan la dinámica de todas las moléculas del fluido. Y en lo que respecta al nivel macroscópico, las simulaciones se basan en la solución numérica de las ecuaciones de la hidrodinámica.

En el nivel microscópico el fluido está descrito por las posiciones y velocidades de las moléculas o átomos que lo constituyen, la interacción de estas partículas se

modela a través de potenciales efectivos (como por ejemplo el potencial de Lennard-Jones). Existen principalmente dos técnicas básicas para la simulación del sistema desde el punto de vista microscópico: el método de Monte Carlo y la Dinámica Molecular.

Desde un punto de vista macroscópico, la simulación de fluidos se hace discretizando las ecuaciones de conservación de la masa, momento y energía que gobiernan los campos hidrodinámicos, lo que se conoce con el nombre de Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD). El caso más conocido en CFD es la solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes. La resolución numérica de las ecuaciones hidrodinámicas para fluidos simples (Newtonianos) tiene una larga historia y se han utilizado una gran variedad de técnicas para la discretización espacial de dichas ecuaciones. Entre ellas se encuentran el método de diferencias finitas, elementos finitos, volúmenes finitos, y los métodos espectrales, por citar algunos.

En las dos décadas pasadas han aparecido una gran variedad de técnicas de simulación de fluidos que no se basan directamente en la discretización de las ecuaciones de la hidrodinámica ni se corresponden con el nivel microscópico de la Dinámica Molecular. Estas técnicas se han venido englobando bajo el nombre de técnicas mesoscópicas de simulación. En términos generales estas técnicas discretas involucran colisiones de "partículas" que conservan la masa, el momento y, en algunos casos, la energía y, consecuentemente, dan lugar a un comportamiento hidrodinámico macroscópico. Estos métodos son capaces de capturar las propiedades hidrodinámicas con más eficiencia que la Dinámica Molecular. Estos métodos son: redes de gas autómatas y el método de redes de Boltzmann.

4.3 Descripción General del modelo LBGK

En este método, un espacio de una rejilla se divide, la función de distribución de la partícula en cada sitio de la rejilla se representa por un grupo de números reales $f_i = f_i(\mathbf{x}, t)$, ver figura 4.1. Esto es, el número esperado de partículas para cada sitio de rejilla \mathbf{x} a tiempo t , moviéndose a lo largo del vector \mathbf{e}_i , en donde cada valor del índice i especifica una de las direcciones permitidas para el movimiento.

En forma general, la primera operación en cada paso de tiempo Δt para el cálculo, es denotar el avance de partículas al siguiente sitio de rejilla a lo largo de las direcciones de movimiento. El momento en dirección i referido al sitio \mathbf{x} al tiempo t , será justamente $f_i = f_i(\mathbf{x}, t)\mathbf{e}_i$. La segunda operación, es para simular los choques o colisiones de las partículas e involucra la llamada Ecuación de Redes de Boltzmann (LBE). Las reglas se seleccionan también para conservar la energía total y el momento en cada sitio de la rejilla.

Para asegurar que las partículas tengan velocidades promedio igual a cero en fronteras (para direcciones perpendiculares y paralelas en las paredes), lo más simple es proponer condiciones de frontera de "bounce-back": Para cualquier flux de partículas que impacten a una frontera, su velocidad después del impacto será automáticamente igual a cero, como se observa experimentalmente.

El resultado de las colisiones es simple, ya que se puede asumir que para toda i en toda \mathbf{x} el momento para las distribuciones interaccionantes podrá ser redistribuido a razón de alguna constante hacia una distribución de equilibrio f_i^{eq} .

Esta simplificación recibe el nombre de aproximación del tiempo único de relajación. En términos formales, la evolución en el tiempo de la distribución de la partícula está dada por la LBE (ver ecuación 3.3), que es la ecuación usada en el modelo LBGK.

El segundo término en el lado derecho de la ecuación (3.3) es la simplificación del operador de colisión Ω_i , para casos simples. La razón de cambio referida al equilibrio es $1/\tau$, que es la inversa del tiempo de relajación, y es elegida para producir el valor deseado de la viscosidad del fluido.

Aunque el LBM consiste de un simple grupo de reglas, estas pueden ser muy complicadas para fluidos complejos como los reaccionantes y multicomponentes.

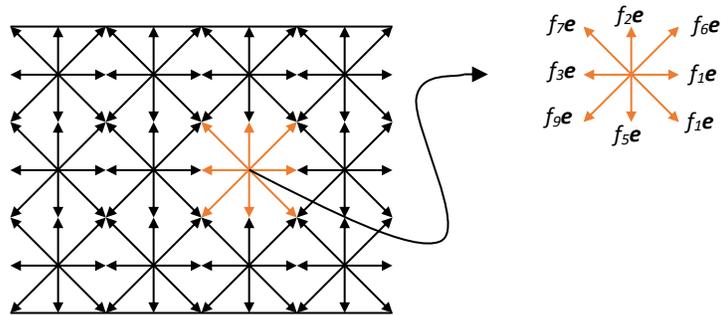


Figura 4.1 Esquema de la rejilla para el método de Boltzmann

4.4 Configuración de rejillas

En 1992 Qian y colaboradores, propusieron una familia de soluciones $DnQm$, en el cual n denota la dimensión y m la dirección de la velocidad, ejemplos de ellos se representan en la figura 4.2

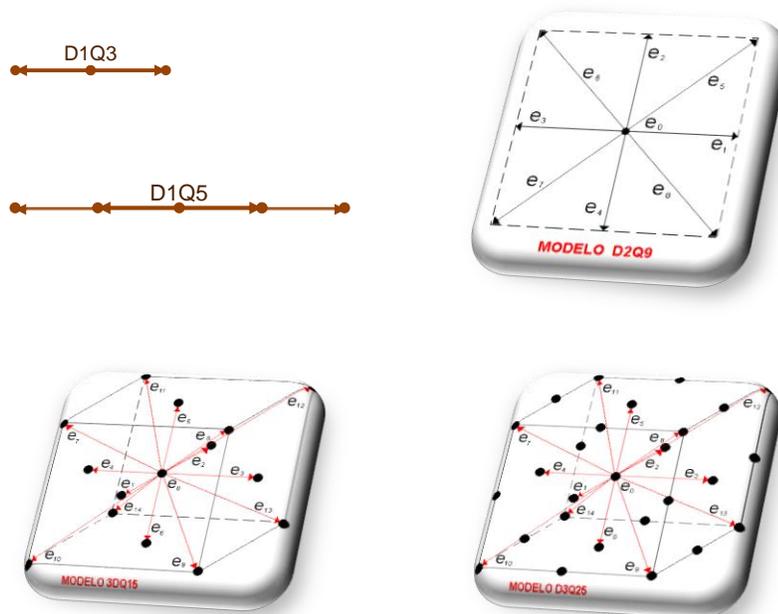


Figura 4.2 Modelos $D1Q3$, $D1Q5$, $D2Q9$, $D3Q15$, $D3Q19$

Las variables tales como la densidad y la velocidad son obtenidas por ensambles promedio de la función de distribución $f_i(\mathbf{x}, t)$. La densidad de partículas del fluido en un nodo en \mathbf{x} esta dada por el número total de partículas que se encuentra en el nodo, mientras que la velocidad del fluido está dada por el primer momento de velocidad de la función de distribución. Por ejemplo el D2Q9, indica un modelo en dos dimensiones con nueve posibles direcciones de velocidad, incluyendo la velocidad cero para partículas que se encuentran en el centro, con los siguientes vectores:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0 &= (0,0); & \mathbf{e}_1 &= (1,0); & \mathbf{e}_2 &= (0,1); \\ \mathbf{e}_3 &= (-1,0); & \mathbf{e}_4 &= (0,-1); & \mathbf{e}_5 &= (1,1); \\ \mathbf{e}_6 &= (-1,1); & \mathbf{e}_7 &= (-1,-1); & \mathbf{e}_8 &= (1,-1). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Los factores de peso del arreglo D2Q9 y que fueron utilizados para la presente tesis, son los siguientes

$$\omega_0 = \frac{4}{9}; \quad \omega_{1..4} = \frac{1}{9}; \quad \omega_{5..8} = \frac{1}{36} \quad (4.2)$$

El conjunto de velocidades discretas en el MLB respeta las propiedades de simetría e isotropía, la primera propiedad indica que el conjunto de velocidades \mathbf{e}_i es igual al conjunto de velocidades $-\mathbf{e}_i$. La segunda propiedad relacionada con la isotropía de la red, asume que los pesos w_i asociados con la velocidad de la red \mathbf{e}_i son los mismos para las velocidades de la red que tienen la misma magnitud, estos pesos satisfacen la siguiente relación.

$$\sum_i w_i = 1 \quad (4.3)$$

La isotropía requiere que los componentes de las velocidades \mathbf{e}_i cumplan las relaciones tensoriales

$$\sum_i w_i c_{i\mu} c_{i\nu} = c_s^2 \delta_{\mu\nu} \quad (4.4a)$$

$$\sum_i w_i c_{i\mu} c_{i\nu} c_{i\gamma} c_{i\delta} = c_s^4 (\delta_{\mu\nu} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\mu\gamma} \delta_{\nu\delta} + \delta_{\mu\delta} \delta_{\nu\gamma}) \quad (4.4b)$$

$\delta_{\mu\nu}$ es la delta de Kronecker y c_s es la rapidez del sonido ($c_s = c/\sqrt{3}$) de un fluido en equilibrio y es una constante para una determinada red.

4.5 Cantidades macroscópicas

La ecuación de Boltzmann trabaja en una escala microscópica y en ingeniería por lo general se tiene mayor relevancia en el diseño de equipos con variables a nivel macroscópico. Por lo tanto, sólo a través de estas variables macroscópicas, simulaciones o incluso los resultados obtenidos teóricamente se puede comparar con los datos experimentales.

Las variables macroscópicas pueden ser calculadas en una forma directa a partir de los valores de la función de distribución. La densidad

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int m f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3v \quad (4.5)$$

Y la velocidad macroscópica \mathbf{u} ,

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int m \mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3v \quad (4.6)$$

Así, en el dominio discreto el cálculo de estas variables macroscópicas es el siguiente

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &= \sum_{i=1}^n f_i(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_{i=1}^n f_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_i\end{aligned}\tag{4.7}$$

En la ecuación (4.7), n es el número de velocidades discretas de acuerdo al modelo escogido, y la masa ha sido escogida unitaria. La velocidad macroscópica discreta es un valor promedio de las velocidades microscópicas \mathbf{e}_i ponderadas por las direcciones de las densidades f_i .

La presión macroscópica discreta es dada por las ecuaciones de estado que relacionan la densidad discreta para la presión por una simple relación proporcional teniendo en cuenta la velocidad del sonido.

$$P = c_s^2 \rho = \frac{\rho}{3}\tag{4.8}$$

Aunque esta relación es válida para el método, uno tiene que tener en cuenta que este modelo es válido para simulaciones de fluidos incompresibles. Esto quiere decir, que la densidad del fluido no se le permite variar, y sólo se permite fluctuar localmente alrededor de un valor fijo. Esta restricción limita al método y, por lo tanto, no es válido para simular situaciones en las que la compresibilidad juega un papel importante, tales como las simulaciones de ondas de choque o incluso las ondas sonoras.

4.6 Algoritmo del método de redes de Boltzmann

El algoritmo del LBM consiste esencialmente de dos pasos como se explicó en el capítulo 3, el paso de propagación y el de colisión. Pero también hay diferentes pasos que se deben aplicar de forma secuencial. A continuación, se muestra la secuencia esquemática del algoritmo.

```

Initialize;
for number of iterations do
  | Apply boundary conditions;
  | Streaming Step;
  | Compute macroscopic quantities;
  | Compute  $f^{eq}$ ;
  | Collision Step;
  | if there are obstacles then
  | | Obstacle treatment;
  | end
end
Store data;

```

Figura 4.3 Principal algoritmo del LBM

Es cierto que el algoritmo principal del LBM se puede implementar de diferentes maneras, pero el paso de inicialización debe ser estrictamente al principio. Entonces, el paso de propagación y de la colisión debe hacerse en una secuencia estrictamente alternante.

4.6.1 Inicialización

El procedimiento de la inicialización consiste en varios pasos. El primero es para leer los datos de entrada introducidos por el usuario y asignar la memoria y las variables. El segundo paso es iniciar el problema de forma adimensional a partir de los valores característicos dimensionados introducidos por el usuario. El tercer paso básico es para inicializar la distribución espacio-fase a partir de una velocidad macroscópica y campo de densidad. Por ejemplo, una distribución espacio-fase común, es la distribución de equilibrio donde la velocidad macroscópica es nula.

Se puede observar la secuencia esquemática de la subrutina de inicialización en el algoritmo 2

Result: Initialization of the algorithm
 Get simulation parameters;
 Create lattice;
 Read geometry file;
 Define node properties in function of geometry;
 Classify nodes in lists;
 Initialize velocity;
 Compute f^{eq} ;
 Initialize f ;

Figura 4.4 Algoritmo de la rutina de inicialización

Para ver más claramente, este proceso puede ser entendido como sigue: los datos de entrada definen los parámetros de la simulación (es decir, número de Reynolds, las dimensiones de la rejilla, velocidades iniciales ...). Entonces, después de una clasificación de nodos, hecho puramente debido a las necesidades de implementación de la estructura, el valor inicial de la velocidad se coloca en cada nodo.

