



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
MECÁNICA – METALMECÁNICA

SIMULACIÓN DE FLUIDOS PSEUDOPLÁSTICOS CON MÉTODOS ACTUALES
DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONALES Y SU COMPARACIÓN
CON DATOS EXPERIMENTALES.

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:
OSIRIS JAEL ELISA LEÓN GARCÍA

TUTOR
DR. JOSÉ LUIS VELÁZQUEZ ORTEGA

MÉXICO, D. F. ABRIL 2017

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Jaime Hinojosa Torres
Secretario: Dr. Andrés Herrera Vázquez
Vocal: Dr. José Luis Velázquez Ortega
1 er. Suplente: Dr. Ricardo Gaitan Lozano
2 d o. Suplente: M.I. Alberto Reyes Solis

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán y Facultad de Ingeniería de la UNAM.

TUTOR DE TESIS:

Dr. José Luis Velázquez Ortega



FIRMA

Agradecimientos

Nunca tendría las palabras correctas para poder agradecer a mi familia, sigo luchando a cada día por ser tan disciplinada y amable como mi padre Alonso León y ser tan valiente y alegre como mi madre Mara García. Siempre imagino su primera conversación, porque es lo que soy, soy una larga conversación entre ustedes, con momentos emocionantes, con silencios incómodos, mutando con el tiempo, esperando convertirme en alguien que merezca su orgullo. Hasta que llegue ese momento seguiré caminando con calma ya que siento su apoyo en mi espalda.

Cómo podría agradecer el amor y apoyo incondicional que siempre me has dado Arañita, justo en los momentos más oscuros, incluso antes de que caiga, tú ya te encuentras a un lado mío estirando tu brazo para ayudarme a levantarme. Parece nada espantarte y espero llegar a tener esa sabiduría para entender las sutilezas sin temerles, ver la vida y sonreírle coquetamente.

Mi hermano Ramsés León, mi hermano mayor, mi mejor amigo, el mejor ejemplo que podría tener. Me enseñaste desde amarrar mis agujetas hasta lo más importante y lo que siempre atesoraré, a ser feliz. Gracias Ram estoy muy orgullosa de ti. Y por supuesto doy gracias por haber aprendido de la fuerza de mi tía Lupita, de la entereza y esperanza de Tabatita y de la tranquilidad de Israel.

También quiero agradecer a mi tutor el Dr. José Luis Velázquez Ortega, definitivamente el haber alcanzado esta meta hubiera resultado imposible sin su apoyo y no solo me dio su consejo académico, también me guio para mejorar como persona. No sé lo que me deparé el futuro pero siempre intentaré seguir su ejemplo conservando su honestidad y trabajo duro.

Quiero también agradecer la dedicación que tuvieron mis profesores en la maestría. Los consejos, las pláticas y las valiosas aportaciones a este trabajo del Dr. Jaime Hinojosa, el Dr. Andrés Herrera, el Dr. Ricardo Gaitan y el M.I. Alberto Reyes.

Agradezco al Consejo de Ciencia y Tecnología (CONACYT) y a la Universidad Nacional Autónoma de México por su apoyo y patrocinio para la realización de este proyecto de tesis.

Y por último quiero darle las gracias al Ing. Antonio Lopez Q.E.P.D. su recuerdo siempre me hace anhelar la aventura.

INDICE

INDICE DE FIGURAS	i
INDICE DE TABLAS	v
RESUMEN	vi
1 BASES DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS	1
1.1 MOVIMIENTO DE FLUIDOS.....	1
1.2 DESCRIPCIÓN LAGRANGIANA Y EULERIANA	3
1.3 ECUACIÓN DE CONTINUIDAD.....	4
1.4 ECUACIÓN DE NAVIER-STOKES.....	7
1.5 FLUIDOS NO NEWTONIANOS	9
1.5.1 FLUIDOS DE LA POTENCIA	13
1.5.2 ESFUERZO DE CORTE Y VELOCIDAD DE DEFORMACIÓN EN TUBERÍAS.....	15
REFERENCIAS.....	19
2 FUNDAMENTOS DE REDES DE BOLTZMANN	21
2.1 ENFOQUE MACROSCÓPICO, ENFOQUE MICROSCÓPICO Y ENFOQUE MESOSCÓPICO	21
2.2 FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN.....	22
2.3 DISTRIBUCIÓN DE MAXWELL-BOLTZMANN	23
2.4 ECUACIÓN DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN	26
2.5 TEOREMA H.....	29
2.6 MODELO BGK	30
2.7 EL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMANN	30
REFERENCIAS.....	32
3 EL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMAN PARA LA DINÁMICA DE FLUIDOS.....	34
3.1 CONFIGURACIONES DE REJILLA.....	34
3.2 CONDICIONES DE FRONTERA	38
3.3 CONDICIONES DE FRONTERA PERIÓDICAS.....	40
3.4 CONDICIONES DE FRONTERA “BOUNCE-BACK”	42

3.5	PASOS DE LA SIMULACIÓN	43
3.5.1	INICIO	44
3.5.2	PROPAGACIÓN	44
3.5.3	COLISIÓN	44
3.6	EL PROGRAMA.....	45
	REFERENCIAS.....	46
4	SIMULACIÓN DE FLUIDOS PSEUDOPLÁSTICOS CON EL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMANN .	48
4.1	VALIDACIÓN DEL MODELO.....	48
4.2	SIMULACIÓN DE FLUIDOS CON EL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMANN CON DATOS EXPERIMENTALES DE GOMAS DE FLAMBOYAN	58
4.2.1	ANTECEDENTES	58
	REFERENCIAS.....	72
5	CONCLUSIONES	74

INDICE DE FIGURAS

1.1	Flujo de masa en un volumen de control.....	5
1.2	Gradiente de presión en dirección x.....	7
1.3	Relación entre el esfuerzo de corte y velocidad de deformación para un fluido Newtoniano.....	12
1.4	Relación entre el esfuerzo de corte y velocidad de deformación para diferentes tipos de fluidos.....	12
1.5	Relación entre el esfuerzo de corte y velocidad de deformación para fluido pseudoplástico y dilatante.....	14
2.1	Escala microscópica, escala mesoscópica y escala macroscópica	22
2.2	Espacio fase.....	24
2.3	Estado inicial y final aplicando una fuerza externa F.....	27
3.1	Modelo D1Q3 y D1Q5	34
3.2	Modelo D2Q9	35
3.3	Modelo D3Q15 y Modelo D3Q27	35
3.4	a) Direcciones de velocidad para el modelo D2Q9, b) graficas del seno(x) y coseno(x).....	36
3.5	Rejilla de NxM designadas las posiciones de frontera como Norte, Sur, Este y Oeste	38
3.6	Rejilla de NxM mostrando las funciones de distribución en los nodos	40
3.7	Aplicación de condiciones periódicas	41
3.8	Función de distribución contra una frontera no deslizante	42
3.9	Diagrama de flujo para la simulación utilizando redes de Boltzmann.....	43

3.10	Programa utilizado para la simulación de fluidos pseudoplásticos	45
4.1	Estado estacionario para un fluido pseudoplástico, para un valor de índice de comportamiento al fluido igual a 0.5.....	50
4.2	Programa para simular fluidos pseudoplásticos con el método de redes de Boltzmann.....	51
4.3	Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.2$, con un porcentaje de error relativo de 0.7739%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann.....	51
4.4	Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.3$, con un porcentaje de error relativo de 0.7658%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann.....	52
4.5	Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.4$, con un porcentaje de error relativo de 0.7312%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann.....	53
4.6	Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.5$, con un porcentaje de error relativo de 0.7899%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann.....	53
4.7	Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.6$, con un porcentaje de error relativo de 0.7806%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann.....	54
4.8	Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.7$, con un porcentaje de error relativo de 0.7503%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann.....	54
4.9	Perfiles de velocidades para un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 , obtenidos con la ecuación (4.5)	55
4.10	Perfiles de velocidades para un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 ., obtenidos a partir de las simulaciones con el método de redes de Boltzmann.....	56

4.11	Comparación de los Perfiles de velocidad para un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.2, 0.3, 0.4$, obtenidos a partir de las simulaciones con el método de redes de Boltzmann y con solución analítica	57
4.12	Comparación de los Perfiles de velocidad para un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.5, 0.6, 0.7$, obtenidos a partir de las simulaciones con el método de redes de Boltzmann y con solución analítica	57
4.13	Graficas de flujo para goma flamboyán (muestra A), GN-4%, pH=9.0@ 5°C	60
4.14	Graficas de flujo para goma flamboyán (muestra B), GN-4%, pH=9.0@ 5°C	60
4.15	Graficas de flujo para goma flamboyán (muestra A), GN-4%, pH=9.0@ 25°C	61
4.16	Graficas de flujo para goma flamboyán (muestra B), GN-4%, pH=9.0@ 25°C	61
4.17	Graficas de flujo para goma flamboyán (muestra A), GN-4%, pH=9.0@ 45°C	62
4.18	Graficas de flujo para goma flamboyán (muestra B), GN-4%, pH=9.0@ 45°C	62
4.19	Perfiles de velocidad utilizando las ecuaciones (4.4) y (4.5) para los valores de $n = 0.5, 0.52, 0.4708, 0.4961, 0.5$ y 0.46 , con valores de $k = 16.06, 16.32, 13.8158, 12.0731, 7.84$ y $13.47 \text{ Pa}\cdot\text{s}^n$ respectivamente.....	63
4.20	Acercamientos de los perfiles de velocidad para los valores de $n = 0.5a, 0.52, 0.4708, 0.4961, 0.5b$ y 0.46	64
4.21	Programa para simular fluidos pseudoplásticos con el método de redes de Boltzmann, para un valor de $n = 0.5$ y $k_{LB} = 8.1486 \times 10^{-5}$	67
4.22	Perfiles de velocidad con redes de Boltzmann y con la solución analítica utilizando las ecuaciones (4.4) y (4.5) para los valores de $n = 0.5, 0.52, 0.4708, 0.4961, 0.5$ y 0.46 , con valores adimensionales de velocidad y de posición.....	68
4.23	Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.5$, y $k = 16.06 \text{ Pa}\cdot\text{s}^n$	69

4.24	Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.52$, y $k = 16.32 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$	69
4.25	Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.4708$, y $k = 13.8158 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$	70
4.26	Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.4961$, y $k = 12.0731 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$	70
4.27	Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.5$, y $k = 7.84 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$	71
4.28	Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.46$, y $k = 13.47 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$	71

INDICE DE TABLAS

4.1	Datos experimentales obtenidos para una goma Flamboyán obtenidos en un Viscosímetro Haake RT20	59
4.2	Conversión de unidades físicas a unidades de rejilla para algunas variables utilizadas.....	65
4.3	Valores del índice de consistencia en unidades de red.....	66

RESUMEN

En este trabajo, se presenta el método de redes de Boltzmann como una alternativa para abordar problemas concernientes a la mecánica de fluidos computacional, la cual ha demostrado ser una herramienta efectiva en las dos décadas pasadas. En el caso específico del área de metal mecánica, una aplicación de gran importancia es la concerniente a la producción de materiales, en el cual se tiene el procesamiento de aleaciones en estado semisólido, en sus versiones, *Rheocasting*, *Thixoforming*, *Thixoforging* o *Thixocasting*.

Los temas principales de esta tesis son: la descripción del modelo de redes de Boltzmann, la implementación del mismo, la validación del método y la aplicación a un caso real con datos experimentales.

En el primer tema, se explican los fundamentos del método, los cuales se sustentan en la física estadística. Ya que esta disciplina es muy amplia, no se entra en detalle y solo se recurre a conceptos de la misma, los cuales permitirán entender el método de redes de Boltzmann.

En el desarrollo del trabajo se aplicó un modelo D2Q9, por lo que para el segundo tema, se explica en que consiste el método, así como su implementación. El objetivo es mostrar el algoritmo utilizado, además de abordar temas de gran importancia como son las condiciones de fronteras periódicas y las no deslizantes. En lo que concierne al tercer tema, se resolvió la ecuación de movimiento y se utilizó el modelo de la potencia para el caso de un fluido no Newtoniano obteniendo el perfil de velocidades y el flujo de Poiseville. Lo anterior, con la finalidad de validar el modelo propuesto de redes de Boltzmann para fluidos pseudoplásticos.

Por último y con la intención de aplicarlo a datos reales, se realizaron simulaciones a diferentes condiciones para muestras de goma de flamboyán, la cual presentó para estas condiciones un comportamiento reológico del modelo de la potencia, específicamente de un fluido pseudoplástico. Un punto importante en este tema fue la aplicación de la conversión de unidades reales a unidades de red para poder realizar todas las simulaciones.

1 BASES DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS

1.1 MOVIMIENTO DE FLUIDOS

El movimiento de fluidos es un fenómeno común en la vida diaria. El estudio del mismo es importante para entender la física involucrada, así como su control en diversas áreas de la ingeniería. La astrofísica, meteorología, oceanografía, aerodinámica, hidrodinámica, lubricación, ingeniería marina, turbo maquinaria, ingeniería de yacimientos e ingeniería de la combustión, son algunos campos donde la mecánica de fluidos se emplea.

Los sistemas de flujo de fluidos juegan un papel muy importante en la mayoría de las operaciones de extracción y refinación de metales, la importancia radica a que los metales en proceso se encuentran en estado fundido. Por ejemplo, en un horno básico con inyección de oxígeno BOF utilizado en la fabricación de acero. En el sistema BOF, pueden identificarse fenómenos relacionados con el flujo de fluidos como son, la formación de chorros (supersónicos), interacción de chorros de gas con fundidos y la enucleación y crecimiento de burbujas de gas, flujos circulantes impulsados por burbujas, etc.