Por ejemplo, si el fluido está en un estado de equilibrio en el tiempo inicial, entonces el valor de la velocidad inicial sería cero y este valor se almacena en el valor nodal para la velocidad. Posteriormente, cuando se calcula la función de distribución de equilibrio, se usaría para este cálculo, el valor nodal de la velocidad almacenada anteriormente. Un valor inicial común para la función de distribución es el valor distribución de equilibrio calculado previamente teniendo en cuenta el valor inicial de la velocidad.

$$f_{\text{inicial}} = f^{\text{eq}}(v_{\text{inicial}}) \quad (4.9)$$

4.6.2 Bucle de iteración

En el bucle de iteración hay cierta flexibilidad en el momento de aplicar algunos pasos o los otros.

```

Apply boundary conditions;
Streaming Step;
Compute macroscopic quantities;
Compute  $f^{eq}$ ;
Collision Step;
if there are obstacles then
|   Obstacle treatment;
end

```

Figura 4.5. Bucle de iteración del LBM

Las condiciones de contorno son de hecho una parte clave del método. En cada paso de tiempo si se usan condiciones de frontera, estas se aplican a los nodos frontera para actualizar y modificar los valores de la función de distribución en ciertas direcciones.

En cada paso de tiempo el algoritmo tiene que actualizar las variables macroscópicas para el cálculo de la función de distribución de equilibrio necesario en la etapa de colisión.

4.7 Condiciones de frontera

Hay varios tipos de condiciones de frontera que son utilizadas en el LBM, como son las: Bounce-Back, fronteras periódicas, fronteras Von Neumann, fronteras Dirichlet y condiciones de frontera abierta. En la presente tesis solo se utilizaron las dos primeras.

4.7.1 Fronteras Bounce-Back

Estas fronteras, también llamadas condiciones de frontera no-slip, son las fronteras típicas para simular la interacción de fluidos con una pared fija sin deslizamiento. Además, se utilizan para simular el flujo alrededor de un obstáculo estacionario. Se usan en gran parte porque garantizan la conservación de masa, momento y energía, y debido a su simplicidad, su estabilidad numérica y su precisión.

Como su nombre lo indica, cuando una partícula viene hacia la frontera sólida, esta rebota en el dominio de flujo. Esto se puede ver en la Fig. 4.6

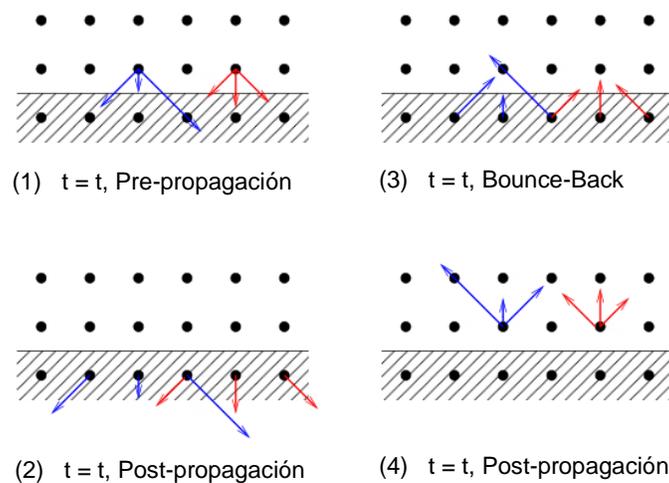


Figura 4.6 Efecto de las condiciones de frontera Bounce-Back en los valores de la función de distribución

4.7.2 Fronteras Periódicas

Condiciones de frontera periódicas son útiles en algunos casos. Se pueden utilizar en algunos puntos de referencia para validar el sistema, por ejemplo. Cuando las fronteras periódicas se aplican en una dirección, el dominio de la simulación cambia de una geometría rectangular o cuadrada a una cilíndrica como se muestra en la Fig. 4.7

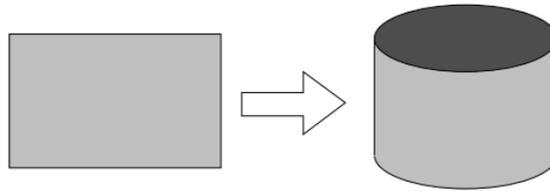


Figura 4.7 Forma cilíndrica del dominio cuando se aplican condiciones de contorno periódicas

Los nodos situados en la frontera, donde se aplica la condición periódica, tienen sus nodos vecinos en la frontera opuesta. La explicación de las fronteras periódicas puede verse (figura 4.8) en el caso de la dirección-x

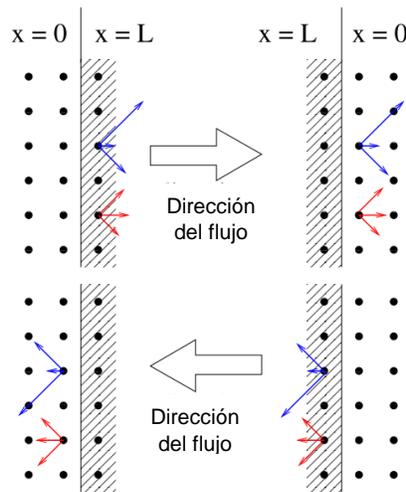


Figura 4.8 Efecto de la condición de frontera periódica en el nodo frontera

Por tanto, en el modelo D2Q9 las relaciones que deben ser aplicados son las siguientes

$$\begin{aligned}
 f_1^{x=0} &= f_1^{x=L} & f_5^{x=0} &= f_5^{x=L} & f_8^{x=0} &= f_8^{x=L} \\
 f_3^{x=L} &= f_3^{x=0} & f_6^{x=L} &= f_6^{x=0} & f_7^{x=L} &= f_7^{x=0}
 \end{aligned}
 \tag{4.10}$$

4.7.3 Fronteras de velocidad (fronteras Von Neumann), fronteras de presión (fronteras Dirichlet) y condiciones de frontera abiertas

Está claro que no hay una simulación compleja que podría ser simulada correctamente sólo con fronteras periódicas y con Bounce Back. Por consiguiente existen otro tipo de condiciones de frontera que son utilizadas en LBM, por ejemplo las fronteras de velocidad o mejor conocidas como fronteras Von Neumann, que son aplicadas a ciertas condiciones de flux en las fronteras.

En estas condiciones se especifica una velocidad $\mathbf{v}=(v_x, v_y, v_z)$ a partir de la cual se calcula una densidad, y por lo tanto, los valores de la función de distribución se calculan para lograr la distribución que implica la velocidad fija.

Otra condición de frontera utilizada es la de presión o frontera Dirichlet, la cual de forma análoga a la frontera de velocidad, calcula los valores desconocidos de la función de distribución usando una densidad impuesta. Por último, otra condición de frontera es la abierta, la cual se aplica cuando la velocidad de salida no se conoce a la salida del sistema.

CAPITULO 5. SIMULACIÓN DE UN FLUIDO NEWTONIANO Y NO NEWTONIANO A TRAVES DE UN CANAL RECTANGULAR

5.1 Solución analítica del paso de un fluido a través de un canal rectangular

Para validar el Método de Lattice Boltzmann, se realizó la solución analítica de un problema del flujo de un fluido a través de un canal rectangular horizontal de 2 x 1 cm de sección y 1.5 m de longitud en el cual se hacen pasar: un fluido Newtoniano, dos pseudoplásticos y un dilatante, ver figura (5.1). De tal forma que hubo la necesidad de convertir unidades de rejilla a unidades físicas y viceversa. A continuación se muestran los cálculos realizados, con sus respectivas variables, así como los resultados obtenidos para los diferentes tipos de fluidos.

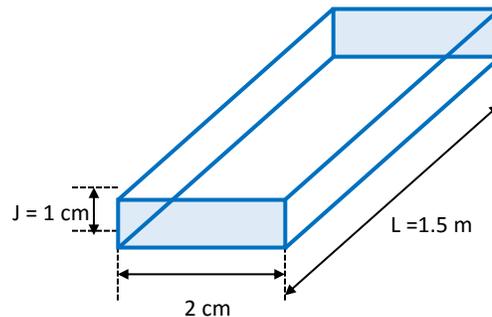


Figura 5.1 Flujo de un fluido a través de un canal rectangular

En los cuadros (5.1–5.4), se presentan primeramente los resultados de los cálculos efectuados para conocer algunas variables tales como factor de fricción y caídas de presión, así como el número de Reynolds por citar algunos, para fluido Newtoniano y no Newtoniano.

Fluido Newtoniano	Variables conocidas: $\rho = 800 \text{ kg / m}^3$ $\mu = 20 \text{ centipoise}$ $Q = 360 \text{ l / h}$
Obtención de variables:	
Velocidad promedio $u = \frac{0.360 \text{ m}^3 / \text{h}}{3600 \text{ s} / \text{h} \times (0.02 \times 0.01)} = 0.5 \text{ m/s}$	Diámetro hidráulico $De = 4 r_H$ $r_H = \frac{\text{Sección de flujo}}{\text{Perímetro mojado}} = \frac{0.02 \times 0.01}{(0.02) \times 2 + 0.01(2)} = 3.333 \times 10^{-3}$ $D_H = 4(3.333 \times 10^{-3}) = 0.01333 \text{ m}$
Numero de Reynolds $Re = \frac{0.01333(0.5) \times 800}{20 \times 10^{-3}} = 266$ ∴ Flujo laminar	Factor de fricción $f_D = \frac{64}{Re} = \frac{64}{266} = 0.24$
Perdidas por fricción $\frac{\sum F}{M} = f_D \frac{u^2 L}{2g_c} = \frac{0.24(0.5)^2 (1.5)}{2(9.81)(0.01333)} = 0.3449 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}}$	Caída de Presión $\frac{\Delta P}{\rho} = \frac{\sum F}{M} = -0.3449 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}}$ $\Delta P = -0.3449 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}} \left(800 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) = -275.98 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2}$ La caída de presión será de $0.0275 \frac{\text{kg}}{\text{cm}^2}$, o de $2707 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$

Cuadro 5.1 Variables obtenidas para fluido Newtoniano, n = 1

Fluido Pseudoplástico	Variables conocidas: $Q = 360 \text{ l / h}; \rho = 961 \text{ kg/m}^3$ $n = 0.33$ $k = 2.744 \text{ Pa s}^n$
Obtención de variables:	
Velocidad promedio $u = \frac{0.360 \text{ m}^3 / \text{h}}{3600 \text{ s} / \text{h} \times (0.02 \times 0.01)} = 0.5 \text{ m/s}$	Diámetro hidráulico $De = 4 r_H$ $r_H = \frac{\text{Sección de flujo}}{\text{Perímetro mojado}} = \frac{0.02 \times 0.01}{(0.02) \times 2 + 0.01(2)} = 3.333 \times 10^{-3}$ $D_H = 4(3.333 \times 10^{-3}) = 0.01333 \text{ m}$
Numero de Reynolds $Re_{gen} = \frac{D_H \bar{v}^{2-n} \rho}{8^{-1} k} \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n$ $Re_{gen} = \frac{(0.01333)^{0.33} (0.5)^{2-0.33} 961}{8^{0.33-1} (2.744)} \left(\frac{4(0.33)}{3(0.33)+1} \right)^{0.33}$ $Re_{gen} = 93.1217$ ∴ Flujo laminar	Factor de fricción $f_D = \frac{64}{Re_{gen}} = \frac{64}{93.1217} = 0.6872$

<p>Perdidas por fricción</p> $\frac{\sum F}{M} = f_D \frac{u^2 L}{2g_c D_H} = \frac{0.6872(0.5)^2 (1.5)}{2(9.81)(0.01333)} = 0.9853 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}}$	<p>Caída de Presión</p> $\frac{\Delta P}{\rho} = -\frac{\sum F}{M} = -0.9853 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}}$ $\Delta P = -0.9853 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}} \left(961 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) = -946.8733 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2}$ <p>La caída de presión será de $0.09468 \frac{\text{kg}}{\text{cm}^2}$, o de $9288.0589 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$</p>
---	---

Cuadro 5.2 Variables obtenidas para fluido no Newtoniano, n = 0.33

Fluido Pseudoplástico	<p>Variables conocidas: $\rho = 975 \text{ kg/m}^3$; $n = 0.56$; $k = 6.40 \text{ Pa s}^n$ $Q = 360 \text{ l/h}$</p>
Obtención de variables:	
<p>Velocidad promedio</p> $u = \frac{0.360 \text{ m}^3 / \text{h}}{3600 \text{ s} / \text{h} \times (0.02 \times 0.01)} = 0.5 \text{ m/s}$	<p>Diámetro hidráulico</p> $De = 4 r_H$ $r_H = \frac{\text{Sección de flujo}}{\text{Perímetro mojado}} = \frac{0.02 \times 0.01}{(0.02) \times 2 + 0.01(2)} = 3.333 \times 10^{-3}$ $D_H = 4(3.333 \times 10^{-3}) = 0.01333 \text{ m}$
<p>Numero de Reynolds</p> $Re_{gn} = \frac{D_H^n \bar{v}^{2-n} \rho}{8^{n-1} k} \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n$ $Re_{gn} = \frac{(0.01333)^{0.56} (0.5)^{2-0.56} 975}{8^{0.56-1} (6.40)} \left(\frac{4(0.56)}{3(0.56)+1} \right)^{0.56}$ $Re_{gn} = 11.2976$ <p>∴ Flujo laminar</p>	<p>Factor de fricción</p> $f_D = \frac{64}{Re_{gn}} = \frac{64}{11.2976} = 5.6649$
<p>Perdidas por fricción</p> $\frac{\sum F}{M} = f_D \frac{u^2 L}{2g_c D_H} = \frac{5.6649(0.5)^2 (1.5)}{2(9.81)(0.01333)} = 8.1225 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}}$	<p>Caída de Presión</p> $\frac{\Delta P}{\rho} = -\frac{\sum F}{M} = -8.1225 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}}$ $\Delta P = -8.1225 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}} \left(975 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) = -7919.5221 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2}$ <p>La caída de presión será de $0.79195 \frac{\text{kg}}{\text{cm}^2}$, o de $77683.8704 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$</p>

Cuadro 5.3 Variables obtenidas para fluido no Newtoniano n = 0.56

Simulación de un fluido Newtoniano y no Newtoniano a través de un canal rectangular

<p style="text-align: center;">Fluido Dilatante</p>	<p>Variables conocidas: $\rho = 1073 \text{ kg/m}^3$ $n = 2.0$ $k = 0.774 \text{ Pa s}^n$ $Q = 360 \text{ l/h}$</p>
<p>Obtención de variables:</p>	
<p>Velocidad promedio</p> $u = \frac{0.360 \text{ m}^3 / \text{h}}{3600 \text{ s} / \text{h} \times (0.02 \times 0.01)} = 0.5 \text{ m/s}$	<p>Diámetro hidráulico</p> $De = 4 r_H$ $r_H = \frac{\text{Sección de flujo}}{\text{Perímetro mojado}} = \frac{0.02 \times 0.01}{(0.02) \times 2 + 0.01(2)} = 3.333 \times 10^{-3}$ $D_H = 4(3.333 \times 10^{-3}) = 0.01333 \text{ m}$
<p>Numero de Reynolds</p> $Re_{gen} = \frac{D_H^2 \bar{v}^{2-n} \rho}{8^{n-1} k} \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n$ $Re_{gen} = \frac{(0.01333)^{2.0} (0.5)^{2-2} 1073}{8^{2.0-1} (0.774)} \left(\frac{4(2.0)}{3(2.0)+1} \right)^{2.0}$ $Re_{gen} = 0.04021$ <p>∴ Flujo laminar</p>	<p>Factor de fricción</p> $f_D = \frac{64}{Re_{gen}} = \frac{64}{0.04021} = 1591.3547$
<p>Perdidas por fricción</p> $\frac{\sum F}{M} = f_D \frac{u^2 L}{2g_c D_H} = \frac{1591.3547 (0.5)^2 (1.5)}{2(9.81)(0.01333)}$ $= 2281.7555 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}}$	<p>Caída de Presión</p> $\frac{\Delta P}{\rho} = -\frac{\sum F}{M} = -2281.7555 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}}$ $\Delta P = -2281.7555 \frac{\text{kgm}}{\text{kg}} \left(1073 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) = -2448323.654 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2}$ <p>La caída de presión será de $244.8323 \frac{\text{kg}}{\text{cm}^2}$, o de $24016068.9 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$</p>

Cuadro 5.4 Variables obtenidas para fluido no Newtoniano n = 2.0

5.2 Simulaciones con redes de Boltzmann

Con los resultados obtenidos de la solución analítica del paso de un fluido a través de una canal rectangular, se procedió a realizar las respectivas simulaciones con el Método de Lattice Boltzmann, para lo cual fue necesaria la conversión de unidades físicas a unidades de red de las variables obtenidas en dicha solución analítica, con la finalidad de alimentarlas al programa computacional. Con estas simulaciones, se obtuvieron resultados de variables tales como: viscosidad, velocidad promedio, presión y número de Reynolds para un fluido Newtoniano y uno generalizado para el caso de fluidos de la potencia ($n = 0.33, 0.56, 2.0$), para una rejilla de 64×64 . Por lo que ahora se realizó la conversión de unidades de red a unidades físicas con la intención de validar el programa y en consecuencia el MRB. Las figuras 5.2 – 5.5, muestran el esquema del programa en el cual se realizaron dichas simulaciones.

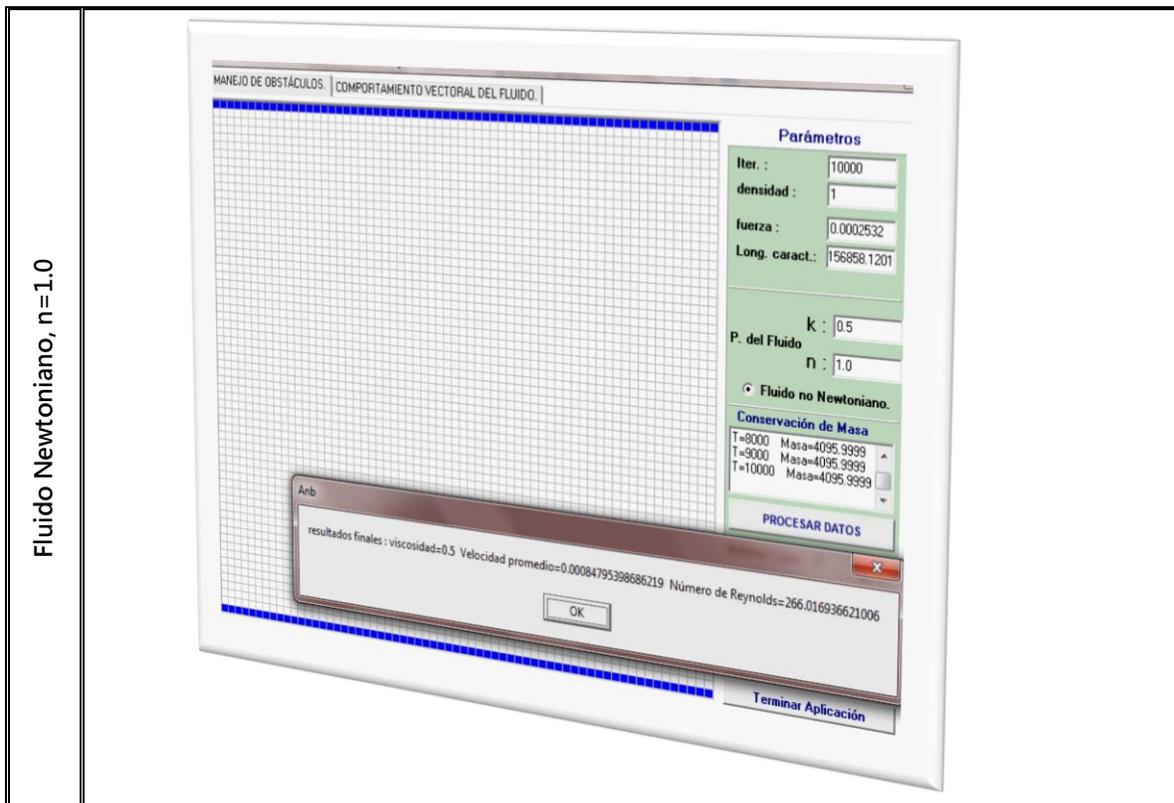


Figura 5.2 Simulación con Lattice Boltzmann para un fluido Newtoniano $n = 1.0$

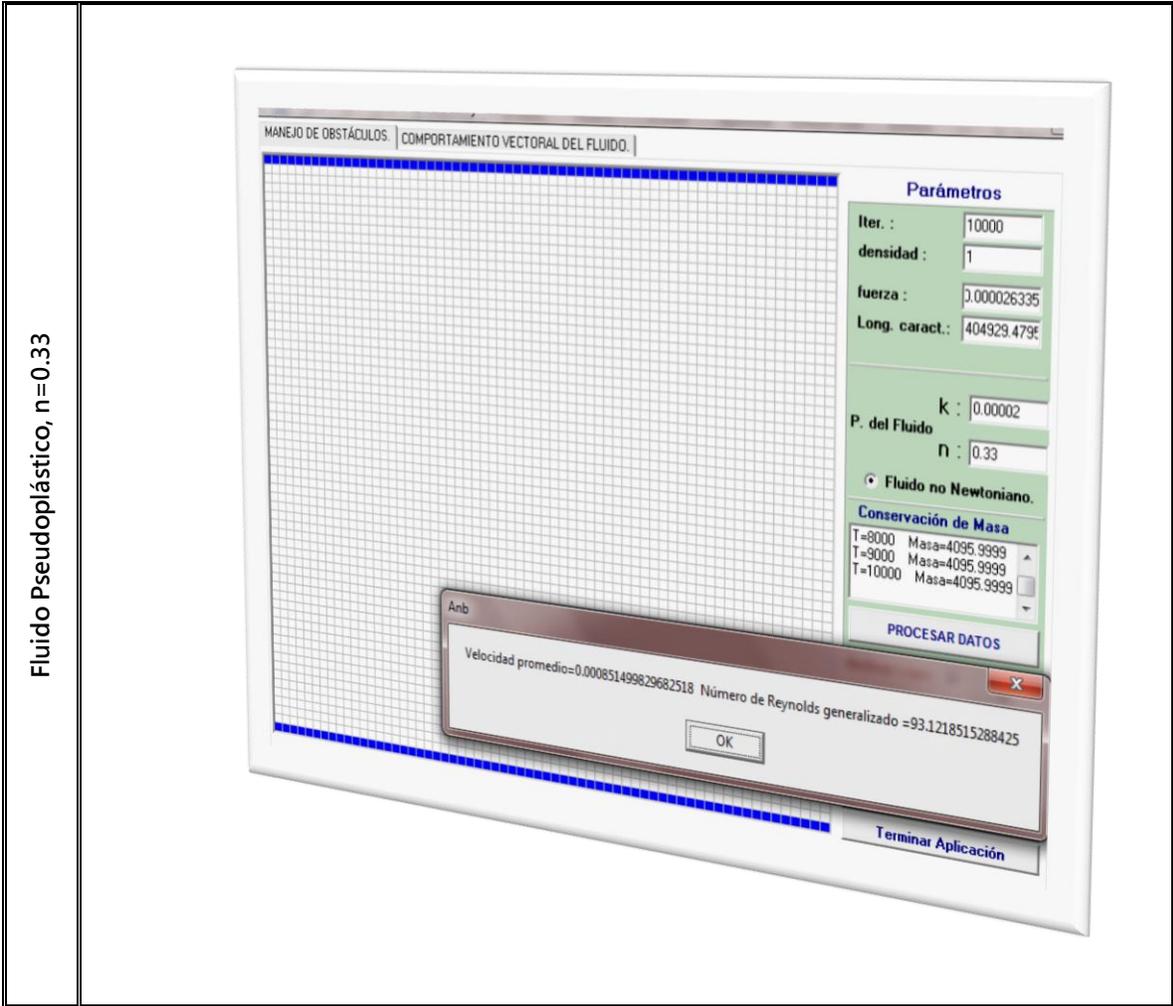


Figura 5.3 Simulación con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano $n = 0.33$

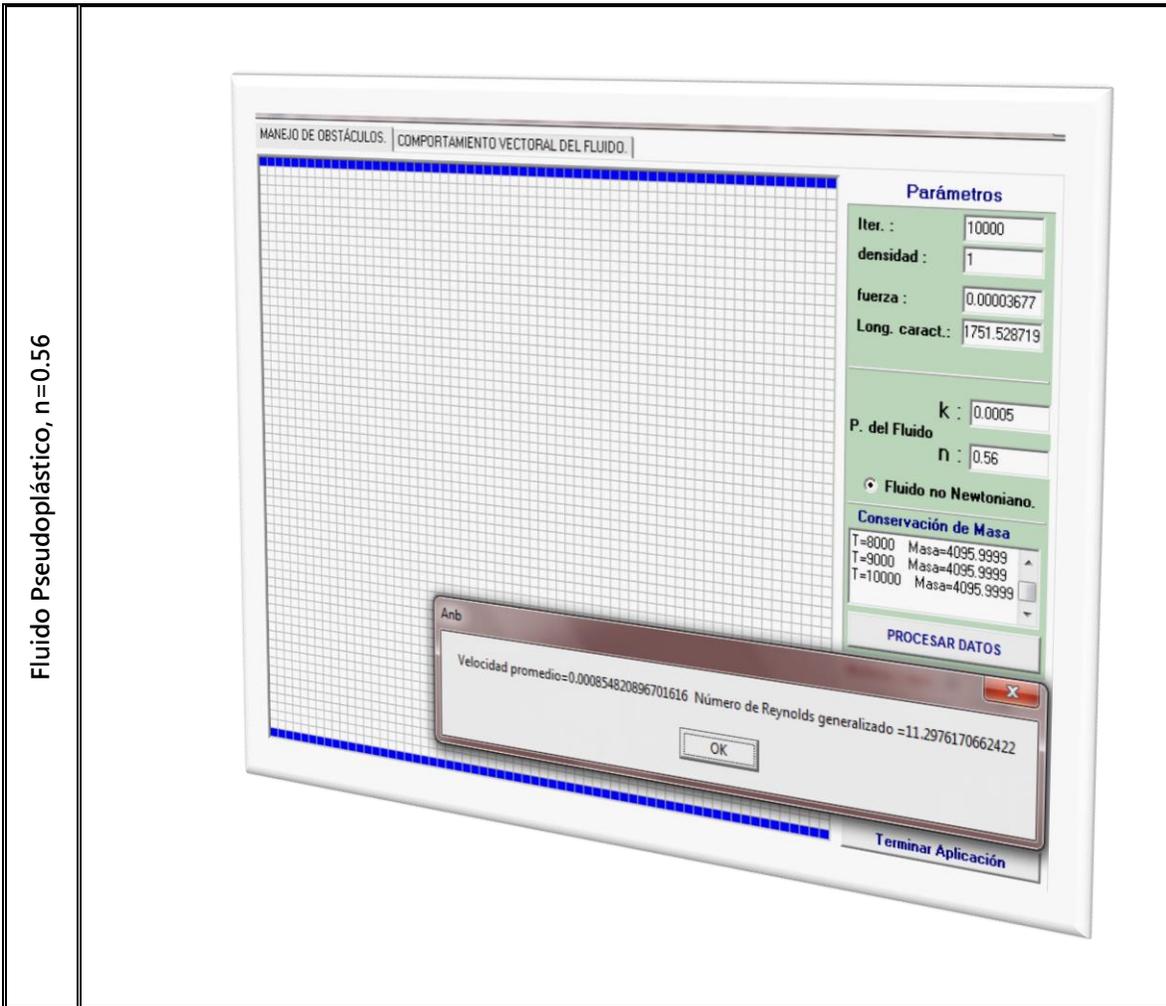


Figura 5.4 Simulación con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano $n = 0.56$