En los sistemas a) gas-sólido, b) gas-líquido, c) líquido-sólido y d) líquido-líquido, están presentes los fenómenos de flujo de fluidos, en los primeros incluyen el alto horno, la sintetización y la tostación de menas. En el segundo, la desgasificación al vacío, la conversión de cobre, la desoxidación gaseosa del cobre y la agitación con argón, así como el proceso de fabricación de acero con oxígeno. En el tercero, la fusión de chatarra y la solidificación (macrosegregación). Por último, tenemos el amplio espectro de interacciones escoria-metal, tales como la transferencia de masa escoria-metal en la fabricación de acero, la coalescencia y la flotación de inclusiones, solo por citar algunos.

Un fluido se define como una sustancia que sufre una deformación cuando se le aplica un esfuerzo de corte y se puede describir en tres niveles: dinámica molecular, teoría cinética e hidrodinámica.

- a. Dinámica molecular. Fundamentada en la mecánica de Newton y en consecuencia en la evolución de la posición y la velocidad de cada una de las partículas; evaluarlas resulta muy complejo debido a que tendríamos una gran cantidad de ecuaciones del orden del número de Avogadro.
- b. Teoría cinética. Sus principios se basan en la física estadística e involucra funciones de distribución de partículas, la evolución de las mismas está considerada en la ecuación de Boltzmann.
- c. Hidrodinámica. Sustentada en leyes de conservación macroscópicas, en las cuales, el fluido es considerado como un continuo. El fluido es gobernado por la ecuación de continuidad y las ecuaciones de Navier-Stokes.

Una medida para categorizar el régimen de flujo, es a través del número de Knudsen (Kn), el cual se define como el cociente entre la trayectoria libre promedio entre las partículas (λ) y la longitud macroscópica característica (l).

La dinámica de la materia consiste en moléculas que se encuentran en constante movimiento, que al encontrarse con otras colisionan. Sin embargo en la aproximación del continuo, se ignora la existencia de la estructura molecular y se considera una distribución continua de materia. Este punto de vista es válido si λ es mucho más pequeña que l . en otras palabras, el número de Knudsen deberá ser mucho más pequeño que la unidad ($Kn < 0.01$) para que la hipótesis del continuo sea válida. Los modelos continuos se basan en las ecuaciones de Navier-Stokes.

1.2 DESCRIPCIÓN LAGRANGIANA Y EULERIANA

Al estudiar el movimiento de un fluido existen dos descripciones básicas, en la Lagrangiana se estudia la posición de cada partícula en el transcurso del tiempo, si se tienen las posiciones de todas las partículas en el tiempo se tendrá la descripción completa del movimiento del fluido. En la descripción Euleriana se fija la atención en un punto fijo en el espacio y se analizan las características de las partículas que pasan por dicho punto como función del tiempo, si tenemos el análisis en todos los puntos del espacio se tendrá la descripción completa del flujo.

Considerando una variable de campo α y su análisis en el sistema Euleriano (la variable en función del tiempo) el cambio de $\alpha(x,y,z,t)$ en un tiempo transcurrido δt se puede expresar como:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} \delta t + \frac{\partial \alpha}{\partial x} \delta x + \frac{\partial \alpha}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \alpha}{\partial z} \delta z \quad (1.1)$$

En el sistema Lagrangiano, siguiendo una partícula, el cambio de α en un tiempo δt es $(D\alpha/Dt)\delta t$; como la variación de α es la misma independientemente de que se utilice un sistema Euleriano o Lagrangiano, se puede escribir:

$$\frac{D\alpha}{Dt} \delta t = \frac{\partial \alpha}{\partial t} \delta t + \frac{\partial \alpha}{\partial x} \delta x + \frac{\partial \alpha}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \alpha}{\partial z} \delta z \quad (1.2)$$

Dividiendo entre δt la ecuación (1.2) obtenemos

$$\frac{D\alpha}{Dt} = \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \alpha}{\partial x} \frac{\delta x}{\delta t} + \frac{\partial \alpha}{\partial y} \frac{\delta y}{\delta t} + \frac{\partial \alpha}{\partial z} \frac{\delta z}{\delta t} \quad (1.3)$$

Siendo $\frac{\delta x}{\delta t}$, $\frac{\delta y}{\delta t}$, $\frac{\delta z}{\delta t}$ las velocidades de la partícula u , v , w en las direcciones x , y , z , respectivamente. Sustituyendo estas velocidades en la ecuación (1.3)

$$\frac{D\alpha}{Dt} = \frac{\partial\alpha}{\partial t} + \frac{\partial\alpha}{\partial x}u + \frac{\partial\alpha}{\partial y}v + \frac{\partial\alpha}{\partial z}w \quad (1.4)$$

La ecuación anterior puede escribirse en notación vectorial obteniendo

$$\frac{D\alpha}{Dt} = \frac{\partial\alpha}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla)\alpha \quad (1.5)$$

La ecuación (1.5) se conoce como la derivada material o sustancial. Esta derivada proporciona la razón de cambio respecto al tiempo de una propiedad cualquiera del fluido (temperatura, velocidad, etcétera).

1.3 ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

Considerando un volumen de control cartesiano fijo como se muestra en la figura (1.1), donde en la cara de la izquierda ingresa el flujo de masa y sale del volumen de control por la cara derecha. La razón de cambio de masa con respecto al tiempo dentro del volumen de control es igual a la razón de masa que fluye dentro del volumen de control menos la razón de cambio que sale de dicho volumen de control, esto es:

$$\int \frac{\partial\rho}{\partial t} dV = \sum_i (\rho_i A_i V_i)_{entrada} - \sum_i (\rho_i A_i V_i)_{salida} \quad (1.6)$$

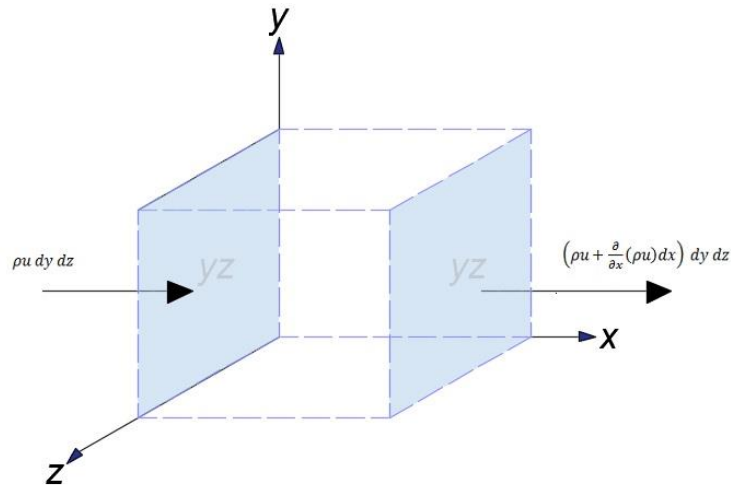


Figura 1.1 Flujo de masa en un volumen de control

Tomando en cuenta todo el volumen de control se tienen tres caras de entrada del flujo, una en cada dirección cartesiana:

$$\begin{aligned}
 \text{En dirección x: } & \rho u \, dy \, dz \\
 \text{En dirección y: } & \rho v \, dx \, dz \\
 \text{En dirección z: } & \rho w \, dx \, dy
 \end{aligned}
 \tag{1.7}$$

y tres caras de salida, una en cada dirección cartesiana

$$\begin{aligned}
 \text{En dirección x: } & \left(\rho u + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) \, dx \right) dy \, dz \\
 \text{En dirección y: } & \left(\rho v + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) \, dy \right) dx \, dz \\
 \text{En dirección z: } & \left(\rho w + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) \, dz \right) dx \, dy
 \end{aligned}
 \tag{1.8}$$

Luego entonces, sustituyendo las ecuaciones (1.7) y (1.8) en la ecuación (1.6) tenemos

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz - \rho u dy dz - \rho v dx dz - \rho w dx dy \\
& + \left(\rho u + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) dx \right) dy dz + \left(\rho v + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) dy \right) dx dz \\
& \quad + \left(\rho w + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) dz \right) dx dy = 0 \\
\Rightarrow & \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz - \rho u dy dz - \rho v dx dz - \rho w dx dy + \rho u dy dz \\
& + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) dx dy dz + \rho v dx dz + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) dy dx dz \\
& \quad + \rho w dx dy + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) dz dx dy = 0 \\
& \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) dx dy dz \\
& + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) dy dx dz + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) dz dx dy = 0
\end{aligned} \tag{1.9}$$

Dividiendo la ecuación (1.9) entre un diferencial de volumen $dx dy dz$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0 \tag{1.10}$$

La ecuación (1.10) es llamada la *ecuación de continuidad*. Su representación en formulación vectorial es de la siguiente forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{u}) = 0 \tag{1.11}$$

1.4 ECUACIÓN DE NAVIER-STOKES

Cuando en un fluido existe un gradiente de presión como el que se muestra en la figura (1.2), puede expresarse como:

$$dF_x = p \, dydz - \left(p + \frac{dp}{dx} dx \right) dydz = -\frac{dp}{dx} dx dydz \quad (1.12)$$

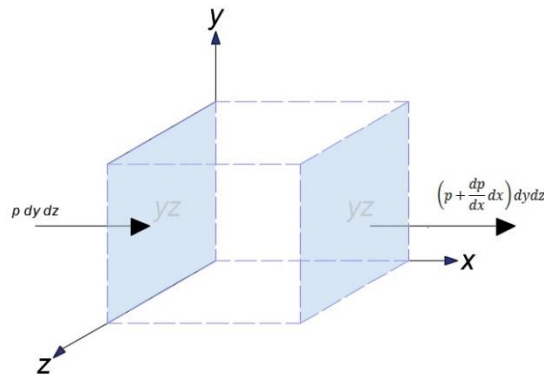


Figura 1.2 Gradiente de presión en dirección x

Considerando el espacio tridimensional, se tiene la fuerza de presión total (F_p), de la siguiente manera

$$dF_p = \overbrace{\left(-\frac{dp}{dx} - \frac{dp}{dy} - \frac{dp}{dz} \right)}^{-\nabla p} dx dy dz \quad (1.13)$$

También existe la fuerza gravitacional (F_g) que actúa sobre toda la masa del volumen infinitesimal, que se expresa como

$$F_g = \rho \vec{g} \quad (1.14)$$

Donde \vec{g} es la aceleración de la gravedad. También puede haber fuerzas debido a gradientes de tensiones viscosas

$$F_\mu = \mu \left(\frac{\partial^2 \vec{v}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{v}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{v}}{\partial z^2} \right) = \mu \nabla^2 \vec{v} \quad (1.15)$$

Para un fluido Newtoniano en tres dimensiones los esfuerzos del flujo son

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= 2\mu \frac{du}{dx}; \quad \sigma_{yy} = 2\mu \frac{dv}{dy}; \quad \sigma_{zz} = 2\mu \frac{dw}{dz} \\ \sigma_{xy} &= \sigma_{yx} = \mu \left(\frac{du}{dy} + \frac{dv}{dx} \right); \quad \sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \mu \left(\frac{dw}{dx} + \frac{du}{dz} \right); \\ \sigma_{yz} &= \sigma_{zy} = \mu \left(\frac{dv}{dz} + \frac{dw}{dy} \right) \end{aligned} \quad (1.16)$$

La ecuación de movimiento en formulación Lagrangiana es la suma de todas las fuerzas que interactúan en el sistema y es igual a la densidad por la aceleración del fluido.

$$\rho g + \mu \nabla^2 \vec{v} - \nabla p = \rho \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (1.17)$$

La ecuación (1.17) desarrollada para los componentes x, y, z:

$$\begin{aligned} \text{componente x: } \rho g_x - \frac{dp}{dx} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{du}{dt} \\ \text{componente y: } \rho g_y - \frac{dp}{dy} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{dv}{dt} \\ \text{componente z: } \rho g_z - \frac{dp}{dz} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{dw}{dt} \end{aligned} \quad (1.18)$$

La ecuación (1.18) se conoce como la ecuación de Navier-Stokes.

1.5 FLUIDOS NO NEWTONIANOS

Hablar de reología y de fluidos no Newtonianos son temas esencialmente interdisciplinarios en su naturaleza y también son amplios en sus áreas de aplicación. El comportamiento de los fluidos no Newtonianos se encuentra en casi todas las industrias de procesamiento químico.

Se dice que la “reología es la ciencia que estudia la relación entre el esfuerzo y la deformación a través de relaciones matemáticas constitutivas reológicas de estado”. Los factores que determinan las características reológicas de un material son muy complejos y su comprensión requiere la contribución de Físicos, Químicos, Matemáticos e Ingenieros aplicados, entre otros. Así mismo, las áreas de aplicación son también extremadamente amplias y diversas, y requieren un aporte importante de Ingenieros con amplia experiencia, aunque los Ingenieros Químicos y de Proceso, en virtud de su papel en el manejo y procesamiento de materiales complejos (tales como espumas, suspensiones, emulsiones, polímeros fundidos y soluciones, etc.), tienen un interés enorme en este tema.

Entre las tecnologías utilizadas para la producción de materiales, se encuentra el procesamiento de aleaciones en estado semisólido denominado, en sus distintas versiones, Rheocasting, Thixoforming, Thixoforging o Thixocasting.

En los procesos convencionales no se usan aleaciones en estado semisólido porque, en la solidificación normal de una aleación, se forma una estructura dendrítica que se vuelve muy rígida con sólo un 20 % de sólido. Además, es necesario considerar que una aleación parcialmente solidificada no puede experimentar una deformación homogénea sin sufrir agrietamientos y sin la aparición de segregaciones. Por otra parte, la fabricación de algunas aleaciones no pueden efectuarse por ninguno de estos dos métodos clásicos, y debe recurrirse a otras tecnologías (por ejemplo, metalurgia de polvos).