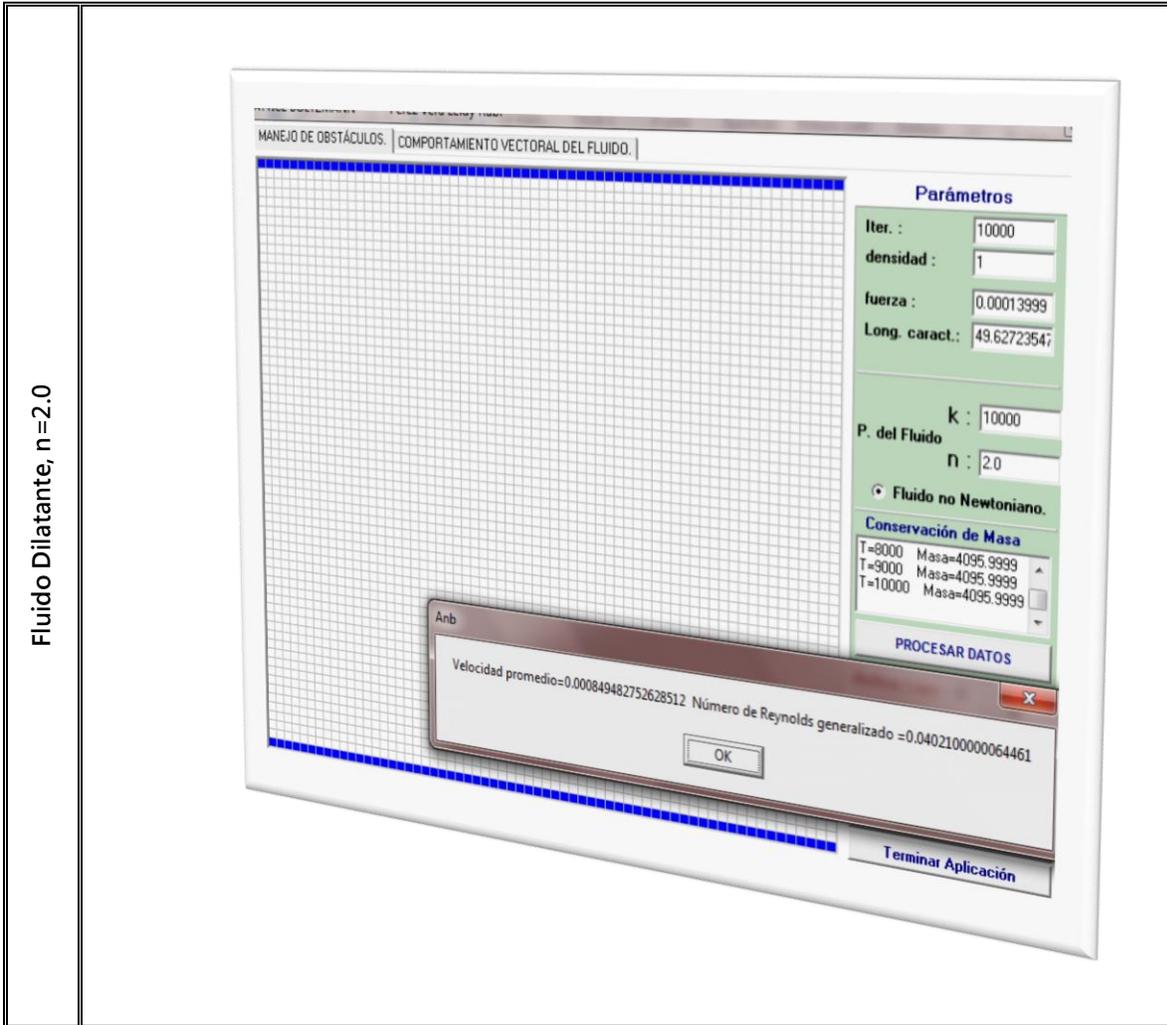


Figura 5.5 Simulación con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano $n = 2.0$

En los cuadros (5.5 – 5.8), se presentan los cálculos realizados concernientes a la relación de unidades físicas con las unidades de red, para los fluidos trabajados en cuestión.

<p style="text-align: center;">Fluido Newtoniano</p>	<p style="text-align: center;">Propiedades físicas:</p> $v_f = 0.5 \frac{m}{s}; \rho_{\text{aceite}} = 800 \frac{kg}{m^3}; \mu_{\text{aceite}} = 20 \text{ cp} = 20 \times 10^{-3} \frac{kg}{ms}$ $D_H = 0.01333m, L = 1.5m, J = 1cm$
<p>Obtención de unidades físicas:</p>	
<p>Longitud</p> $\Delta x = \frac{L}{N} = \frac{1.5m}{64} = 0.0234m$ $\Delta y = \frac{J}{M} = \frac{1.0cm}{64} = 1.5625 \times 10^{-4}m$	<p>Tiempo</p> $\Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{físico}} \Delta x \text{ sea } C_s^{LB} = \sqrt{\frac{V}{3}}$ $C_s^{físico} = 340.3 \frac{m}{s} \Big _{15.5^{\circ}C \text{ y } 1 \text{ atm}}$ $\Rightarrow \Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{físico}} \Delta x = \frac{\sqrt{\frac{V}{3}}}{340.3 \frac{m}{s}} (0.0234m) = 3.9700 \times 10^{-5} s$
<p>Velocidad promedio</p> $v_f = v_{LB} \frac{\Delta x}{\Delta t} = (0.000847953) \frac{0.0234m}{3.9700 \times 10^{-5} s}$ $= 0.499801 \approx 0.5 \frac{m}{s}$	<p>Número de Mach</p> $M = \frac{\text{velocidad}}{\text{velocidad del sonido}}$ $M_{físico} = \frac{\bar{v}_{físico}}{C_s^{físico}} = \frac{0.499801 \frac{m}{s}}{340.3 \frac{m}{s}} = 1.4687 \times 10^{-3}$ $M_{LB} = \frac{\bar{v}_{LB}}{C_s^{LB}} = \frac{0.000847953}{\sqrt{\frac{V}{3}}} = 1.4686 \times 10^{-3}$ $\therefore M_{físico} = M_{LB}$
<p>Velocidad puntual</p> $v_f = v_{LB} \frac{\Delta x}{\Delta t} = v_{LB} \times \frac{0.0234m}{3.9700 \times 10^{-5} s}$ $v_f = (589.4206) v_{LB} \left[= \right] \frac{m}{s}$	<p>Número de Reynolds</p> $Re = \frac{D_H \bar{v}}{\mu}; \quad Re_{LB} = Re_{físico}$ $266 = \frac{D_H^{LB} \bar{v}_{LB}}{\mu_{LB}} \Rightarrow D_H^{LB} = \frac{(266) \mu_{LB}}{\bar{v}_{LB}}$ $D_H^{LB} = \frac{(266)(0.5)}{(0.000847953)} = 156858.1201$

<p>Presión</p> $P_{física} = P_{LB} C_s^n \rho_{física}$ $\Rightarrow P_{física} = P_{LB} \left(340.3 \frac{m}{s}\right)^2 \left(800 \frac{kg}{m^3}\right)$ $= P_{LB} \times 92643272 \left[\frac{N}{m^2} \right] = Pa$	<p>Gradiente de presión</p> $P_f^{física} = 22033662.77$ $P_f^{física} = 22030955.85$ $\therefore \Delta P_f = 2706.917547 \frac{N}{m^2}$
--	---

Cuadro 5.5 Obtención de unidades físicas a partir de unidades de rejilla para un fluido Newtoniano, n = 1.0

Fluido Pseudoplástico	<p>Propiedades físicas:</p> $n=0.33; \nu_f = 0.5 \frac{m}{s}; \rho_f = 961 \frac{kg}{m^3}; k_f = 2.744 Pa \cdot s^n$ $D_H = 0.01333m, L = 1.5m, J = 1cm$
Obtención de unidades físicas:	
<p>Longitud</p> $\Delta x = \frac{L}{N} = \frac{1.5m}{64} = 0.0234m$ $\Delta y = \frac{J}{M} = \frac{1.0cm}{64} = 1.5625 \times 10^{-4}m$	<p>Tiempo</p> $\Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{física}} \Delta x \text{ sea } C_s^{LB} = \sqrt{\frac{1}{3}}$ $C_s^{física} = 340.3 \frac{m}{s} \Big _{15.5^9 C \text{ y } 1 \text{ atm}}$ $\Rightarrow \Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{física}} \Delta x = \frac{\sqrt{\frac{1}{3}}}{340.3 \frac{m}{s}} (0.0234m) = 3.9700 \times 10^{-5} s$
<p>Velocidad promedio</p> $\nu_f = \nu_{LB} \frac{\Delta x}{\Delta t} = (0.000851499) \frac{0.0234m}{3.9700 \times 10^{-5} s}$ $= 0.5018 \approx 0.5 \frac{m}{s}$	<p>Número de Mach</p> $M = \frac{\text{velocidad}}{\text{velocidad del sonido}}$ $M_{física} = \frac{\nu_{física}}{C_s^{física}} = \frac{0.5018 \frac{m}{s}}{340.3 \frac{m}{s}} = 1.4748 \times 10^{-3}$ $M_{LB} = \frac{\nu_{LB}}{C_s^{LB}} = \frac{0.000851499}{\sqrt{\frac{1}{3}}} = 1.4748 \times 10^{-3}$ $\therefore M_{física} = M_{LB}$
<p>Velocidad puntual</p> $\nu_f = \nu_{LB} \frac{\Delta x}{\Delta t} = \nu_{LB} \times \frac{0.0234m}{3.9700 \times 10^{-5} s}$ $\nu_f = (589.4206) \nu_{LB} \left[\frac{m}{s} \right]$	<p>Número de Reynolds</p> $Re_{gen} = \frac{D_H^2 \nu^{2-n} \rho \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n}{8^{n-1} k}; \quad Re_{gen}^{física} = Re_{gen}^{LB}$ $D_{HLB}^2 = \frac{(93.1217) 8^{n-1} k_{LB} \left(\frac{3n+1}{4n} \right)^n}{\nu_{LB}^{2-n} \rho_{LB}}$ $D_{HLB}^2 = \frac{(11.2976) 8^{0.33-1} (0.00002) \left(\frac{3(0.33)+1}{4 \times 0.33} \right)^{0.33}}{(0.000851499)^{2-0.33} (19.5954)}$ $D_{HLB} = 49.1765$

<p>Presión</p> $P_{física} = P_{LB} C_{física}^2 \rho_{física}$ $\Rightarrow P_{física} = P_{LB} \left(340.3 \frac{m}{s}\right)^2 \left(961 \frac{kg}{m^3}\right)$ $= P_{LB} \times 111287730.5 \left[\frac{N}{m^2} \right] \left[= \right] Pa$	<p>Gradiente de presión</p> $P_f^{física} = 726909214.1$ $P_f^{física} = 726899926$ $\therefore \Delta P_f = 9288.104035 \frac{N}{m^2}$
---	---

Cuadro 5.6 Obtención de unidades físicas a partir de unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, $n = 0.33$