Dentro de las nuevas tecnologías aplicadas a la fabricación de aleaciones clásicas o nuevos tipos de materiales, se encuentra el conformado en estado semisólido denominado, en sus distintas versiones, Rheocasting, Thixoforming, Thixoforging o Thixocasting. El fundamento de esta tecnología estriba en la utilización de una aleación que, debido a una preparación previa por diferentes métodos, presenta una estructura no dendrítica.

El Rheocasting es el proceso más utilizado. En dicho proceso el metal fundido es enfriado mientras hay una agitación, ya sea por un método mecánico, electromecánico o por gravedad. Debido al enfriamiento, el metal fundido comienza a solidificar en las paredes del crisol y comienzan a formarse estructuras dendríticas; sin embargo debido a la agitación, las dendritas que comienzan a formarse se rompen en partículas y son dispersadas de nuevo en el metal fundido. Esto da como resultado una mezcla de partículas solidificadas y metal fundido llamado metal semisólido.

El producto final obtenido por el Rheocasting es una microestructura de grano fino. Las ventajas del Rheocasting sobre los procesos clásicos de fundición son la disminución de la porosidad macroscópica (porosidad gaseosa, oxidación), debido a su alto nivel de homogeneidad de la estructura interna se obtienen mejores propiedades mecánicas y debido a que el proceso de Rheocasting se lleva a cabo a menor temperatura que en los métodos convencionales, existe menor ataque al molde, teniendo menor corrosión aumentando la vida útil del mismo.

Entre los métodos utilizados se encuentra el denominado Osprey, mediante el cual se obtiene una microestructura fina, homogénea y no dendrítica, apta para el procesamiento en estado semisólido. Dentro de estas aleaciones se encuentran las hipereutécticas de aluminio-silicio, con contenidos de silicio superiores al 20 % en masa. El interés en las aleaciones hipereutécticas de aluminio-silicio estriba en su ligereza, su buena resistencia al desgaste, su relativamente bajo coeficiente de expansión térmica y sus aceptables propiedades mecánicas, características que las convierten en opciones muy atractivas para las industrias del automóvil y aeronáutica. La combinación del proceso Osprey y el procesamiento en estado

semisólido ha permitido obtener aleaciones hipereutécticas de aluminio-silicio con contenidos elevados de silicio: Al-25%Si-5%Cu, Al-25%Si-5%Cu-2%Mg y Al-30%Si-5%Cu. La microestructura obtenida es fina y homogénea, sin presencia de grandes partículas de silicio primario.

En diversas investigaciones se ha demostrado que el metal semisólido tiene mayor viscosidad que el metal fundido presentando un comportamiento de fluido pseudoplástico. Por lo que se utiliza la ley de la potencia para describir su comportamiento en el modelado.

En el caso de un fluido Newtoniano, la relación entre el esfuerzo de corte y la velocidad de deformación está dada por la siguiente expresión:

$$\sigma = -\mu\dot{\gamma} \quad (1.19)$$

En la ecuación (1.19), “ σ ” es el esfuerzo de corte y “ $\dot{\gamma}$ ” se denota como velocidad de deformación, tasa de deformación, velocidad de corte (aunque en realidad presente dimensiones de $1/T$), una representación en una gráfica del comportamiento de estas dos variables se muestra en la figura (1.3), en ella se tiene una línea recta que parte del origen del sistema de coordenadas, siendo la pendiente la viscosidad “ μ ”.

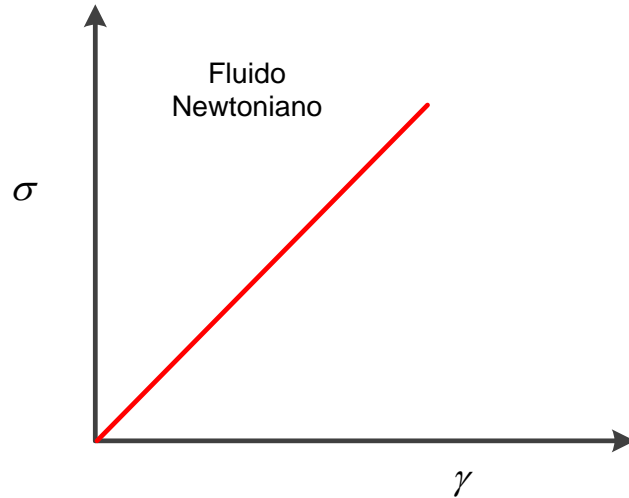


Figura 1.3 Relación entre el esfuerzo de corte y velocidad de deformación para un fluido Newtoniano.

Existe un gran número de fluidos en los que la relación entre el esfuerzo de corte y la velocidad de deformación no presentan el mismo comportamiento que la mostrada en la figura (1.3), por lo que se dice que estos son los llamados fluidos no Newtonianos; para tal efecto, pueden tener comportamientos como los mostrados en la figura (1.4).

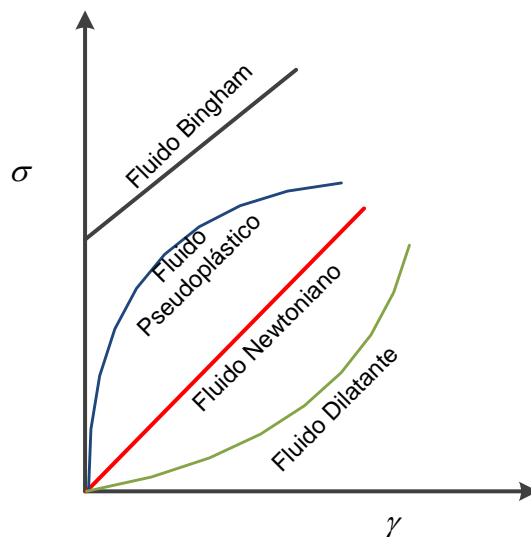


Figura 1.4 Relación entre el esfuerzo de corte y velocidad de deformación para diferentes tipos de fluidos.

1.5.1 FLUIDOS DE LA POTENCIA

Para fluidos que no cumplen con el modelo matemático presentado en la ecuación (1.1), y que la relación entre el esfuerzo de corte y la velocidad de deformación corresponde al mostrado en la ecuación (1.20), se denominan fluidos de la potencia.

$$\sigma = k\gamma^n \quad (1.20)$$

En la ecuación (1.20), k es el índice de consistencia, el cual presenta unidades de $\text{Pa} \cdot \text{s}^n$ y n es índice de comportamiento del fluido, que es adimensional. Para el caso en el que $k = \mu$ y $n = 1$, la ecuación (1.20) se convierte en el modelo para un fluido Newtoniano, tal como lo representa la ecuación (1.19). Para los valores del índice de comportamiento que se encuentran en un rango entre 0 y 1, indica un comportamiento adelgazante, por otro lado, para valores de $n > 1$ el comportamiento será espesante. Suele nombrarse pseudoplástico y dilatante para referirse al término adelgazante y espesante respectivamente.

El modelo de la potencia representado por la ecuación (1.20), suele ser representado en términos de la viscosidad aparente (η), la cual se define como el cociente entre el esfuerzo de corte y la velocidad de deformación, dando como resultado la ecuación (1.21).

$$\eta = \frac{\sigma}{\dot{\gamma}} = \frac{k\gamma^n}{\dot{\gamma}} = k\dot{\gamma}^{n-1} \quad (1.21)$$

La representación del comportamiento entre la viscosidad aparente y la velocidad de deformación para fluidos pseudoplástico y dilatantes es la siguiente

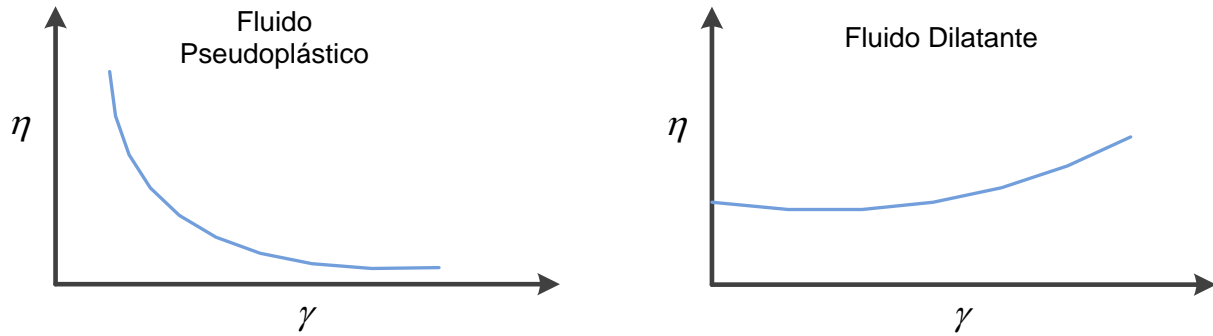


Figura 1.5 Relación entre el esfuerzo de corte y velocidad de deformación para fluido pseudoplástico y dilatante

Los fluidos pueden clasificarse en dependientes e independientes del tiempo, estos últimos son los que hemos abordado hasta este momento, ya que no presentan memoria. En el caso de los fluidos dependientes del tiempo, se tienen los tixotrópicos que se adelgazan con el tiempo y los reopécticos que se engosan con el tiempo.

La tixotropía es una característica según la cual un fluido viscoelástico disminuye su viscosidad aparente al ser agitado violentamente hasta alcanzar un estado estacionario después de un tiempo de aplicación de la agitación. Esto implica que los fluidos tixotrópicos muestran una disminución de la viscosidad o de la tensión de cortadura con el tiempo, bajo condiciones isotérmicas y velocidad de cortadura estacionaria. Se han reportado gráficas de este tipo obtenidas con aleaciones como Sn-15%Pb (5) o Al-4,5%Cu-1,5%Mg.

Una característica importante de las aleaciones que presentan comportamiento tixotrópico, es que al solidificar completamente pueden recuperar sus propiedades tixotrópicas en un posterior calentamiento hasta la temperatura del estado semisólido. Esta reversibilidad del comportamiento pseudoplástico se debe al proceso de aglomeración-desaglomeración que sufre la fase sólida primaria como consecuencia de la aplicación de la velocidad de agitación. Esta explicación está generalmente aceptada y consiste en la formación de aglomerados de la fase sólida primaria cuando la velocidad de agitación es baja: este fenómeno aumenta la viscosidad de la aleación. Si a continuación se aplica una elevada velocidad de agitación, los aglomerados se destruyen (desaglomeración) y baja la viscosidad de

la aleación. Por lo que se consigue un equilibrio dinámico a una velocidad de agitación determinada.

1.5.2 ESFUERZO DE CORTE Y VELOCIDAD DE DEFORMACIÓN EN TUBERÍAS

El contar con datos experimentales concernientes al esfuerzo de corte y la velocidad de deformación es necesario para determinar las propiedades reológicas de un fluido. En el caso de fluidos que sigue el comportamiento de un fluido de la potencia, la relación matemática entre la caída de presión que induce el flujo (ΔP) y el caudal resultante (Q), se obtiene a través de la ecuación de movimiento:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right] = -\nabla \cdot \vec{\sigma} - \nabla P + \rho \vec{g} \quad (1.22)$$

Para las condiciones de flujo en régimen laminar, estado estacionario, flujo isotérmico e incompresible y flujo unidimensional, se tiene que

$$-r\sigma_{rz} = \frac{\Delta P}{L} \frac{r^2}{2} + c_1 \quad (1.23)$$

Tomando como condición límite $\sigma_{rz} = 0$ y $r = 0$ en la ecuación (1.23), se obtiene el perfil de esfuerzo, el cual varía linealmente de acuerdo a la siguiente expresión

$$\sigma_{rz} = \frac{\Delta P r}{2L} \quad (1.24)$$

El esfuerzo de corte máximo corresponde al que se tiene en las paredes de la tubería, esto es, cuando $r = R$. Sustituyendo esta suposición en la ecuación (1.24), se tiene

$$\sigma_{\text{máx}} = \frac{\Delta P R}{2L} \quad (1.25)$$

Para un fluido de la potencia, se iguala la ecuación (1.24) con la ecuación (1.20). Resolviendo se tiene:

$$k \left(\frac{dv_z}{dr} \right)^n = \frac{\Delta P r}{2L} \Rightarrow \frac{dv_z}{dr} = \left(\frac{\Delta P r}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}}$$

Separando las variables se tiene:

$$dv_z = \left(\frac{\Delta P r}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} dr$$

Integrando ambos lados de la ecuación:

$$\begin{aligned} \int dv_z &= \int \left(\frac{\Delta P}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} r^{\frac{1}{n}} dr \\ \Rightarrow v_z &= \left(\frac{\Delta P}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} \frac{r^{\frac{1}{n}+1}}{\frac{1}{n}+1} + c_2 \\ \therefore v_z &= \left(\frac{\Delta P}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} (r)^{\frac{1}{n}+1} \left(\frac{n}{n+1} \right) + c_2 \end{aligned} \quad (1.26)$$

Para la ecuación (1.26) se toma la condición límite: $v_z = 0$; $r = R$, obteniéndose el perfil de velocidades siguiente

$$v_z = \left(\frac{\Delta P}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) \left[(r)^{\frac{1}{n+1}} - (R)^{\frac{1}{n+1}} \right] \quad (1.27)$$

Una vez obtenido el perfil de velocidades, se obtiene el flujo volumétrico de acuerdo a la siguiente expresión

$$Q = \iint \vec{v} \cdot d\vec{A} = \int_0^{2\pi} \int_0^R \left(\frac{\Delta P}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) \left[(r)^{\frac{1}{n+1}} - (R)^{\frac{1}{n+1}} \right] r dr d\theta \quad (1.28)$$

Desarrollando las integrales de la ecuación (1.28) obtenemos

$$Q = \pi \left(\frac{\Delta P}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{3n+1} \right) (R)^{\frac{1}{n+3}} \quad (1.29)$$

De la ecuación (1.29), despejamos la caída de presión para obtener

$$\frac{\sigma_{\max}}{2L} = k \left[\frac{Q}{\pi R^3} \left(\frac{3n+1}{n} \right) \right]^n \quad (1.30)$$

En la ecuación (1.30), podemos identificar del lado izquierdo, el esfuerzo de corte máximo obtenido en la ecuación (1.25); en consecuencia, la velocidad de deformación máxima de acuerdo a la ecuación (1.20).

El perfil de velocidades obtenido en la ecuación (1.27), puede expresarse en términos del flujo (Q)

$$\begin{aligned}
v_z &= \left(\frac{\Delta P}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) (R)^{\frac{1}{n+1}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right] \\
&= \overbrace{\pi \left(\frac{\Delta P}{2kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{3n+1} \right) (R)^{\frac{1}{n+3}}}^Q \frac{1}{\pi R^2} \left(\frac{3n+1}{n+1} \right) \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right]
\end{aligned} \tag{1.31}$$

Para la velocidad de deformación (γ), esta se obtiene derivando la ecuación (1.31) con respecto a r , es decir:

$$\frac{dv_z}{dr} = \frac{Q}{\pi R^2} \left(\frac{3n+1}{n+1} \right) \frac{d}{dr} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right] \tag{1.32}$$

En la ecuación (1.32), dv_z/dr es la velocidad de deformación, por lo que, para obtenerla se procede de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
\frac{dv_z}{dr} &= \frac{Q}{\pi R^2} \left(\frac{3n+1}{n+1} \right) \left\{ \frac{d}{dr} - \frac{d}{dr} \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right\} \\
\Rightarrow \frac{dv_z}{dr} &= \frac{Q}{\pi R^2} \left(\frac{3n+1}{n+1} \right) \left(\frac{n+1}{n} \right) \left(\frac{r^{\frac{1}{n}}}{R^{\frac{1}{n+1}}} \right) \\
\therefore \gamma &= \frac{Q}{\pi R^3} \left(\frac{3n+1}{n} \right) \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{n}}
\end{aligned} \tag{1.33}$$

Las ecuaciones para la velocidad de deformación, así como las del esfuerzo de corte son relaciones muy utilizadas en el movimiento de fluidos no Newtonianos a través de tuberías.

REFERENCIAS

- [1] Bruce R. Munson, Donald F. Young, Theodore H. Okiishi. *Fundamentals of Fluid Mechanics*. John Wiley & Sons Inc. USA 2002.
- [2] Bruno M. L. "Modelado y analisis del flujo de agua en medios porosos heterogéneos total o parcialmente saturados", Tesis de Doctorado, Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas. Universidad Nacional de la Plata, 2013.
- [3] Chhabra R. P. and Richardson J.F. "Non-Newtonian flow in the process industries", 1ª Edición, Butterworth,-Heinemann 1999.
- [4] D. Sámano, Mihir Sen. *Mécanica de Fluidos*. Universidad de Norte Dame 2009.
- [5] Elkin G. F. S., Cuesta I. and Saluela C. El método de la ecuación de Lattice Boltzmann (LBE) una alternativa en la dinámica de fluidos computacional 2D. *Revista Colombiana de Tecnología Avanzada*. 11(1): 42-46, 2008.
- [6] Frank M. White. *Fluid Mechanics*. Fourth Edition. Mc Graw Hill.
- [7] Franz, D. "Fluid Mechanics, An Introduction to the theory of fluid flows", 1ª Edición, Springer, 2008.
- [8] Fridtjov I. "Rheology and Non-Newtonian fluids", 1ª Edition, Springer, 2014.
- [9] M.C. Potter, D.C. Wiggert. *Mechanics of fluids*, Prentice Hall. New Jersey 1997.
- [10] Michel Rieutord. *Fluid Dynamics An Introduction*. Springer. France 1997.
- [11] Noelia Llorente Remartínez, "Validación del método de redes de Boltzmann para la simulación multifásica de un plato perforado de columna de destilación", proyecto tesis, Universidad Politécnica de Madrid, España. E.T.S. de Ingenieros Industriales. Madrid, Octubre de 2016.
- [12] Richard W. Johnson, *Handbook of Fluid Dynamics*, second edition. CRC Press 2016.
- [13] Skordos P. A. "Modeling flue pipes: subsonic flow, Lattice Boltzmann, and parallel distributed computers", Thesis Doctor of Philosophy, Massachusetts Institute of Technology, 1995.
- [14] Steffe, J. F. "Rheological Methods in food process engineering", 2ª Edition, Freeman Press, 1996.
- [15] Steffe, J. F. and Daubert, C. R. "Bioprocessing Pipelines: Rheology and Analysis", Freeman Press, 2006.
- [16] Szekely J. "Fenomenos de flujo de fluidos en procesamiento de metales", Limusa, 1988.

- [17] Valer J. Rodriguez J. M. and Urcola J. J. Conformado de aleaciones en estado semisólido. Aplicación a aleaciones hipereutécticas de Al-Si. *Rev. Metal. Madrid*, 32 (4), 1996.
- [18] George E. Totten, Kiyoshi Funatani, Lin Xie. Handbook of metallurgical process design. Marcel Dekker, Inc. New York 2004.
- [19] Li Yageng, Mao Weimin, Zhu Wenzhi, Yang Bin. Rheological behavior of semi-solid 7075 aluminum alloy at steady state. *Rev.China Foundry* Vol.11 no.2. Beijing 2014.

2 FUNDAMENTOS DE REDES DE BOLTZMANN

2.1 ENFOQUE MACROSCÓPICO, ENFOQUE MICROSCÓPICO Y ENFOQUE MESOSCÓPICO

Existen dos enfoques en la dinámica de fluidos, el enfoque microscópico y el macroscópico. En el enfoque microscópico se necesita conocer para cada molécula con las que este conformado el fluido su posición, velocidad y trayectoria a intervalos de tiempo. Si se realiza una buena aproximación de estas moléculas a partículas y considerando todas las fuerzas intermoleculares, se puede modelar sus movimientos conforme a la mecánica de Newton y esto nos llevaría a un sistema de ecuaciones que en principio tienen solución; sin embargo el número de ecuaciones es del orden del número de Avogadro (10^{23}) en un solo paso de tiempo (figura 2.1(a)).

Por otra parte en el enfoque macroscópico se considera el fluido como un medio continuo, sin considerar las posibles discontinuidades existentes a nivel microscópico y podemos resolver el sistema mediante las leyes de conservación (de masa, energía y cantidad de movimiento) en un volumen de control. Estas ecuaciones son ecuaciones diferenciales, pero pueden resultar complejas por las condiciones de frontera, la geometría, el no ser lineales, sin embargo, una alternativa sería un esquema de diferencias finitas, volúmenes finitos o elementos finitos; donde se discretiza el dominio y cada volumen o nodo cuenta con una colección de partículas (en el orden de 10^6). La presión, la temperatura y la velocidad de todas estas partículas son representadas por un valor nodal, o un promedio sobre un volumen finito. Las propiedades fenomenológicas tales como la viscosidad, la conductividad térmica, la capacidad térmica, etc. son en general parámetros conocidos (excepto para problemas irreversibles). Y se resuelve mediante las ecuaciones de Navier-Stokes (figura 2.1(c)).

Ludwing Boltzmann encuentra un punto medio entre el enfoque macroscópico y el enfoque microscópico. En esta meso escala se considera el comportamiento de una colección de partículas como una unidad. Las propiedades de esta colección de partículas son representadas por una función de distribución (figura 2.1(b)).

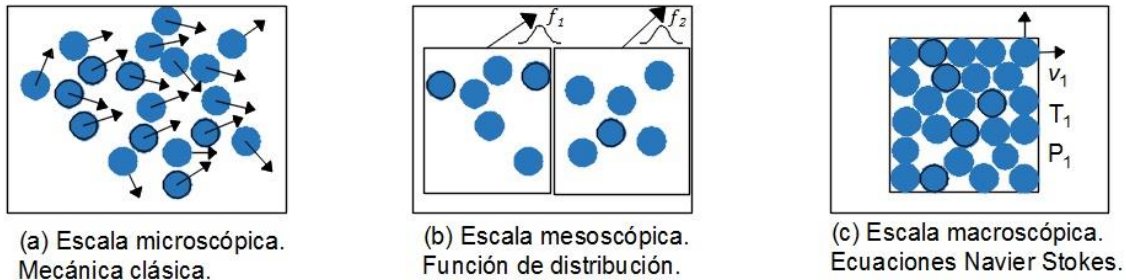


Figura 2.1 Escala microscópica, escala mesoscópica y escala macroscópica

2.2 FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN

James Clerk Maxwell llega a la conclusión que no es importante conocer la posición y velocidad de cada una de las moléculas en todo paso de tiempo por lo que se introduce el concepto de función de distribución, que se define como la probabilidad de encontrar una molécula alrededor de la posición \vec{r} a un tiempo t y que su velocidad está dentro de un rango de velocidades \vec{v} .

Un aspecto importante al hablar de la función de distribución es lo concerniente al espacio fase, esto es, un espacio de $6N$ dimensiones, donde una de las coordenadas cartesianas son las 3 componentes para determinar la posición de los centros de las partículas esféricas a las que aproximamos las moléculas y en el otro eje están los tres componentes de las velocidades \vec{v} en un paso de tiempo $n(\vec{r}, \vec{v}, t)$. En otras palabras un punto en este espacio fase contiene la información exacta de posición con sus tres componentes y la velocidad con sus tres componentes de la partícula. El resolver todo el sistema de ecuaciones; que nos

resultarían de un análisis microscópico; nos daría toda la información necesaria contenida en el espacio de fase. Sin embargo, cuando el espacio fase no se conoce con precisión absoluta se opta por utilizar una función de densidad de partículas en el espacio fase la cual sólo dependa de la posición de la partícula y su velocidad, lo que puede expresarse como:

$$n(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3r d^3v \quad (2.1)$$

Que es el número de partículas en d^3r , alrededor de la posición \vec{r} a un tiempo t con una velocidad en el espacio d^3v alrededor de c .

Integrando la ecuación (2.1) respecto a la velocidad, se obtiene la densidad de partícula ($N(\vec{r}, t) d^3r$); dejando todo en función de la posición y el número esperado de partículas en d^3r alrededor de \vec{r} en un tiempo t

$$N(\vec{r}, t) = \int d^3v n(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (2.2)$$

Al normalizar $n(\vec{r}, \vec{v}, t)$ se obtiene una función de distribución de probabilidad o función de densidad con una normalización unitaria ($\int d^3v n(\vec{r}, \vec{v}, t) = 1$)

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{n(\vec{r}, \vec{v}, t)}{N(\vec{r}, t)} \quad (2.3)$$

2.3 DISTRIBUCIÓN DE MAXWELL-BOLTZMANN

De acuerdo con Boltzmann, existe una profunda conexión entre la entropía y el análisis estadístico del posible estado del sistema. Si un sistema aumenta su entropía, las variables macroscópicas modificarán sus valores correspondientes.

Boltzmann propone examinar las propiedades de conjuntos de moléculas, por lo cual divide este espacio fase en celdas de tal forma que en cada celda existan muchas moléculas (n_i) en cada paso de tiempo y se asigna una energía e_i a cada rejilla (figura 2.2). En un instante de tiempo entonces es lógico expresar que la suma de las moléculas contenidas en cada celda es igual al número total de moléculas y de igual forma la suma de las energías de cada celda es igual a la energía total del sistema.

$$\begin{aligned} n_1 + n_2 + n_3 + \dots + n_i &= N \quad \text{y} \\ e_1 + e_2 + e_3 + \dots + e_i &= E \end{aligned} \quad (2.4)$$

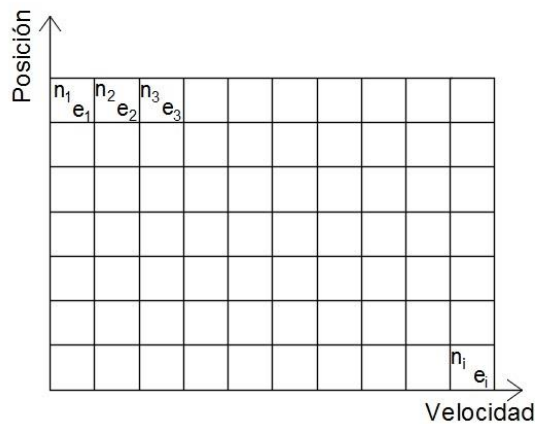


Figura 2.2 Espacio fase

Es importante mencionar que a cada paso de tiempo las moléculas en cada celda cambiaran; las moléculas no se encuentran estáticas; pero tomando en cuenta los postulados de Clausius sobre la entropía, que en un sistema cerrado en equilibrio, la entropía tiene un valor máximo. Entonces Boltzmann afirma que en un sistema en equilibrio, debe existir una distribución de moléculas en cada celda que se presenta con mucha mayor frecuencia que las otras distribuciones.