<p>Propiedades físicas:</p> $n = 0.56, \nu_f = 0.5 \frac{m}{s}; \rho_f = 975 \frac{kg}{m^3}; k_f = 6.40 Pa \cdot s^n$ $D_H = 0.01333m, L = 1.5m, J = 1cm$	
<p>Obtención de unidades físicas:</p>	
<p>Longitud</p> $\Delta x = \frac{L}{N} = \frac{1.5m}{64} = 0.0234m$ $\Delta y = \frac{J}{M} = \frac{1.0cm}{64} = 1.5625 \times 10^{-4}m$	<p>Tiempo</p> $\Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{física}} \Delta x \text{ sea } C_s^{LB} = \sqrt{\nu_f}$ $C_s^{física} = 340.3 \frac{m}{s} \left 15.5^{\circ}C \text{ y } 1 \text{ atm} \right.$ $\Rightarrow \Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{física}} \Delta x = \frac{\sqrt{\nu_f}}{340.3 \frac{m}{s}} (0.0234m) = 3.9700 \times 10^{-5} s$
<p>Velocidad promedio</p> $\nu_f = \nu_{LB} \frac{\Delta x}{\Delta t} = (0.000854820) \frac{0.0234m}{3.9700 \times 10^{-5} s}$ $= 0.5038 \approx 0.5 \frac{m}{s}$	<p>Número de Mach</p> $M = \frac{\text{velocidad}}{\text{velocidad del sonido}}$ $M_{física} = \frac{\bar{\nu}_{física}}{C_s^{física}} = \frac{0.5038 \frac{m}{s}}{340.3 \frac{m}{s}} = 1.4804 \times 10^{-3}$ $M_{LB} = \frac{\bar{\nu}_{LB}}{C_s^{LB}} = \frac{0.000854820}{\sqrt{\nu_f}} = 1.4805 \times 10^{-3}$ $\therefore M_{física} = M_{LB}$
<p>Velocidad puntual</p> $\nu_f = \nu_{LB} \frac{\Delta x}{\Delta t} = \nu_{LB} \times \frac{0.0234m}{3.9700 \times 10^{-5} s}$ $\nu_f = (589.4206) \nu_{LB} \left[= \right] \frac{m}{s}$	<p>Número de Reynolds</p> $Re_{gen} = \frac{D_H^2 \bar{\nu}^{2-n} \rho}{8^{n-1} k} \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n; Re_{gen}^{física} = Re_{gen}^{LB}$ $D_{HLB}^2 = \frac{(11.2976) 8^{n-1} k_{LB} (3n+1)^n}{\bar{\nu}_{LB}^{2-n} \rho_{LB}} \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n$ $D_{HLB}^2 = \frac{(11.2976) 8^{0.56-1} (0.0005)}{(0.000854820)^{2-0.56} (115.70298)} \left(\frac{3(0.56)+1}{4 \times 0.56} \right)^{0.56}$ $D_{HLB} = 0.36214$

<p>Presión</p> $P_{física} = P_{LB} C_{física}^2 \rho_{física}$ $\Rightarrow P_{física} = P_{LB} \left(340.3 \frac{m}{s}\right)^2 \left(975 \frac{kg}{m^3}\right)$ $= P_{LB} \times 112908987.8 \left[=\right] \frac{N}{m^2} \left[=\right] Pa$	<p>Gradiente de presión</p> $P_f^{física} = 4354635587$ $P_f^{ind} = 4354557903$ $\therefore \Delta P_f = 77683.85631 \frac{N}{m^2}$
---	--

Cuadro 5.7 Obtención de unidades físicas a partir de unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, $n = 0.56$

Fluido Dilatante	<p>Propiedades físicas:</p> $n=2.0; \nu_f = 0.5 \frac{m}{s}; \rho_f = 1073 \frac{kg}{m^3}; k_f = 0.774 Pa \cdot s^n$ $D_H = 0.01333m, L = 1.5m, J = 1cm$
Obtención de unidades físicas:	
<p>Longitud</p> $\Delta x = \frac{L}{N} = \frac{1.5m}{64} = 0.0234m$ $\Delta y = \frac{J}{M} = \frac{1.0cm}{64} = 1.5625 \times 10^{-4}m$	<p>Tiempo</p> $\Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{física}} \Delta x \text{ sea } C_s^{LB} = \sqrt{\nu_f}$ $C_s^{física} = 340.3 \frac{m}{s} \Big _{15.5^{\circ}C \text{ y } 1 \text{ atm}}$ $\Rightarrow \Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{física}} \Delta x = \frac{\sqrt{\nu_f}}{340.3 \frac{m}{s}} (0.0234m) = 3.9700 \times 10^{-5} s$
<p>Velocidad promedio</p> $\nu_f = \nu_{LB} \frac{\Delta x}{\Delta t} = (0.00084948) \frac{0.0234m}{3.9700 \times 10^{-5} s}$ $= 0.50007 \approx 0.5 \frac{m}{s}$	<p>Número de Mach</p> $M = \frac{\text{velocidad}}{\text{velocidad del sonido}}$ $M_{física} = \frac{\bar{\nu}_{física}}{C_s^{física}} = \frac{0.50007 \frac{m}{s}}{340.3 \frac{m}{s}} = 1.4713 \times 10^{-3}$ $M_{LB} = \frac{\bar{\nu}_{LB}}{C_s^{LB}} = \frac{0.00084948}{\sqrt{\nu_f}} = 1.4713 \times 10^{-3}$ $\therefore M_{física} = M_{LB}$
<p>Velocidad puntual</p> $\nu_f = \nu_{LB} \frac{\Delta x}{\Delta t} = \nu_{LB} \times \frac{0.0234m}{3.9700 \times 10^{-5} s}$ $\nu_f = (589.4206) \nu_{LB} \left[=\right] \frac{m}{s}$	<p>Número de Reynolds</p> $Re_{gen} = \frac{D_H^2 \bar{\nu}^{2-n} \rho}{8^{n-1} k} \left(\frac{4n}{3n+1}\right)^n; Re_{gen}^{física} = Re_{gen}^{LB}$ $D_{HLB}^2 = \frac{(0.04021) 8^{n-1} k_{LB} \left(\frac{3n+1}{4n}\right)^n}{\bar{\nu}_{LB}^{2-n} \rho_{LB}}$ $D_{HLB}^2 = \frac{(0.04021) 8^{2-1} (10000)}{(0.00084948)^{2-2} (8523.1202)} \left(\frac{3(2.0)+1}{4 \times 2.0}\right)^{2.0}$ $D_{HLB} = 0.5375$

Presión $P_{física} = P_{LB} C_{física}^2 \rho_{física}$ $\Rightarrow P_{física} = P_{LB} \left(340.3 \frac{m}{s}\right)^2 \left(1073 \frac{kg}{m^3}\right)$ $= P_{LB} \times 124257788.6 \left[= \right] \frac{N}{m^2} \left[= \right] Pa$	Gradiente de presión $P_f^{inicial} = 3.53021 \times 10^{11}$ $P_f^{final} = 3.52997 \times 10^{11}$ $\therefore \Delta P_f = 24016618.69 \frac{N}{m^2}$
--	---

Cuadro 5.8 Obtención de unidades físicas a partir de unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, n = 2.0

En las tablas 5.9 – 5.12, se presentan el resumen de los resultados obtenidos en unidades físicas y la relación con unidades de red, para fluido Newtoniano y no Newtoniano.

	Variables en el Sistema Internacional de Unidades	Valores	Variables en unidades de Rejilla	Valores
FLUIDO NEWTONIANO	$\langle v_f \rangle \left[= \right] \frac{m}{s}$	0.5	$\langle v_{LB} \rangle$	0.00085
	$D_H \left[= \right] m$	0.01333	D_{HLB}	156858.1201
	$Re_{físico} = \text{adimensional}$	266	$Re_{LB} = \text{adimensional}$	266.0169
	$M_f = \text{adimensional}$	1.4687×10^{-3}	$M_{LB} = \text{adimensional}$	1.4686×10^{-3}
	$\Delta P_f \left[= \right] \frac{N}{m^2}$	2707	ΔP_{LB}	2.922×10^{-5}
	$\mu_f \left[= \right] \frac{kg}{ms}$	20×10^{-3}	μ_{cinem}^{LB}	0.5
	$L \left[= \right] m$	1.5	Tamaño de rejilla en x	64
	$J \left[= \right] m$	0.01	Tamaño de rejilla en y	64

Cuadro 5.9 Variables en unidades físicas y unidades de rejilla para un fluido Newtoniano, n = 1.0

FLUIDO PSEUDOPLASTICO (n=0.33)	Variables en el Sistema Internacional de Unidades	Valores	Variables en unidades de Rejilla	Valores
	$\langle v_f \rangle [=] \frac{m}{s}$	0.5	$\langle v_{LB} \rangle$	0.00085
	$D_{Hf} [=] m$	0.01333	D_{HLB}	49.1765
	$k_f [=] Pa \cdot s^n$	2.744	k_{LB}	0.00002
	$Re_{gen} = \text{adimensional}$	93.1217	$Re_{GenLB} = \text{adimensional}$	93.1216
	$M_f = \text{adimensional}$	1.4748×10^{-3}	$M_{LB} = \text{adimensional}$	1.4748×10^{-3}
	$\Delta P_f [=] \frac{N}{m^2}$	9288.0589	ΔP_{LB}	8.34603×10^{-5}
	$L [=] m$	1.5	Tamaño de rejilla en x	64
	$J [=] m$	0.01	Tamaño de rejilla en y	64

Cuadro 5.10 Variables en unidades físicas y unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, n = 0.33

FLUIDO PSEUDOPLASTICO (n=0.56)	Variables en el Sistema Internacional de Unidades	Valores	Variables en unidades de Rejilla	Valores
	$\langle v_f \rangle [=] \frac{m}{s}$	0.5	$\langle v_{LB} \rangle$	0.000854820
	$D_{Hf} [=] m$	0.01333	D_{HLB}	0.36214
	$k_f [=] Pa \cdot s^n$	6.40	k_{LB}	0.0005
	$Re_{gen} = \text{adimensional}$	11.2976	$Re_{GenLB} = \text{adimensional}$	11.297659
	$M_f = \text{adimensional}$	1.4804×10^{-3}	$M_{LB} = \text{adimensional}$	1.4805×10^{-3}
	$\Delta P_f [=] \frac{N}{m^2}$	77683.8704	ΔP_{LB}	0.000688022
	$L [=] m$	1.5	Tamaño de rejilla en x	64
	$J [=] m$	0.01	Tamaño de rejilla en y	64

Cuadro 5.11 Variables en unidades físicas y unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, n = 0.56

FLUIDO DILATANTE (n=2.0)	Variables en el Sistema Internacional de Unidades	Valores	Variables en unidades de Rejilla	Valores
	$\langle v_f \rangle [=] \frac{m}{s}$	0.5	$\langle v_{LB} \rangle$	0.000849
	$D_{ff} [=] m$	0.01333	D_{HLB}	0.5375
	$k_f [=] Pa \cdot s^n$	0.774	k_{LB}	10000
	$Re_{gen} = \text{adimensional}$	0.04021	$Re_{GenLB} = \text{adimensional}$	0.040202
	$M_f = \text{adimensional}$	1.4713×10^{-3}	$M_{LB} = \text{adimensional}$	1.4713×10^{-3}
	$\Delta P_f [=] \frac{N}{m^2}$	24016068.9	ΔP_{LB}	0.193281
	$L [=] m$	1.5	Tamaño de rejilla en x	64
	$J [=] m$	0.01	Tamaño de rejilla en x	64

Cuadro 5.12 Variables en unidades físicas y unidades de rejilla para un fluido no Newtoniano, n = 2.0

Así mismo, se obtuvieron valores en las simulaciones de Lattice Boltzmann para la presión en unidades de red. En los cuadros (5.13 - 5.16), se presentan los resultados tanto en unidades de red, así como en unidades físicas.

FLUIDO PSEUDOPLASTICO (n=0.33)							
Y _{LB} , X _{LB}		V _{xLB}		Presión LB		Presión (Pa)	
1	47	-5.92E-04	5.88E-01	6.531800144	6.531762372	726909214.1	726905010.5
2	48	3.66E-02	5.82E-01	6.531883309	6.531759683	726918469.4	726904711.3
3	49	1.16E-01	5.74E-01	6.531880626	6.531756997	726918170.7	726904412.3
4	50	1.97E-01	5.65E-01	6.531877936	6.531754308	726917871.4	726904113.1
5	51	2.68E-01	5.54E-01	6.53187525	6.531751621	726917572.5	726903814.1
6	52	3.27E-01	5.40E-01	6.531872562	6.531748932	726917273.3	726903514.9
7	53	3.77E-01	5.24E-01	6.531869876	6.531746246	726916974.4	726903215.9
8	54	4.18E-01	5.04E-01	6.531867187	6.531743557	726916675.1	726902916.7
9	55	4.52E-01	4.80E-01	6.531864501	6.531740871	726916376.2	726902617.8
10	56	4.80E-01	4.52E-01	6.531861812	6.531738182	726916077	726902318.5
11	57	5.04E-01	4.18E-01	6.531859126	6.531735496	726915778.1	726902019.6
12	58	5.24E-01	3.77E-01	6.531856437	6.531732807	726915478.8	726901720.3
13	59	5.40E-01	3.27E-01	6.531853751	6.531730121	726915179.9	726901421.4
14	60	5.54E-01	2.68E-01	6.531851062	6.531727432	726914880.6	726901122.1
15	61	5.65E-01	1.97E-01	6.531848376	6.531724746	726914581.7	726900823.2
16	62	5.74E-01	1.16E-01	6.531845687	6.531722057	726914282.5	726900523.9
17	63	5.82E-01	3.66E-02	6.531843001	6.53171937	726913983.5	726900224.9
18	64	5.88E-01	-5.92E-04	6.531840312	6.531716683	726913684.3	726899926
19		5.95E-01		6.531837625		726913385.3	

Simulación de un fluido Newtoniano y no Newtoniano a través de un canal rectangular

20		5.95E-01		6.531834936		726913086.1	
21		6.01E-01		6.53183225		726912787.1	
22		6.01E-01		6.531829561		726912487.9	
23		6.01E-01		6.531826875		726912188.9	
24		6.07E-01		6.531824186		726911889.7	
25		6.07E-01		6.5318215		726911590.7	
26		6.07E-01		6.531818811		726911291.5	
27		6.07E-01		6.531816124		726910992.5	
28		6.07E-01		6.531813435		726910693.3	
29		6.07E-01		6.531810749		726910394.3	
30		6.07E-01		6.53180806		726910095.1	
31		6.07E-01		6.531805374		726909796.1	
32		6.07E-01		6.531802685		726909496.9	
33		6.07E-01		6.531799999		726909197.9	
34		6.07E-01		6.531797309		726908898.7	
35		6.07E-01		6.531794623		726908599.7	
36		6.07E-01		6.531791934		726908300.5	
37		6.07E-01		6.531789248		726908001.5	
38		6.07E-01		6.531786559		726907702.3	
39		6.07E-01		6.531783873		726907403.3	
40		6.07E-01		6.531781184		726907104.1	
41		6.07E-01		6.531778497		726906805.1	
42		6.01E-01		6.531775808		726906505.9	
43		6.01E-01		6.531773122		726906206.9	
44		6.01E-01		6.531770433		726905907.7	
45		5.95E-01		6.531767747		726905608.7	
46		5.95E-01		6.531765058		726905309.5	

Cuadro 5.13 Presiones obtenidas con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano, $n = 0.33$

FLUIDO PSEUDOPLASTICO (n=0.56)							
Y_{LB}, X_{LB}		V_{xLB}		Presión LB		Presión (Pa)	
1	47	-2.18E-06	0.00102	38.56766119	38.56734978	4354635587	4354600426
2	48	4.67E-05	9.96E-04	38.56834679	38.56732762	4354712997	4354597923
3	49	1.45E-04	9.66E-04	38.56832467	38.56730547	4354710500	4354595422
4	50	2.45E-04	9.33E-04	38.56830251	38.5672833	4354707998	4354592920
5	51	3.39E-04	8.97E-04	38.56828037	38.56726115	4354705497	4354590419
6	52	4.25E-04	8.56E-04	38.56825821	38.56723899	4354702996	4354587917
7	53	5.05E-04	8.10E-04	38.56823606	38.56721684	4354700495	4354585416
8	54	5.77E-04	7.60E-04	38.5682139	38.56719468	4354697993	4354582913
9	55	6.44E-04	7.05E-04	38.56819175	38.56717253	4354695492	4354580412
10	56	7.05E-04	6.44E-04	38.56816959	38.56715036	4354692990	4354577910
11	57	7.60E-04	5.77E-04	38.56814744	38.56712822	4354690489	4354575409
12	58	8.10E-04	5.05E-04	38.56812528	38.56710605	4354687987	4354572907
13	59	8.56E-04	4.25E-04	38.56810313	38.5670839	4354685486	4354570406
14	60	8.97E-04	3.39E-04	38.56808097	38.56706174	4354682983	4354567904
15	61	9.33E-04	2.45E-04	38.56805882	38.5670396	4354680482	4354565404
16	62	9.66E-04	1.45E-04	38.56803665	38.56701744	4354677980	4354562902
17	63	9.96E-04	4.67E-05	38.5680145	38.5669953	4354675479	4354560401
18	64	0.00102	-2.18E-06	38.56799234	38.56697317	4354672976	4354557903
19		0.00104		38.56797019		4354670475	
20		0.00106		38.56794802		4354667973	
21		0.00108		38.56792587		4354665472	
22		0.0011		38.56790371		4354662969	
23		0.00111		38.56788156		4354660468	
24		0.00112		38.5678594		4354657966	

Simulación de un fluido Newtoniano y no Newtoniano a través de un canal rectangular

25		0.00113		38.56783724		4354655465	
26		0.00113		38.56781508		4354652962	
27		0.00114		38.56779293		4354650461	
28		0.00114		38.56777077		4354647959	
29		0.00114		38.56774861		4354645458	
30		0.00115		38.56772645		4354642955	
31		0.00115		38.5677043		4354640454	
32		0.00115		38.56768214		4354637952	
33		0.00115		38.56765998		4354635451	
34		0.00115		38.56763782		4354632948	
35		0.00115		38.56761567		4354630447	
36		0.00114		38.56759351		4354627945	
37		0.00114		38.56757135		4354625443	
38		0.00114		38.56754919		4354622941	
39		0.00113		38.56752704		4354620440	
40		0.00113		38.56750488		4354617937	
41		0.00112		38.56748272		4354615436	
42		0.00111		38.56746056		4354612934	
43		0.0011		38.56743841		4354610433	
44		0.00108		38.56741625		4354607930	
45		0.00106		38.5673941		4354605429	
46		0.00104		38.56737193		4354602927	

Cuadro 5.14 Presiones obtenidas con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano, $n = 0.56$

FLUIDO NEWTONIANO ($n=1.0$)							
Y _{LB} , X _{LB}		V _{xLB}		Presión LB		Presión (Pa)	
1	47	-2.06E-05	9.94E-04	0.237833383	0.237820159	22033662.77	22032437.72
2	48	4.42E-05	9.54E-04	0.237862502	0.237819219	22036360.45	22032350.55
3	49	1.23E-04	9.12E-04	0.237861561	0.237818278	22036273.27	22032263.38
4	50	2.00E-04	8.67E-04	0.23786062	0.237817337	22036186.1	22032176.21
5	51	2.74E-04	8.20E-04	0.237859679	0.237816396	22036098.92	22032089.04
6	52	3.45E-04	7.69E-04	0.237858738	0.237815455	22036011.75	22032001.87
7	53	4.13E-04	7.17E-04	0.237857797	0.237814514	22035924.58	22031914.7
8	54	4.79E-04	6.61E-04	0.237856856	0.237813573	22035837.4	22031827.53
9	55	5.43E-04	6.03E-04	0.237855915	0.237812632	22035750.23	22031740.36
10	56	6.03E-04	5.43E-04	0.237854974	0.237811691	22035663.06	22031653.19
11	57	6.61E-04	4.79E-04	0.237854033	0.23781075	22035575.88	22031566.02
12	58	7.17E-04	4.13E-04	0.237853092	0.237809809	22035488.71	22031478.86
13	59	7.69E-04	3.45E-04	0.237852151	0.237808868	22035401.54	22031391.69
14	60	8.20E-04	2.74E-04	0.23785121	0.237807928	22035314.36	22031304.52
15	61	8.67E-04	2.00E-04	0.237850269	0.237806987	22035227.19	22031217.35
16	62	9.12E-04	1.23E-04	0.237849328	0.237806046	22035140.02	22031130.19
17	63	9.54E-04	4.42E-05	0.237848387	0.237805105	22035052.85	22031043.02
18	64	9.94E-04	-2.06E-05	0.237847446	0.237804164	22034965.68	22030955.85
19		0.00103		0.237846506		22034878.5	
20		0.00106		0.237845565		22034791.33	
21		0.0011		0.237844624		22034704.16	
22		0.00113		0.237843683		22034616.99	
23		0.00115		0.237842742		22034529.82	
24		0.00118		0.237841801		22034442.65	
25		0.0012		0.23784086		22034355.48	

Simulación de un fluido Newtoniano y no Newtoniano a través de un canal rectangular

26		0.00122		0.237839919		22034268.3	
27		0.00123		0.237838978		22034181.13	
28		0.00124		0.237838037		22034093.96	
29		0.00125		0.237837096		22034006.79	
30		0.00126		0.237836155		22033919.62	
31		0.00127		0.237835214		22033832.45	
32		0.00127		0.237834273		22033745.28	
33		0.00127		0.237833332		22033658.11	
34		0.00127		0.237832391		22033570.94	
35		0.00126		0.237831451		22033483.76	
36		0.00125		0.23783051		22033396.59	
37		0.00124		0.237829569		22033309.42	
38		0.00123		0.237828628		22033222.25	
39		0.00122		0.237827687		22033135.08	
40		0.0012		0.237826746		22033047.91	
41		0.00118		0.237825805		22032960.74	
42		0.00115		0.237824864		22032873.57	
43		0.00113		0.237823923		22032786.4	
44		0.0011		0.237822982		22032699.23	
45		0.00106		0.237822041		22032612.06	
46		0.00103		0.2378211		22032524.89	

Cuadro 5.15 Presiones obtenidas con Lattice Boltzmann para un fluido Newtoniano, $n = 1.0$

FLUIDO DILATANTE ($n=2.0$)							
Y_{LB}, X_{LB}		V_{xLB}		Presión LB		Presión (Pa)	
1	47	-1.14E-05	9.61E-04	2841.040404	2840.953043	3.53021E+11	3.53011E+11
2	48	4.33E-05	9.14E-04	2841.233015	2840.946828	3.53045E+11	3.5301E+11
3	49	1.17E-04	8.66E-04	2841.226708	2840.940612	3.53045E+11	3.53009E+11
4	50	1.81E-04	8.16E-04	2841.220442	2840.934395	3.53044E+11	3.53008E+11
5	51	2.45E-04	7.65E-04	2841.214193	2840.928179	3.53043E+11	3.53007E+11
6	52	3.08E-04	7.13E-04	2841.207952	2840.921962	3.53042E+11	3.53007E+11
7	53	3.69E-04	6.59E-04	2841.201718	2840.915744	3.53041E+11	3.53006E+11
8	54	4.30E-04	6.03E-04	2841.195488	2840.909525	3.53041E+11	3.53005E+11
9	55	4.89E-04	5.47E-04	2841.189262	2840.903306	3.5304E+11	3.53004E+11
10	56	5.47E-04	4.89E-04	2841.183038	2840.897085	3.53039E+11	3.53004E+11
11	57	6.03E-04	4.30E-04	2841.176816	2840.890862	3.53038E+11	3.53003E+11
12	58	6.59E-04	3.69E-04	2841.170596	2840.884637	3.53038E+11	3.53002E+11
13	59	7.13E-04	3.08E-04	2841.164377	2840.878409	3.53037E+11	3.53001E+11
14	60	7.65E-04	2.45E-04	2841.158158	2840.872177	3.53036E+11	3.53E+11
15	61	8.16E-04	1.81E-04	2841.151941	2840.865938	3.53035E+11	3.53E+11
16	62	8.66E-04	1.17E-04	2841.145724	2840.859692	3.53034E+11	3.52999E+11
17	63	9.14E-04	4.33E-05	2841.139508	2840.853428	3.53034E+11	3.52998E+11
18	64	9.61E-04	-1.14E-05	2841.133291	2840.847124	3.53033E+11	3.52997E+11
19		0.00101		2841.127076		3.53032E+11	
20		0.00105		2841.12086		3.53031E+11	
21		0.00109		2841.114644		3.53031E+11	
22		0.00113		2841.108429		3.5303E+11	
23		0.00117		2841.102214		3.53029E+11	

Simulación de un fluido Newtoniano y no Newtoniano a través de un canal rectangular

24		0.00121		2841.095998		3.53028E+11	
25		0.00124		2841.089783		3.53028E+11	
26		0.00127		2841.083568		3.53027E+11	
27		0.0013		2841.077352		3.53026E+11	
28		0.00133		2841.071137		3.53025E+11	
29		0.00135		2841.064922		3.53024E+11	
30		0.00137		2841.058706		3.53024E+11	
31		0.00139		2841.052491		3.53023E+11	
32		0.0014		2841.046276		3.53022E+11	
33		0.0014		2841.04006		3.53021E+11	
34		0.00139		2841.033845		3.53021E+11	
35		0.00137		2841.027629		3.5302E+11	
36		0.00135		2841.021414		3.53019E+11	
37		0.00133		2841.015198		3.53018E+11	
38		0.0013		2841.008983		3.53017E+11	
39		0.00127		2841.002767		3.53017E+11	
40		0.00124		2840.996552		3.53016E+11	
41		0.00121		2840.990336		3.53015E+11	
42		0.00117		2840.984121		3.53014E+11	
43		0.00113		2840.977905		3.53014E+11	
44		0.00109		2840.97169		3.53013E+11	
45		0.00105		2840.965475		3.53012E+11	
46		0.00101		2840.959259		3.53011E+11	

Cuadro 5.16 Presiones obtenidas con Lattice Boltzmann para un fluido no Newtoniano, $n = 2.0$

5.3 Solución analítica de la ecuación de Navier–Stokes para un fluido Newtoniano y no Newtoniano

Con respecto a los perfiles de velocidad y con la finalidad de seguir validando el programa computacional del MRB, a continuación se obtuvo la solución analítica del perfil de velocidades a través de las ecuaciones de Navier–Stokes de un fluido Newtoniano que circula en régimen laminar por un conducto de sección transversal rectangular, en la que el ancho W es considerablemente mayor que el espesor B . El conducto está situado en posición horizontal.