Entonces Boltzmann encontró que para cualquier sistema grande o pequeño en equilibrio térmico, a una temperatura T dada, la probabilidad de estar en un estado en particular de la energía E es proporcional a $e^{-E/kT}$.

$$f(E) = Ae^{-E/kT} \quad (2.5)$$

Si E es la energía cinética en dirección x , entonces:

$$E = \frac{1}{2} m \vec{v}_x^2 \quad (2.6)$$

Para una función de probabilidad normalizada, la función de la probabilidad integrada para todos los valores de la velocidad (desde menos infinito hasta más infinito) debe ser uno:

$$\int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-\frac{m\vec{v}_x^2}{2kT}} = 1 \quad (2.7)$$

Por lo tanto

$$A = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \quad (2.8)$$

Por lo tanto la probabilidad de encontrar la velocidad v_x , se conoce sustituyendo la ecuación (2.8) en la (2.5):

$$f(\vec{v}_x) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\vec{v}_x^2}{2kT}} \quad (2.9)$$

Considerando la probabilidad de una velocidad tridimensional \vec{v} donde

$$\vec{v}^2 = \vec{v}_x^2 + \vec{v}_y^2 + \vec{v}_z^2 \quad (2.10)$$

La probabilidad de $f(\vec{v})$ es la multiplicación de las probabilidades de cada función, esto es:

$$f(\vec{v}) = f(\vec{v}_x)f(\vec{v}_y)f(\vec{v}_z) \quad (2.11)$$

Lo que nos lleva a

$$f(\vec{v}) = \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} e^{-\frac{m(\vec{v}_x^2 + \vec{v}_y^2 + \vec{v}_z^2)}{2kT}} \quad (2.12)$$

Combinando la ecuación (2.10) y (2.12).

$$f(\vec{v}) = \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2kT}} \quad (2.13)$$

La ecuación (2.13) es la función de distribución de Maxwell-Boltzmann.

2.4 ECUACIÓN DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN

Si consideramos un gas en el cual existe una fuerza externa F y que no existe ninguna colisión entre las partículas, en un paso de tiempo dt , la velocidad v cambiará a $mv + Fdt$ y por supuesto su posición irá de r a $r + vdt$. Como el número de moléculas es constante y se encuentran en función de la misma dirección, entonces se puede escribir:

$$f(r + vdt, mv + Fdt, t + dt) drdv - f(r, v, t) drdv = 0 \quad (2.14)$$

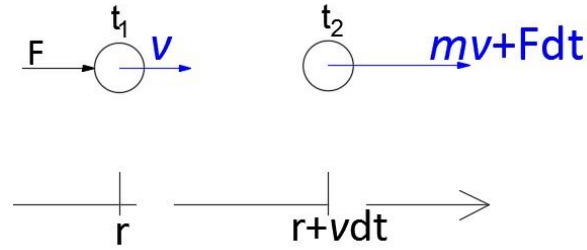


Figura 2.3 Estado inicial y final aplicando una fuerza externa F

Si existe una diferencia entre el estado final y el inicial, esto es, que la ecuación anterior no fuera igual a cero, significa que la partícula no continuó moviéndose en la dirección esperada y por lo tanto existieron colisiones entre las partículas en el transcurso del paso de tiempo. El valor que resulta de la ecuación puede escribirse como $\Omega(f)drdvdt$ y es llamado el operador de colisión:

$$f(r+vdt, mv+Fdt, t+dt)drdv - f(r, v, t)drdv = \Omega(f)drdvdt \quad (2.15)$$

Dividiendo la ecuación (2.15) entre $drdvdt$ y como el límite de dt tiende a cero, la ecuación queda como:

$$\frac{df}{dt} = \Omega(f) \quad (2.16)$$

Entonces la razón total de cambio de la función de distribución es el operador de colisión. Pero como f es una función de r , v y t , entonces:

$$df = \frac{\partial f}{\partial r} dr + \frac{\partial f}{\partial v} dv + \frac{\partial f}{\partial t} dt \quad (2.17)$$

Dividido entre dt :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{dr}{dt} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{dv}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \frac{dt}{dt} \quad (2.18)$$

La aceleración es dv/dt y la velocidad es dr/dt . Entonces la ecuación anterior queda como:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial r} v + \frac{\partial f}{\partial v} a + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (2.19)$$

Ahora sustituyendo la ecuación (2.16) en la ecuación anterior, la ecuación de transporte de Boltzmann se puede escribir como:

$$\frac{df}{dt} + \frac{\partial f}{\partial r} v + \frac{\partial f}{\partial v} a = \Omega(f) \quad (2.20)$$

Sin embargo, el operador de colisión es una función de f . La complejidad para la solución de la ecuación de Boltzmann hace necesario encontrar modelos más simples, el modelo de colisión más conocido es el modelo de Bhatnagar, Gross y Krook (BGK).

La relación entre la ecuación (2.20) y las cantidades macroscópicas tales como densidad ρ , vector velocidad del fluido \bar{u} y la energía interna e , son las siguientes:

$$\begin{aligned} \rho(r,t) &= \int m f(r,v,t) dv \\ \rho(r,t) u(r,t) &= \int m v f(r,v,t) dv \\ \rho(r,t) e(r,t) &= \frac{1}{2} \int m u_a^2 f(r,v,t) dv \end{aligned} \quad (2.21)$$

Donde m es la masa molecular y u_α es la velocidad relativa de la partícula y

$u_\alpha = v - u$. es la velocidad peculiar

La energía interna es:

$$e = \frac{3kT}{2m} \quad (2.22)$$

Donde T es la temperatura y k es la constante de Boltzmann (1.3806×10^{-23} J/K).

2.5 TEOREMA H

La ecuación de Boltzmann presenta un comportamiento irreversible y la función de distribución representa un gas uniforme en estado estacionario.

Cuando existen las mismas condiciones en un campo local del dominio se habla entonces de un equilibrio metaestable, donde aun cuando existe un equilibrio, éste es sensible a las condiciones y por ello en un sistema se ve una evolución de equilibrios metaestables y con el tiempo se llegará a un equilibrio global o estable.

Boltzmann obtuvo una función que llamo función H, la cual es el valor por medio de $\ln f$ sobre todas las posibles celdas del espacio fase, esto es:

$$H(t) = - \int f \ln f d\bar{v} d\bar{x} \quad (2.23)$$

Logro demostrar que es una función monótonamente creciente del tiempo.

$$\frac{dH}{dt} \geq 0 \quad (2.24)$$

La ecuación anterior se conoce como el teorema H de Boltzmann. El signo igual de la ecuación (2.24) indica el estado en equilibrio global, tomando en cuenta que H no puede aumentar pero si tender a un límite. Si se considera el sistema en equilibrio $(dH/dt) = 0$ estamos hablando de la distribución de equilibrio f^{eq} .

Entonces la función de distribución en equilibrio se obtiene, sustituyendo la ecuación de Boltzmann por la función de distribución de Maxwell- Boltzmann.

$$f^{eq} = \frac{\rho}{m} \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2kT}} \quad (2.25)$$

2.6 MODELO BGK

Bhatnagar, Gross y Krook (BGK) en 1954 introdujeron un modelo simplificado para el operador de colisión, al mismo tiempo Welander (1954) de forma independiente obtiene un operador similar. El operador de colisión es:

$$\Omega = \omega(f^{eq} - f) = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f) \quad (2.26)$$

Donde $\omega = \frac{1}{\tau}$, ω es llamada frecuencia de colisión, τ es el factor de relajación y f^{eq} es la función de distribución en equilibrio, que es la función de distribución de Maxwell-Boltzmann.

El factor de relajación τ es una función complicada, la simplificación del método propone suponer dicho factor como una constante, que es equivalente a la formación de una masa sin forma en todo el espectro de la escala de relajación dentro de un solo valor.

2.7 EL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMANN

Para la simulación de flujo de fluidos se encuentra la posibilidad de considerar el fluido como un continuo (Euler) y donde se sigue una partícula para describir el comportamiento del fluido (Lagrange). El método de redes de Boltzmann es una efectiva alternativa donde se analizan las propiedades de un conjunto de partículas del fluido.

El método de redes de Boltzmann discretiza las posibles posiciones de las partículas en el espacio dentro de una rejilla y cada punto de intersección llamado nodo es representado por una función de distribución única que está definida por la velocidad de una partícula y limitada por un rango de velocidades.

La función de equilibrio es una expansión de serie de Taylor de la función de distribución de Boltzmann, haciéndola una función de segundo orden a fin de coincidir con el orden de la ecuación de Navier-Stokes.

$$v^2 = (\vec{v} - \vec{u})^2 = \vec{v}^2 - 2\vec{u}\vec{v} + \vec{u}^2 \quad (2.27)$$

Sustituyendo en la función de distribución de Maxwell-Boltzmann (2.25):

$$f(v) = \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} e^{-\frac{m(\vec{v}^2 - 2\vec{u}\vec{v} + \vec{u}^2)}{2kT}} \quad (2.28)$$

$$f(v) = \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} e^{-\frac{\vec{v}^2}{2kT}} e^{\frac{\vec{u}\vec{v}}{kT} - \frac{\vec{u}^2}{2kT}}$$

Aplicando la expansión de segundo orden de Taylor la ecuación (2.28) puede escribirse:

$$f(v) = \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} e^{-\frac{\vec{v}^2}{2kT}} \left(1 + \frac{\vec{u}\vec{v}}{kT} - \frac{\vec{u}^2}{2kT} + \frac{\vec{v}^2\vec{u}^2}{2k^2T^2} \right) \quad (2.29)$$

Dónde la constante de Boltzmann está relacionada con la constante de los gases ideales y el número de Avogadro a través de la siguiente ecuación:

$$k = \frac{R}{N_A} \quad (2.30)$$

Y finalmente considerando también la velocidad del sonido como $c = \sqrt{3RT}$, la función en equilibrio se puede escribir como:

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left(1 + \frac{3\vec{u}\vec{v}}{c^2} - \frac{3\vec{u}^2}{2c^2} + \frac{9(\vec{u}\vec{v})^2}{2c^4} \right) \quad (2.31)$$

REFERENCIAS

- [1] Adhvaryu, C. H. The Lattice Boltzmann Method for Computational Fluid Dynamics applications, M. en C. Thesis, The University of Texas at Arlington, 2008.
- [2] 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.
- [3] Carlo Cercignani, Ludwig Boltzmann The Man Who Trusted Atoms. Oxford University Press. 1998.
- [4] Carrasco. B. A. Application of the Lattice Boltzmann Method to issues of coolant flows in nuclear power reactors. Master Thesis, Lehrstuhl für Nukleartechnik, 2013.
- [5] Chapman S. and Cowling T. The mathematical theory of non-uniform gases. Cambridge University of Edinburg, Edinburg. 1970.
- [6] Chen Peng, The Lattice Boltzmann Method for Fluid Dynamics: Theory and applications. Thesis Master. École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2011.
- [7] 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.
- [8] José Luis Velázquez Ortega, “*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.
- [9] Matthias B. J. Simulation of Complex Flows and Multi-Physics with the Lattice Boltzmann Method. geboren te Erlangen, Duitland. 2008.
- [10] Mohamad A. M, Lattice Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications with computer codes. Springer. 2011.
- [11] Noelia Llorente Remartínez, “Validación del método de redes de Boltzmann para la simulación multifásica de un plato perforado de columna de destilación”, proyecto tesis, Universidad Politécnica de Madrid, España. E.T.S. de Ingenieros Industriales. Madrid, Octubre de 2016.
- [12] Panayotis A. S. Modeling flue pipes: subsonic flows, lattice Boltzmann, and parallel distributed Computers. PhD Thesis, Massachusetts Institute of Technology, January 1995.
- [13] Pérez D. J. L. SimBoltz: Simulación de fluidos mediante el método de Lattice Boltzmann. Proyecto de Sistemas Informáticos, Universidad Complutense de Madrid, 2009-2010.
- [14] Phi H. N. Numerical Simulation of the Lattice Boltzmann Method for determination of hydrodynamics properties of fractal Aggregates. Docteur ès sciences, Université de Genève, juillet 2007.

- [15] Sauro Succi, The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Istituto Applicazioni Calcolo 'M. Picone' Consiglio Nazionale delle Ricerche. Clarendon press Oxford. 2001.
- [16] Silvia Di Francesco, Chiara Biscarini and Piergiorgio Manciola. Numerical simulation of water free-surface flows through a front-tracking lattice Boltzmann approach. IWA Publishing 2015 doi:10.2166.
- [17] Succi S. The Lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. Oxford: Clarendon: Oxford University, 2001.
- [18] ThÄurey N. A single-phase free-surface lattice Boltzmann. PhD Thesis, Erlangen, Jun, 2003.

3 EL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMAN PARA LA DINÁMICA DE FLUIDOS

3.1 CONFIGURACIONES DE REJILLA

Existen diferentes modelos de rejilla, para nombrarlas se utiliza la expresión D_nQ_m , en donde n representa el número de dimensiones y m el número de posibles direcciones de velocidades permitidas. Así entonces, el modelo $D1Q3$, representa un modelo en una dimensión con 3 posibles direcciones de velocidad permitidas, como se muestra en la figura 3.1(a) hay dos dimensiones a cada lado y en el centro se encuentra la velocidad cero en la cual las partículas no se mueven y permanecen en el nodo en cuestión. Así el modelo $D1Q5$ mostrado en la figura 3.1(b), tiene una dimensión con cinco direcciones de velocidad permitidas, incluyendo la del centro.

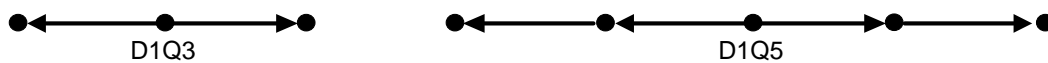


Figura 3.1 Modelo D1Q3 y D1Q5

En dos dimensiones el modelo $D2Q9$ es el más utilizado especialmente para resolver problemas de flujo de fluidos. En la figura (3.2) se pueden ver claramente las 8 direcciones de la velocidad y en el centro el noveno vector \vec{e}_0 , representando las partículas en reposo.

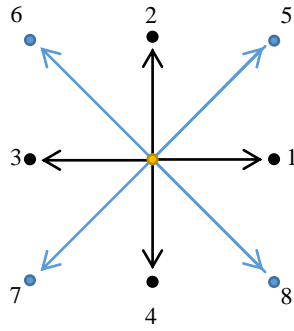


Figura 3.2 Modelo D2Q9

Para el modelo D2Q9 el valor ω para calcular la función de equilibrio (Ecuación (2.31)) son:

$$\omega_i = \begin{cases} 4/9 & i = 0 \\ 1/9 & i = 1, 2, 3, 4 \\ 1/36 & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (3.1)$$

En tres dimensiones generalmente son utilizados dos modelos el D3Q15 y D3Q27, con 15 y 27 direcciones de velocidad permitidas respectivamente, incluyendo en cada uno de ellos la velocidad cero en el centro, la figura (3.3) muestra los modelos antes señalados.

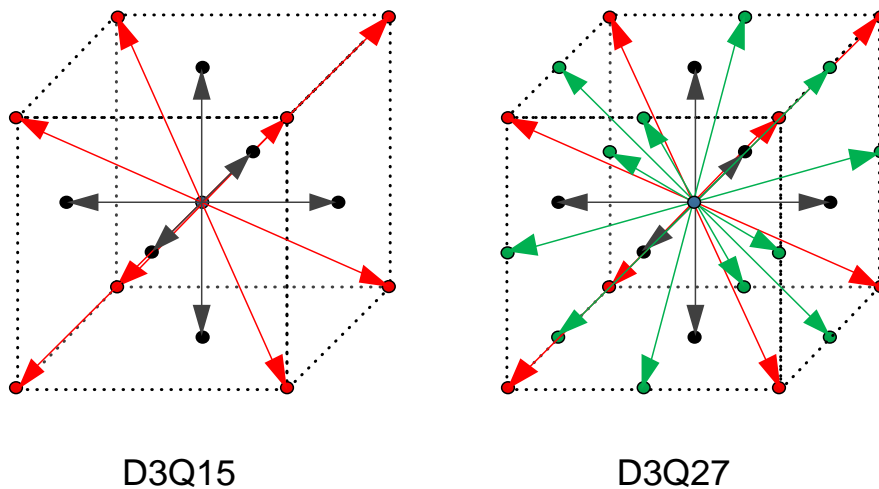


Figura 3.3 Modelo D3Q15 y Modelo D3Q27

Para el modelo D3Q15 el valor ω para calcular la función de equilibrio son:

$$\omega_i = \begin{cases} 1/3 & i = 0 \\ 1/18 & i = 1-6 \\ 1/36 & i = 7-18 \end{cases} \quad (3.2)$$

En el caso específico del modelo D2Q9, sus nueve direcciones de velocidad, se pueden visualizar de acuerdo a la figura (3.4).

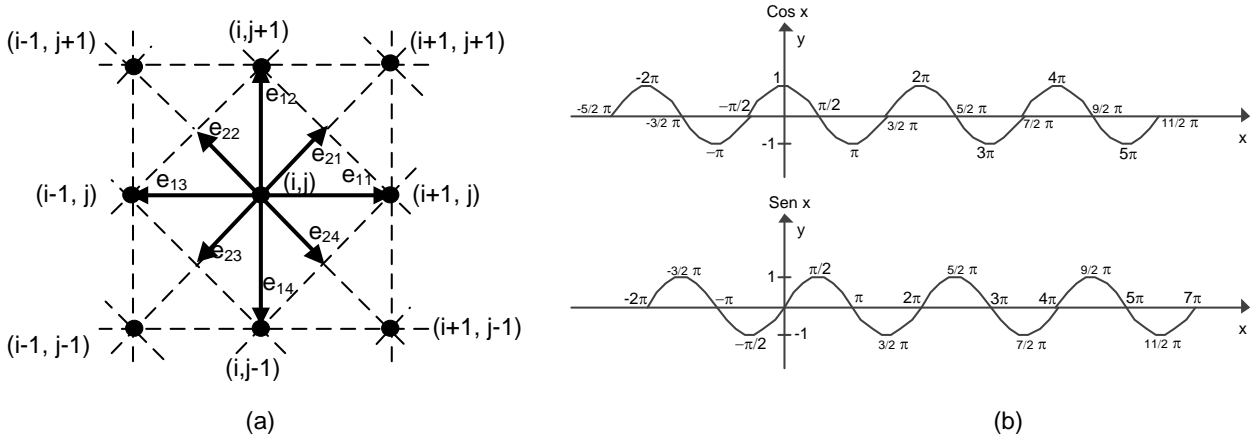


Figura 3.4 a) Direcciones de velocidad para el modelo D2Q9, b) graficas del seno(x) y coseno(x)

De acuerdo a la figura (3.4), para encontrar la dirección de los vectores \vec{e}_i , para encontrar los vectores $e_{i,i}$ se utilizan la siguiente expresión matemática:

$$e_{i,i} = \left[\cos\left(\frac{i-1}{2} \pi\right), \text{sen}\left(\frac{i-1}{2} \pi\right) \right] \quad (3.3)$$

Entonces para $i = 1$ se tiene;

$$e_{1,1} = \left[\overbrace{\cos\left(\frac{1-1}{2}\pi\right)}^1, \overbrace{\sin\left(\frac{1-1}{2}\pi\right)}^0 \right] = (1, 0)$$

$i = 2;$

$$e_{1,2} = \left[\cos\left(\frac{2-1}{2}\pi\right), \sin\left(\frac{2-1}{2}\pi\right) \right] = \left[\cos\left(\frac{\pi}{2}\right), \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right] = (0, 1)$$

$i = 3;$

$$e_{1,3} = \left[\cos\left(\frac{3-1}{2}\pi\right), \sin\left(\frac{3-1}{2}\pi\right) \right] = \left[\cos(\pi), \sin(\pi) \right] = (-1, 0)$$

$i = 4;$

$$e_{1,4} = \left[\cos\left(\frac{4-1}{2}\pi\right), \sin\left(\frac{4-1}{2}\pi\right) \right] = \left[\cos\left(\frac{3}{2}\pi\right), \sin\left(\frac{3}{2}\pi\right) \right] = (0, -1)$$

Para el caso de $e_{2,i}$ tenemos que:

$$e_{2,i} = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{i-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right) \right] \quad (3.4)$$

Para $i = 1$ se tiene;

$$e_{2,1} = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{1-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{1-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right) \right] = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) + \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) \right] = (1, 1)$$

$i = 2;$

$$e_{2,2} = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{2-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{2-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right) \right] = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{3}{4}\pi\right) + \sin\left(\frac{3}{4}\pi\right) \right] = (-1, 1)$$

$i = 3;$

$$e_{23} = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{3-1}{2} \pi + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{3-1}{2} \pi + \frac{\pi}{4}\right) \right] = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{5}{4} \pi\right) + \sin\left(\frac{5}{4} \pi\right) \right] = (-1, -1)$$

$i = 4;$

$$e_{24} = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{4-1}{2} \pi + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{4-1}{2} \pi + \frac{\pi}{4}\right) \right] = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{7}{4} \pi\right) + \sin\left(\frac{7}{4} \pi\right) \right] = (1, -1)$$

Para el caso de la posición central, obviamente se tiene la coordenada (0,0).

3.2 CONDICIONES DE FRONTERA

Una vez ubicados en la rejilla de tamaño $N \times M$, siendo N los nodos en dirección “x” y M los correspondientes a la dirección “y”, podemos asignar diferentes tipos de nodos, por ejemplo, norte, sur, este y oeste, las cuales suelen denominarse fronteras, es decir, para el caso de los nodos norte tendríamos fronteras norte, tal como se muestra en la figura (3.5).

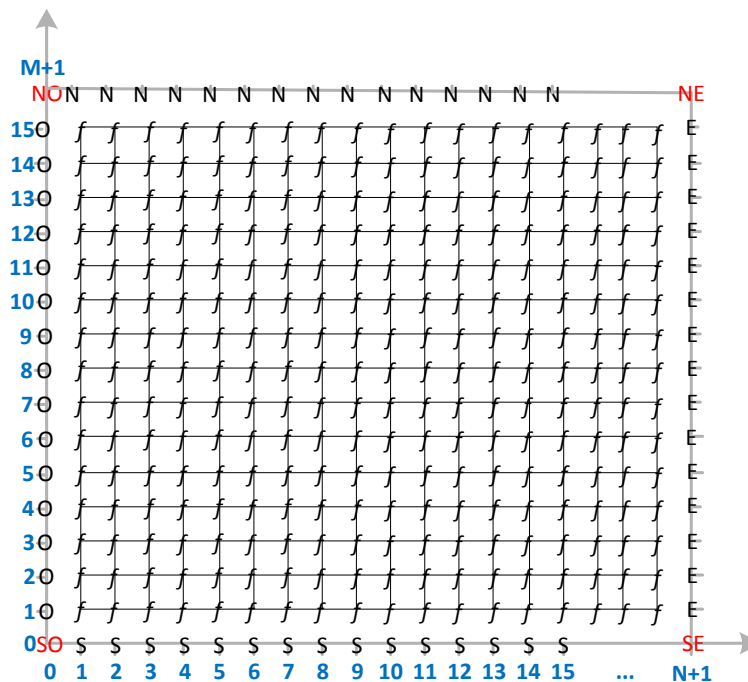


Figura 3.5 Rejilla de $N \times M$ designadas las posiciones de frontera como Norte, Sur, Este y Oeste

Entonces para el caso de las fronteras Norte (N), los nodos estarán ubicados en:

$$N = (x = 0, 1, 2, \dots, N+1; y = M+1) \quad (3.5)$$

Para las fronteras Sur (S):

$$S = (x = 0, 1, 2, \dots, N+1; y = 0) \quad (3.6)$$

Para las fronteras Este (E):

$$E = (x = N+1; y = 0, 1, 2, 3, \dots, M+1) \quad (3.7)$$

Para las fronteras Oeste (O):

$$O = (x = 0; y = 0, 1, 2, 3, \dots, M+1) \quad (3.8)$$

En la figura (3.5), f representan las funciones de distribución en cada nodo del fluido, las cuales están dadas por la siguiente relación:

$$f_i(a, b); \quad a = 1, 2, 3, \dots, N; \quad b = 1, 2, 3, \dots, M; \quad i = 0, 1, 2, \dots, 8 \quad (3.9)$$

Las funciones de distribución de las poblaciones de partículas representadas matemáticamente en la ecuación (3.9), pueden visualizarse en la figura (3.6). Cada nodo está representado por una función de distribución y cada función lleva un modelo específico que en este caso es el modelo D2Q9 con nueve vectores de velocidades.

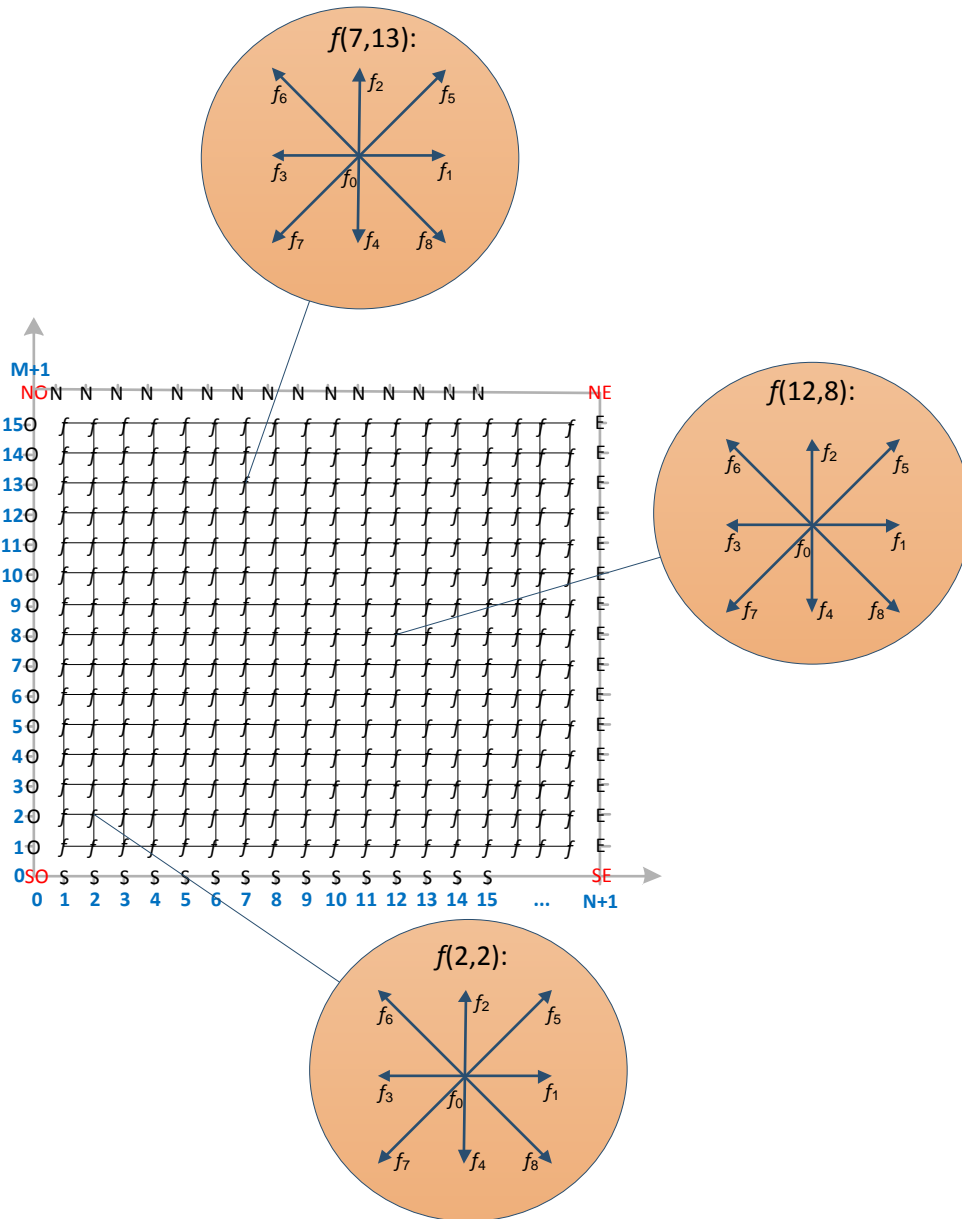


Figura 3.6 Rejilla de NxM mostrando las funciones de distribución en los nodos

3.3 CONDICIONES DE FRONTERA PERIÓDICAS

Para el caso de la aplicación de las condiciones periódicas, el uso de ellas implicaría, por así decirlo, un cambio en la geometría, pasando de un rectángulo a un cilindro, tal como se muestra en la figura (3.7).