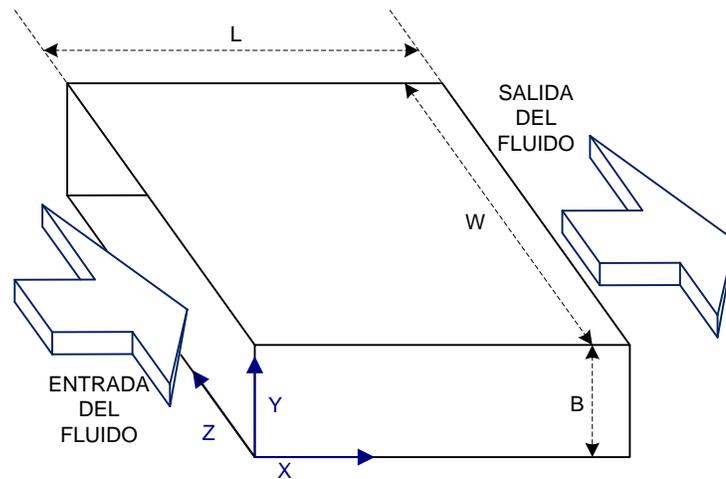


Figura 5.6 Paso de un fluido Newtoniano a través de un canal rectangular

De la ecuación de Navier-Stokes se tiene que:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \cdot \vec{v} \right] = -\nabla P + \mu \nabla^2 \vec{v} + \rho \vec{g} \quad (5.1)$$

La velocidad es en dirección x , por lo que eliminando términos se tiene:

$$\rho \left[\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right] = -\frac{\partial P}{\partial x} - \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + \rho g_x \quad (5.2)$$

$$\Rightarrow \frac{dP}{dx} - \frac{d\tau_{yx}}{dy} = 0 \quad (5.3)$$

Considerando $\frac{dP}{dx} \approx \frac{\Delta P}{\Delta L} = \frac{P_L - P_0}{L}$ y sustituyendo en la ecuación (5.3) se tiene

$$-\frac{d\tau_{yx}}{dy} = \frac{P_L - P_0}{L} \quad (5.4)$$

Resolviendo la ecuación (5.4), se tiene

$$-\tau_{yx} = \frac{(\Delta P)}{L} y + c_1 \quad (5.4)$$

Tomando como condición limite $\tau_{yx} = 0, y = 32$; se obtiene el perfil de esfuerzos

$$\tau_{yx} = \frac{\Delta P}{L} (32 - y) \quad (5.5)$$

Igualando la ecuación (5.5) con la ley de Newton de la viscosidad tenemos:

$$-\mu \left(\frac{dv_x}{dy} \right) = \frac{\Delta P}{L} (32 - y) \quad (5.6)$$

Resolviendo la ecuación (5.6), se obtiene la solución general del perfil de velocidades

$$-v_x = \left(\frac{\Delta P}{\mu L} \right) \left(32y - \frac{y^2}{2} \right) + c_2 \quad (5.7)$$

Tomando como condición limite a $v_x = 0, y = 1.0$; se obtiene el perfil de velocidades

$$v_x = \left(\frac{\Delta P}{2\mu L} \right) (y^2 - 64y + 63) \quad (5.8)$$

Una forma de adimensionalizar la ecuación (5.8), es dividirla por la velocidad media, ésta última, se define matemáticamente por el cociente entre el flujo volumétrico y el diferencial de área:

$$\bar{v} = \frac{Q}{A} = \frac{\iint v \cdot dA}{\iint dA} \quad (5.9)$$

Sustituyendo valores en la ecuación (5.9), se tiene

$$\langle v \rangle = \frac{Q}{A} = \frac{\int_0^W \int_A^B \left(\frac{\Delta P}{2\mu L} \right) (y^2 - 64y + 63) dy dz}{\int_0^W \int_A^B dy dz} \quad (5.10)$$

Resolviendo la ecuación (5.10) y tomando $A = 1$ y $B = 64$ se obtiene la velocidad media

$$\langle v \rangle = \left(-\frac{\Delta P}{2\mu L} \right) (630) \quad (5.11)$$

Por tanto, la forma adimensional de la velocidad es:

$$\frac{v}{\langle v \rangle} = \frac{(-y^2 + 64y - 63)}{630} \quad (5.12)$$

Para el caso de un fluido no Newtoniano circulando bajo las mismas condiciones que el Newtoniano en el ducto representado en la figura (5.1), el procedimiento es muy similar. De la ecuación de Navier-Stokes (5.1) y eliminando términos de la ecuación (5.2) en dirección x, se tiene que:

$$\rho \left[\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right] = -\frac{\partial P}{\partial x} - \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + \rho g_x \quad (5.13)$$

$$\Rightarrow \frac{dP}{dx} - \frac{d\tau_{yx}}{dy} = 0 \quad (5.14)$$

Considerando $\frac{dP}{dx} \approx \frac{\Delta P}{\Delta L} = \frac{P_L - P_0}{L}$ y sustituyendo en la ecuación (5.14) se tiene

$$-\frac{d\tau_{yx}}{dy} = \frac{P_L - P_0}{L} \quad (5.15)$$

Resolviendo la ecuación (5.15), se tiene

$$-\tau_{yx} = \frac{(\Delta P)}{L} y + C_1 \quad (5.16)$$

Tomando como condición limite $\tau_{yx} = 0, y = 32$; se obtiene el perfil de esfuerzos

$$\tau_{yx} = \frac{\Delta P}{L} (32 - y) \quad (5.17)$$

Igualando la ecuación (5.17) con la ley de potencia tenemos:

$$-k \left(\frac{dv_x}{dy} \right)^n = \frac{\Delta P}{L} (32 - y) \quad (5.18)$$

Resolviendo la ecuación (5.18) se obtiene la solución general del perfil de velocidades para un fluido de potencia

$$v_x = \left(-\frac{\Delta P}{kL} \right)^{\frac{1}{n}} (32-y)^{\frac{1}{n+1}} \left(\frac{n}{n+1} \right) + c_2 \quad (5.19)$$

Tomando como condición limite a $v_x = 0, y = 1.0$; se obtiene el perfil de velocidades

$$v_x = \left(\frac{\Delta P}{kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) (31)^{\frac{1}{n+1}} \left[1 - \left(\frac{32-y}{31} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right] \quad (5.20)$$

Una forma de adimensionalizar la ecuación (5.20), es dividirla por la velocidad media (5.8). Por lo que se obtiene

$$\langle v \rangle = \frac{Q}{A} = \frac{\int_0^W \int_A^B \left(\frac{\Delta P}{kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) (31)^{\frac{1}{n+1}} \left[1 - \left(\frac{32-y}{31} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right] dy dz}{\int_0^W \int_A^B dy dz} \quad (5.21)$$

Resolviendo la ecuación (5.21) y tomando $A = 1$ y $B = 64$ se obtiene la velocidad media para un fluido de la potencia

$$\langle v \rangle = \frac{\left(\frac{\Delta P}{kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) (31)^{\frac{1}{n+1}} \left\{ 63 + \frac{1}{(31)^{\frac{1}{n+1}}} \left(\frac{n}{2n+1} \right) \left[(-32)^{\frac{1}{n+2}} - (31)^{\frac{1}{n+2}} \right] \right\}}{63} \quad (5.22)$$

Por tanto, la forma adimensional de la velocidad para un fluido de la potencia es:

$$\frac{v}{\langle v \rangle} = \frac{(3) \left[1 - \left(\frac{32-y}{31} \right)^{\frac{1}{n}+1} \right]}{3 + \frac{1}{(31)^{\frac{1}{n}+1}} \left(\frac{n}{2n+1} \right) \left[(-32)^{\frac{1}{n}+2} - (31)^{\frac{1}{n}+2} \right]} \quad (5.23)$$

En forma general, para obtener los perfiles de velocidad para los diferentes tamaños de rejilla, se utilizó la siguiente ecuación:

$$\frac{v}{\langle v \rangle} = \frac{(z-1) \left[1 - \left(\frac{z/2-y}{(z-1)/2} \right)^{\frac{1}{n}+1} \right]}{(z-1) + \frac{1}{((z-1)/2)^{\frac{1}{n}+1}} \left(\frac{n}{2n+1} \right) \left[(-z/2)^{\frac{1}{n}+2} - ((z-1)/2)^{\frac{1}{n}+2} \right]} \quad (5.24)$$

$z =$ Tamaño de la rejilla en "x"

Para validar el MRB, se realizaron simulaciones con diferentes tamaños de rejilla y se compararon con las soluciones analíticas obtenidas en la ecuación (5.12), para el caso de un fluido Newtoniano y para un fluido no Newtoniano, se utilizó la ecuación (5.24), variando los valores de "n" (0.33, 0.56 y 2.0). Las figuras (5.7 - 5.9), muestran los resultados obtenidos.

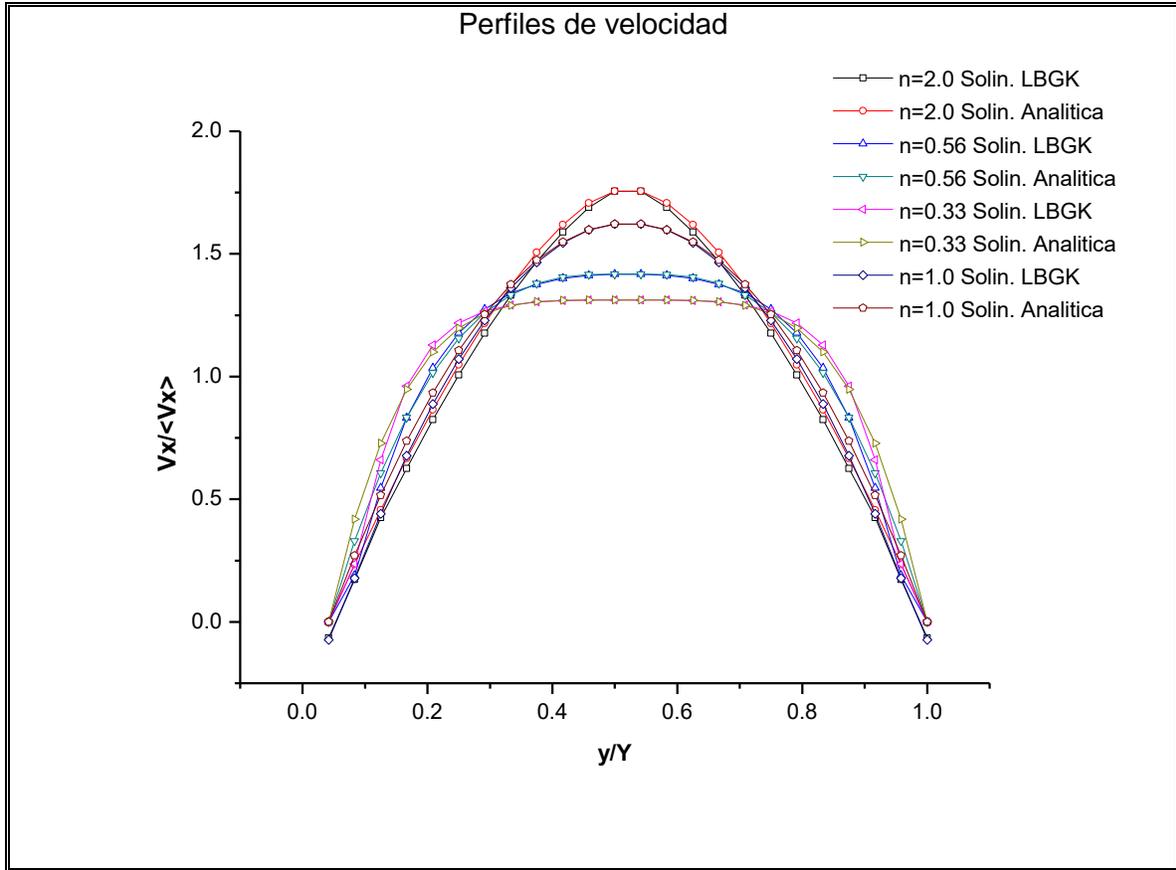


Figura 5.7 Perfiles de velocidad para fluido Newtoniano y no Newtoniano, con Lattice Boltzmann en comparación con la solución analítica de las ecuaciones de movimiento para tamaño de rejilla de 24 X 24 (error entre ellas del 2.56%)