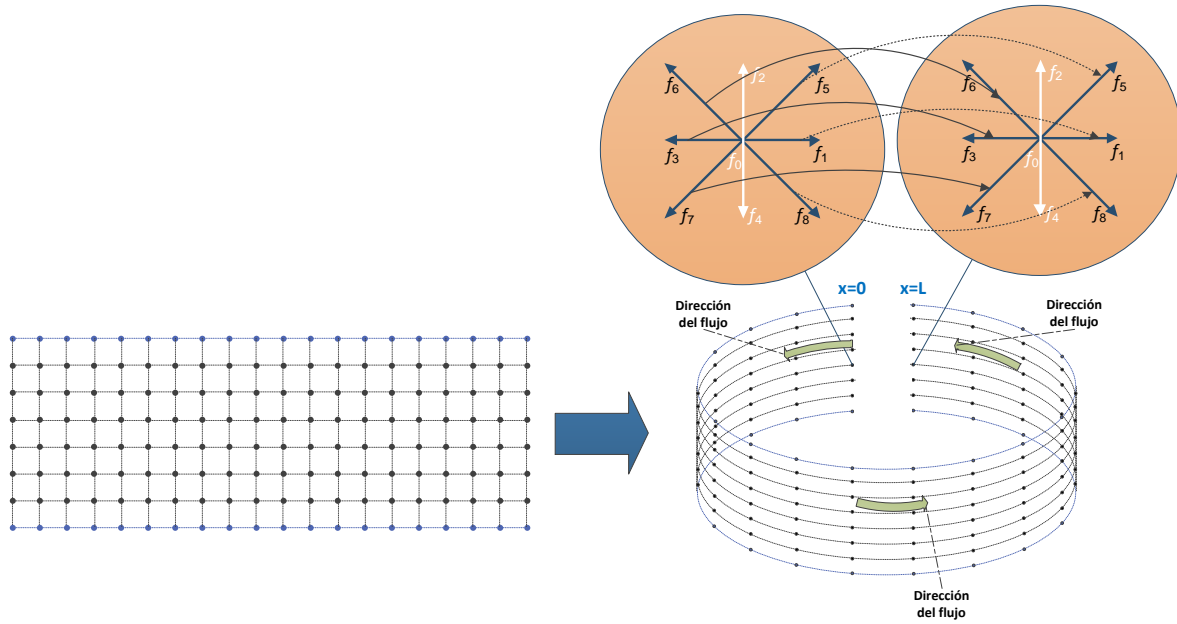


Figura 3.7 Aplicación de condiciones periódicas

Es importante mencionar, que la aplicación de las condiciones periódicas sólo involucraría a unos nodos, que es el caso de las fronteras oeste y este, en $x = 0$ y $x = L$, tal como se puede ver en la figura (3.7).

Las relaciones que muestran el uso de las condiciones periódicas para el modelo D2Q9 serían:

$$\begin{aligned}
 f_1^{x=0} = f_1^{x=L} \quad \text{o bien} \quad f_1^{\text{oeste}} = f_1^{\text{este}}; \quad f_5^{x=0} = f_5^{x=L} \quad \text{o bien} \quad f_5^{\text{oeste}} = f_5^{\text{este}}; \\
 f_8^{x=0} = f_8^{x=L} \quad \text{o bien} \quad f_8^{\text{oeste}} = f_8^{\text{este}} \\
 f_3^{x=0} = f_3^{x=L} \quad \text{o bien} \quad f_3^{\text{oeste}} = f_3^{\text{este}}; \quad f_6^{x=0} = f_6^{x=L} \quad \text{o bien} \quad f_6^{\text{oeste}} = f_6^{\text{este}}; \\
 f_7^{x=0} = f_7^{x=L} \quad \text{o bien} \quad f_7^{\text{oeste}} = f_7^{\text{este}}
 \end{aligned}
 \tag{3.10}$$

3.4 CONDICIONES DE FRONTERA “BOUNCE-BACK”

También conocidas como condiciones de frontera no deslizante. Este tipo de fronteras son utilizadas para simular la interacción que se tiene entre el fluido y una pared fija, también se utilizan este tipo de fronteras cuando se simula un flujo alrededor de un obstáculo. El uso de estas fronteras, asume que las funciones de distribución dentro de la región del fluido, chocan con la frontera sólida y simplemente se reflejan en la dirección opuesta de la velocidad entrante con la misma magnitud. La figura (3.8), muestra lo que sucede al aplicar este tipo de condiciones de frontera

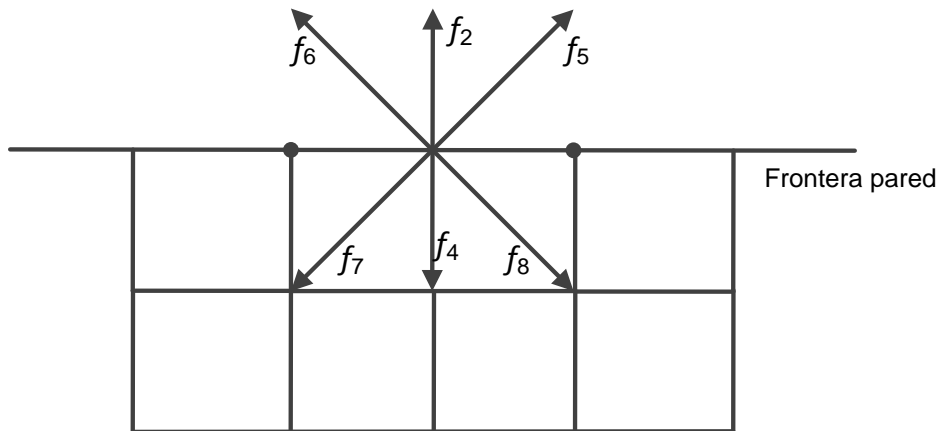


Figura 3.8 Función de distribución contra una frontera no deslizante

Se puede ver que las función f_2, f_5 y f_6 chocan contra la pared lo que produce que se reflejen en las direcciones opuestas, esto es que $f_7 = f_5, f_4 = f_2$ y $f_8 = f_6$.

3.5 PASOS DE LA SIMULACIÓN

Los modelos de redes de Boltzmann presentan un algoritmo con un número de pasos. En general, pueden identificarse dos pasos importantes streaming y colisión; para un paso de tiempo, la distribución de partículas se mueve a sus nodos vecinos durante el proceso conocido como “streaming”. Enseguida son redistribuidas de tal forma que se aproximen al equilibrio local durante el proceso conocido como colisión. Los pasos de la simulación, son mostrados de forma general en la figura (3.9).

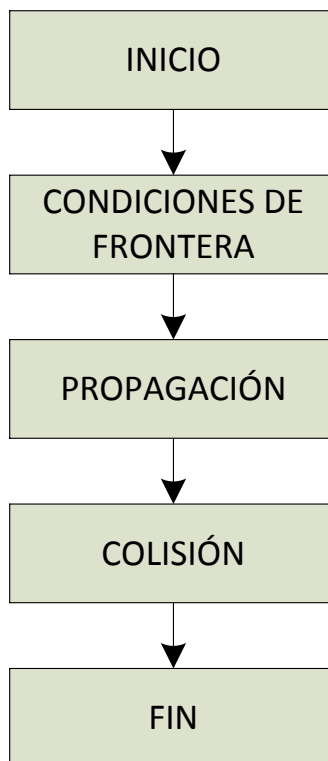


Figura 3.9 Diagrama de flujo para la simulación utilizando redes de Boltzmann

3.5.1 INICIO

Para este paso, se toma el hecho de que todas las poblaciones de partículas están en el equilibrio sin velocidad de fluido. Las siguientes condiciones se usan para este paso.

$$\begin{aligned}\rho(t=0) &= 1 \\ \bar{u}(t=0) &= 0 \\ f_i(t=0) &= f_i^{\text{eq}}\end{aligned}\tag{3.11}$$

3.5.2 PROPAGACIÓN

Este paso es muy sencillo; para llevarlo a cabo, todas las poblaciones de partículas f_i asociadas con velocidades \vec{e}_i en el nodo $\vec{x}_i = (i, j)$, son trasladadas al nodo con posición $\vec{x}_i + \vec{e}_i$, es decir:

$$f_i(i, j, t+1) = f_i(i - \vec{e}_{ix}, j - \vec{e}_{iy}, t)\tag{3.12}$$

Para ello se utiliza la siguiente ecuación

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t+1) - f_i(\vec{x}, t) = -\left[\frac{1}{\tau} f_i(\vec{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t) \right]\tag{3.13}$$

3.5.3 COLISIÓN

Para cada nodo $\vec{x}_i = (i, j)$ durante el paso de colisión sucede lo siguiente;

1. ρ y \vec{u} son calculados a través de las ecuaciones (2.21).
2. La función de distribución al equilibrio f_i^{eq} , se calcula usando la ecuación (2.31).

3.6 EL PROGRAMA

El programa utilizado para la realización de esta tesis, contiene los elementos descritos anteriormente para un modelo D2Q9 para simular fluidos pseudoplásticos con una propuesta matemática hecha por (Velázquez and Rodríguez), en la cual se escribe el parametro de relajacion “ τ ” que aparece en la ecuación (2.26), en función de la viscosidad aparente, la cual, considera a su vez los parametros reologicos “ n ” y “ K ”, caracteristicos en un fluido no Newtoniano del modelo de la potencia con un valor de $n < 1$. La figura (3.10), presenta la pantalla del programa utilizado para todas las simulaciones hechas en esté trabajo.

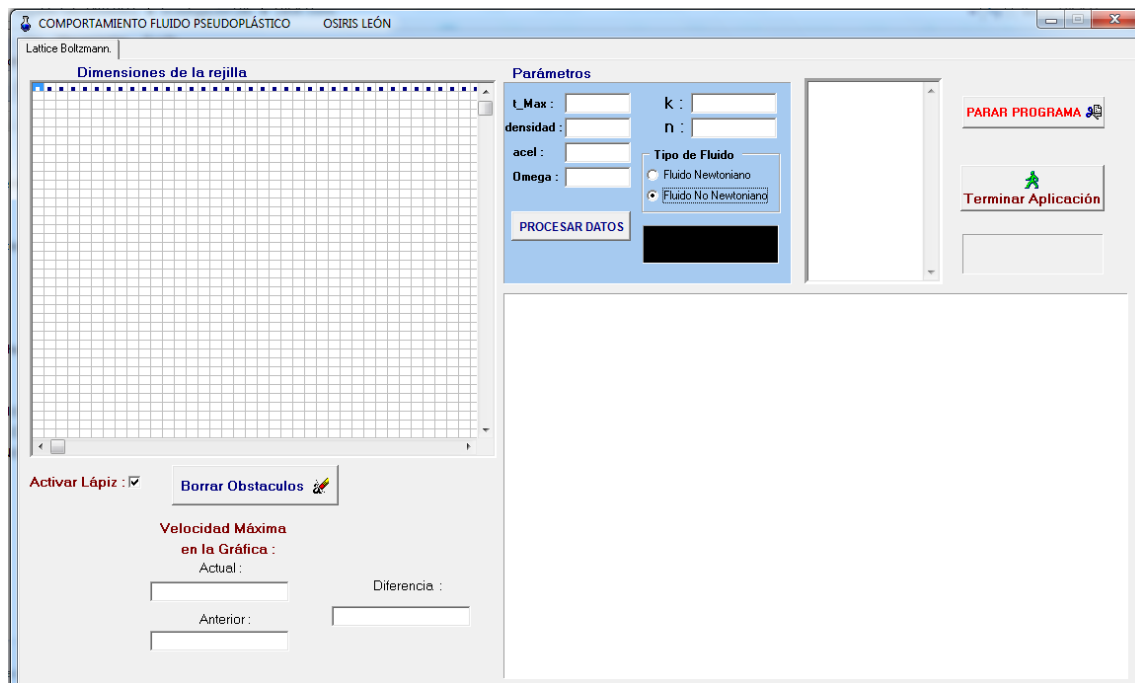


Figura 3.10 Programa utilizado para la simulación de fluidos pseudoplásticos

REFERENCIAS

- [1] Carrasco. B. A. Application of the Lattice Boltzmann Method to issues of coolant flows in nuclear power reactors. Master Thesis, Lehrstuhl für Nukleartechnik, 2013.
Chapman S. and Cowling T. The mathematical theory of non-uniform gases. Cambridge University of Edinburg, Edinburg. 1970.
- [2] Dieter A. W. G. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models, An Introductions. Springer- Verlag Berlin Heidelberg New York, 2000.
- [3] 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.
- [4] Luo L. S. Lattice-gas automata and lattice Boltzmann equations for two-dimensional hydrodynamics. PhD Thesis, Georgia Institute of Technology, April, 1993. J. Wilke. Cache optimizations for the lattice Boltzmann method in 2D, PhD Thesis, Erlangen, March, 2003.
- [5] Matthias B. J. Simulation of Complex Flows and Multi-Physics with the Lattice Boltzmann Method. geboren te Erlangen, Duitsland. 2008.
- [6] Noelia Llorente Remartínez, “Validación del método de redes de Boltzmann para la simulación multifásica de un plato perforado de columna de destilación”, proyecto tesis, Universidad Politécnica de Madrid, España. E.T.S. de Ingenieros Industriales. Madrid, Octubre de 2016.
- [7] Panayotis A. S. Modeling flue pipes: subsonic flows, lattice Boltzmann, and parallel distributed Computers. PhD Thesis, Massachusetts Institute of Technology, January 1995.
- [8] Pérez D. J. L. SimBoltz: Simulación de fluidos mediante el método de Lattice Boltzmann. Proyecto de Sistemas Informáticos, Universidad Complutense de Madrid, 2009-2010.
- [9] Phi H. N. Numerical Simulation of the Lattice Boltzmann Method for determination of hydrodynamics properties of fractal Aggregates. Docteur ès sciences, Université de Genève, juillet 2007.
- [10] Qian Y. H., D. d’Humières and P. Lallemand. Lattice BGK models for the Navier-Stokes equations. Europhys. Lett, 17(6): 479, 1992.
- [11] Succi S. The Lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. Oxford: Clarendon: Oxford University, 2001.