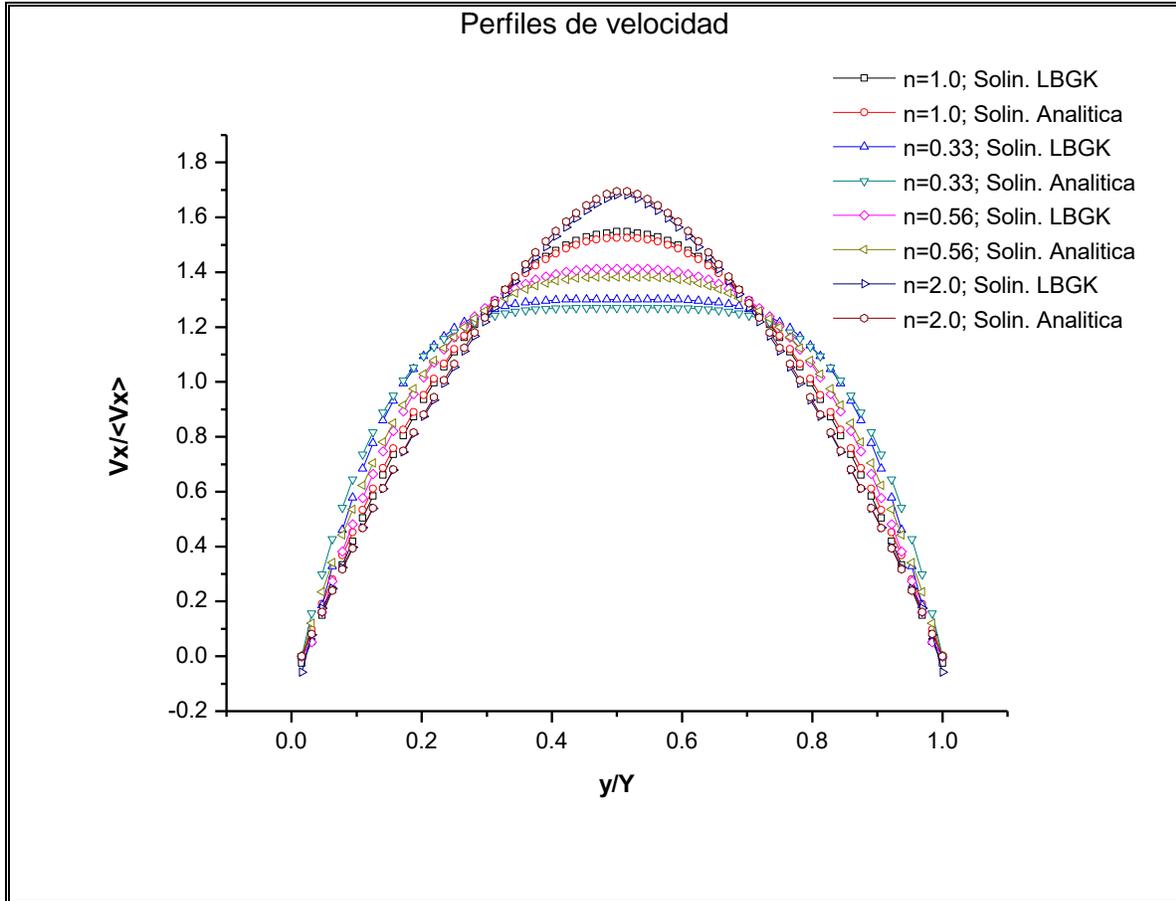


Figura 5.8 Perfiles de velocidad para fluido Newtoniano y no Newtoniano, con Lattice Boltzmann en comparación con la solución analítica de las ecuaciones de movimiento para tamaño de rejilla de 64 X 64 (error entre ellas del 2.0%)

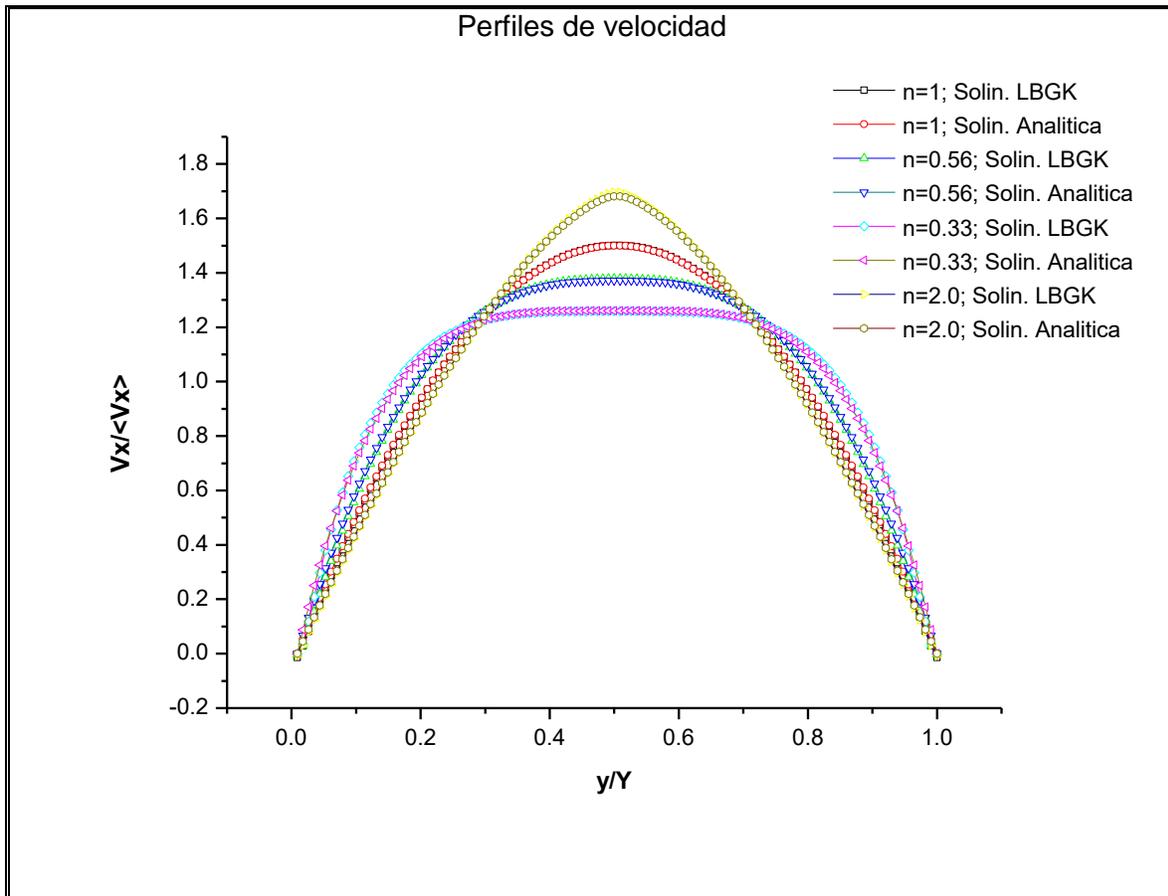


Figura 5.9 Perfiles de velocidad para fluido Newtoniano y no Newtoniano, con Lattice Boltzmann en comparación con la solución analítica de las ecuaciones de movimiento para tamaño de rejilla de 114 X 114 (error entre ellas del 0.9%)

Es importante hacer notar que como era de esperarse el error entre la gráfica obtenida con las simulaciones con Lattice Boltzmann y la solución analítica de la ecuación de movimiento fue mayor con rejillas pequeñas, sin embargo el error no fue tan grande como ocurre con otras técnicas.

CONCLUSIONES

En esta tesis el método de redes de Boltzmann fue utilizado, el cual fue aplicado a un problema del flujo de un fluido a través de un canal rectangular.

Este método es una alternativa a los métodos utilizados en la simulación de fluidos, su programación no es complicada y hoy en día es aplicada a un gran número de problemas en ingeniería.

Los resultados del método de redes de Boltzmann en comparación con la solución analítica de un fluido Newtoniano y no Newtoniano fueron bastante aceptables, ya que el porcentaje de los mismos no superó el 4%, aunque el porcentaje de error es mayor para la simulación de un fluido no Newtoniano en comparación con un Newtoniano. El método demuestra ser bondadoso para simulaciones con rejillas pequeñas (24 x 24), aunque aquí se utilizó una rejilla de 64 x 64. Los flujos simulados fueron en régimen laminar.

Por otra parte, sería conveniente realizar simulaciones con flujos en régimen turbulento para verificar la bondad que presenta el método con este tipo de fluidos, en los cuales su descripción es mucho más compleja.

Finalmente, en esta tesis se da a conocer el método de redes de Boltzmann como una aplicación a ingeniería, ya que el desarrollo de redes de Boltzmann conlleva a conocimientos fuertes de la física estadística, que no son vistos en profundidad en cursos de licenciatura en Ingeniería Química.

REFERENCIAS

Adhvaryu, C. H. *The Lattice Boltzmann Method for Computational Fluid Dynamics applications*, M. en C. Thesis, The University of Texas at Arlington, 2008.

Alim. U. R., Entezari. A. and Moller. T. The Lattice Boltzmann method on optimal sampling lattice. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 15, 4, 630-641, 2009.

Anómala en Medios Porosos”, Magister en Ciencias Física, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ciencias, Departamento de Física, Bogotá, Colombia 2011.

Bhatnagar P. L., Gross E. P. and Krook M.. A model for collision processes in gases I: small amplitude processes in charged and neutral one-component system. *Phys. Rev.* 94(3): 511-525, 1954.

Burghes, D., Galbraith, P., Price, N. and Sherlock, A. “Mathematical Modelling”, 1ª Edición, Prentice Hall, 1996.

Carrasco. B. A. Application of the Lattice Boltzmann Method to issues of coolant flows in nuclear power reactors. Master Thesis, Lehrstuhl für Nukleartechnik, 2013.

Çengel, Y. A. “Tranferencia de Calor”, 3ª Edición, Mc Graw Hill, 2007.

Çengel, Y. A. and Cimbala J. M. “Mecánica de fluidos, fundamentos y aplicaciones”, 1ª Edición, Mc Graw Hill, 2006.

Chapman S. and Cowling T. *The mathematical theory of non-uniform gases*. Cambridge University of Edinburg, Edinburg. 1970.

Chen S., Doolen G. and Eggert K., *Lattice Boltzmann Versatile Tool for multiphase, Fluid Dynamics and other complicated flows*, Los Alamos Science. 20, 100-111, 1994.

Chhabra R P., and Richardson J F., *Non-Newtonian Flow in the Process Industries*, Butterworth-Heinemann, 1999.

Cutlip, M. B. and Shacham M. “Resolución de problemas en ingeniería química y bioquímica con Polymath, Excel y Matlab”, 2ª Edición, Prentice Hall, 2008.

De Nevers. N. Mecánica de Fluidos para Ingenieros Químicos. 1ª Edición, CECSA, México 2006.

Dieter A. Wolf-Gladrow. *Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*,. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2000.

- Duderstadt J. J. and Martin W. R.. *Transport theory*. Jonh Wiley & Sons, Inc., 1979.
- Fernandez, L.B. Introduccion a la mecanica de fluidos, 2ª Edicion, Alfaomega, 1999.
- Flores S. E. G., Cuesta I. and Saluela C. The lattice Boltzmann equation (LBE) method an alternative in the 2d computational fluid dynamics. *Revista Colombiana de Tecnologías de Avanzada*, 1(11), 2008.
- Frisch U., Hasslacher B., and Pomeau Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations. *Physical Review Letter*, 56:1505-1508, (1986).
- García, H. T. and L. A. P. Santos, “Métodos matemáticos aplicados en ingeniería química”, 1ª Edición, Editorial Universidad de Antioquía, 2013.
- Hardy, J., Pomeau and O. de Pazzis. Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions. *J. Math. Phys.*, 14 (12):1746-1759, 1973.
- Higuera, F. and J. Jiménez. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *Europhys. Lett* 9(7): 663-668, 1989.
- Higuera, F., Succi and R. Benzi. Lattice gas dynamics with enhanced collisions. *Europhys. Lett.* 9(4):345-349, 1989.
- Izquierdo E.S., *Computational Gas Dynamics with the Lattice Boltzmann Method: Preconditioning and Boundary Conditions*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, June 2008.
- Li Shi Lou., Lattice-Gas Automata and Lattice Boltzmann Equations for two-dimensional Hydrodynamics. PhD Thesis, Georgia Institute of Technology, April, 1993.
- Louden, K. C. “Lenguajes de programación”, 2ª Edición, Thomson, 2004.
- Maxwell B. J., *Lattice Boltzmann Mehods in Interfacial Wave Modelling*. PhD Thesis, The University of Edinburgh, 1997.
- Mc Namara, G. and G. Zanetti. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2332-2335, (1988).
- Núñez S. M^a. G. C., Méndez, M. M^a .G. C. and Solorza, F. J. “Introducción a la reología”, Primera edición, Instituto Politécnico Nacional, 2001.
- Pathria R. K., “Statistical Mechanics”, 2ª Edición, Elsevier, 2005.

Qian Y. H., d'Humieres D. and Lallemand P. Lattice BGK models for the Navier-Stokes equations. *Europhys. Lett*, 17(6): 479-484, 1992.

Ramírez. N. J, S. Introducción a la reología de alimentos, Universidad del Valle, Cali-Colombia, 2006.

Romeo T T., *Fundamentals of Food Process Engineering*, Third Edition, Springer, 2007.

Schwabl F. *Statistical mechanics*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, New York, 2002.

Serrano. M. M. M. Modelos para la hidrodinámica mesoscópica de fluidos simples y complejos. PHD. Thesis. Universidad Complutense de Madrid, 2002.

Siginer D A., De Kee D., and Chhabra R P., *Advances in the Flow and Rheology of Non-Newtonian Fluids*, Part B., Elsevier, 1999.

Smits, A. J., *A Physical Introduction to Fluid Mechanics*, New Cork: Wiley, 2003.
Struchtrup H., *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas flows*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2005.

Succi S. *The Lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Oxford: Clarendon: Oxford University, 2001.

Usman R. Alim, Alireza Entezari and Torsten Möller, "The Lattice-Boltzmann Method on optimal sampling lattices", *Visualization and Computer Graphics, IEEE Transactions*, 15 July 2009.

Valiente B. A., *"Problemas de flujo de fluidos"*, 2ª Edición. Limusa, 2000.

Velázquez O.J.L., *"Simulación de fluidos no Newtonianos a través de medios porosos"*, tesis de doctorado, Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química – Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, México 2009.

Wolf-Gladrow D.A., *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction*. Springer-Verlag Telos, 2000.

www.gmrv.es/~cgarre/TAG3D_CFD

www.indisa.com/indisaonline/antiores/Indisa%20On%20line%2077

Y.H. Qian, D. d'Humieres, P. Lallemand, Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhys. Lett*. 17 (6) :479-84, 1992.

Yamaguchi H., *Engineering Fluid Mechanics*, Springer, 2008.