- [12] Sukop M. C. and Thorne D. T. Lattice Boltzmann Modeling, An Introduction for Geoscientists and Engineers. Springer- Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [13] ThÄurey N. A single-phase free-surface lattice Boltzmann. PhD Thesis, Erlangen, Jun, 2003.
- [14] Velázquez O. J. L and Rodríguez R. S. Lattice-Boltzmann Simulation of Sago (Metroxylon Sagu) Starch Solutions in Porous Media. *Can. J. Chem. Eng.* 86:667-675, 2008.

4 SIMULACIÓN DE FLUIDOS PSEUDOPLÁSTICOS CON EL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMANN

4.1 VALIDACIÓN DEL MODELO

Para demostrar el método de redes de Boltzmann explicado en capítulos anteriores, se modelaron fluidos con comportamiento pseudoplástico, para ello, se obtuvieron los perfiles de velocidad analíticos a través de la solución de las ecuaciones de movimiento en formulación de Lagrange (ecuación 4.1).

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right] = -\nabla \cdot \vec{\tau} - \nabla P + \rho \vec{g} \quad (4.1)$$

La solución de la ecuación (4.1) para un fluido con comportamiento de la potencia está dada por la siguiente ecuación:

$$v_x = \left(\frac{\Delta P}{kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) (39)^{\frac{1}{n+1}} \left[1 - \left(\frac{40-y}{39} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right] \quad (4.2)$$

Para obtener el perfil de velocidades en forma adimensional, se utilizó la velocidad media, la cual se define de acuerdo a la ecuación (4.3).

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{Q}{A} = \frac{\int_0^W \int_A^B \left(\frac{\Delta P}{kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) (31)^{\frac{1}{n+1}} \left[1 - \left(\frac{32-y}{31} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right] dy dz}{\int_0^W \int_A^B dy dz} \quad (4.3)$$

En la ecuación (4.3), la rejilla utilizada para la simulación es de 80 x 80 por lo tanto para los límites geométricos se tomó A =1 y B = 80 y se obtiene la velocidad media para un fluido de la potencia, obteniendo el siguiente resultado para la velocidad media.

$$\langle \bar{v} \rangle = \frac{\left(\frac{\Delta P}{kL} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) (39)^{\frac{1}{n+1}} \left\{ 79 + \frac{1}{(39)^{\frac{1}{n+1}}} \left(\frac{n}{2n+1} \right) \left[(-40)^{\frac{1}{n+2}} - (39)^{\frac{1}{n+2}} \right] \right\}}{79} \quad (4.4)$$

Por lo cual, al sustituir la ecuación (4.2) y (4.4) en la ecuación (4.3), obtenemos el perfil de velocidades en forma adimensional para un fluido de la potencia.

$$\frac{\bar{v}}{\langle \bar{v} \rangle} = \frac{(79) \left[1 - \left(\frac{40-y}{39} \right)^{\frac{1}{n+1}} \right]}{79 + \frac{1}{(39)^{\frac{1}{n+1}}} \left(\frac{n}{2n+1} \right) \left[-(-40)^{\frac{1}{n+2}} - (39)^{\frac{1}{n+2}} \right]} \quad (4.5)$$

Para todas las simulaciones con el método de redes de Boltzmann, se utilizaron condiciones periódicas, así como condiciones de frontera “de rebote” en las paredes o condiciones de deslizamiento, con un tamaño de rejilla de 80 x 80. Los valores de índice al comportamiento al fluido (“n”) utilizados fueron de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6 y 0.7, con valores de índice de consistencia de 6.5×10^{-5} , 9.0×10^{-5} , 9.0×10^{-5} , 9.0×10^{-5} , 6.5×10^{-3} y 6.5×10^{-3} respectivamente, el estado estacionario fue alcanzado después de 90,000 pasos de tiempo como lo muestra la figura (4.1).

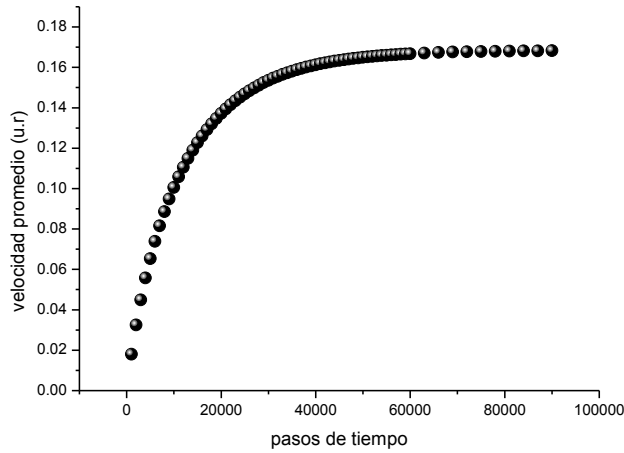


Figura 4.1 Estado estacionario para un fluido pseudoplástico, para un valor de índice de comportamiento al fluido igual a 0.5

Los resultados de las simulaciones con el método de redes de Boltzmann para los diferentes fluidos pseudoplásticos fueron comparados con los obtenidos mediante la ecuación analítica presentada en la ecuación (4.5), el porcentaje de error relativo entre ambos perfiles de velocidad fue menor al 0.8%.

Para el caso de un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.2$, la solución analítica del perfil de velocidades en forma adimensional obtenida a partir de la ecuación (4.5), da como resultado:

$$\frac{\bar{v}}{\langle \bar{v} \rangle} = \frac{(79) \left[1 - \left(\frac{40-y}{39} \right)^6 \right]}{79 + \frac{1}{(39)^6} (0.142857) \left[-(40)^7 - (39)^7 \right]} \quad (4.6)$$

Para la simulación con el método de redes de Boltzmann, la figura (4.2) muestra una primera aproximación del comportamiento del fluido. En esta figura, se presentan los resultados obtenidos para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.2$ y un índice de consistencia de 6.5×10^{-5}

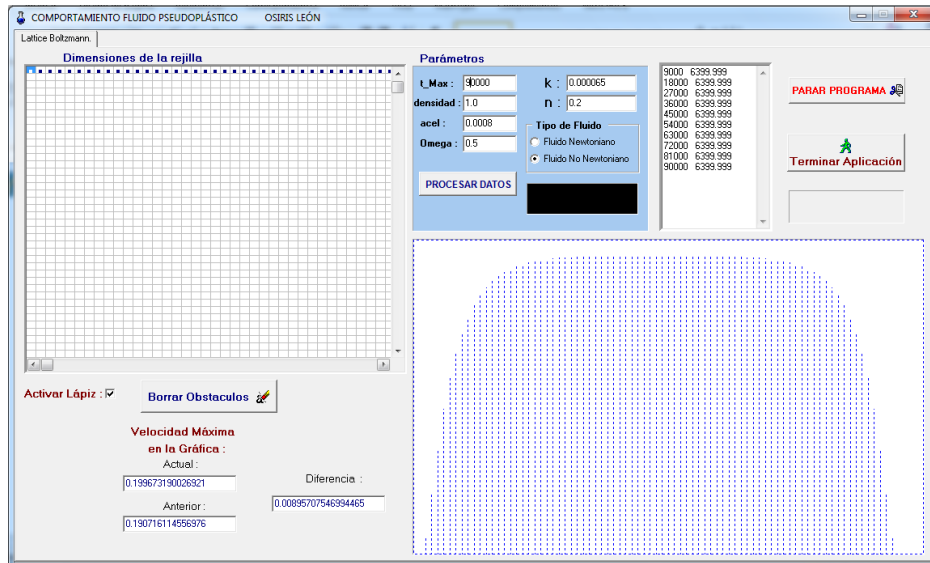


Figura 4.2 Programa para simular fluidos pseudoplásticos con el método de redes de Boltzmann

Con propósito de validar el método de redes de Boltzmann, se realizó una comparación de acuerdo a la simulación con el programa mostrado en la figura (4.2) y los resultados obtenidos con la ecuación (4.6), para el caso de un fluido pseudoplástico con $n = 0.2$. En la figura (4.3) se presenta el resultado de dichas comparaciones.

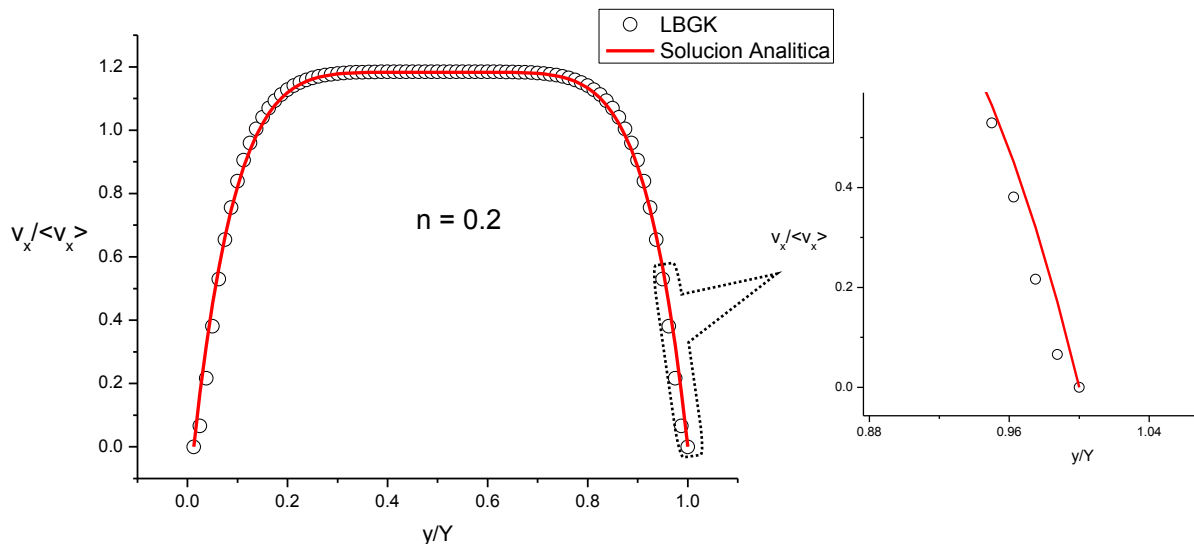


Figura 4.3 Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.2$, con un porcentaje de error relativo de 0.7804%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann

En la figura (4.3) puede verse que el mayor alejamiento de las curvas concernientes a la solución analítica y las del método de redes de Boltzmann incide en el inicio y el final de las mismas, lo cual se debe al uso de condiciones de “rebote” en la simulación con redes de Boltzmann como lo mencionan algunos autores. Los resultados obtenidos para fluidos pseudoplásticos con valores de $n = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 , se muestran en las figuras (4.4 – 4.8).

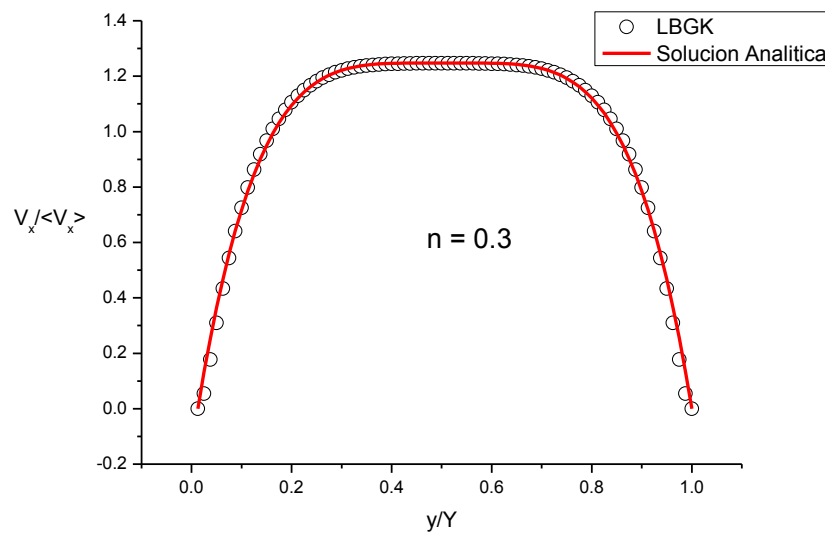


Figura 4.4 Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.3$, con un porcentaje de error relativo de 0.7141%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann

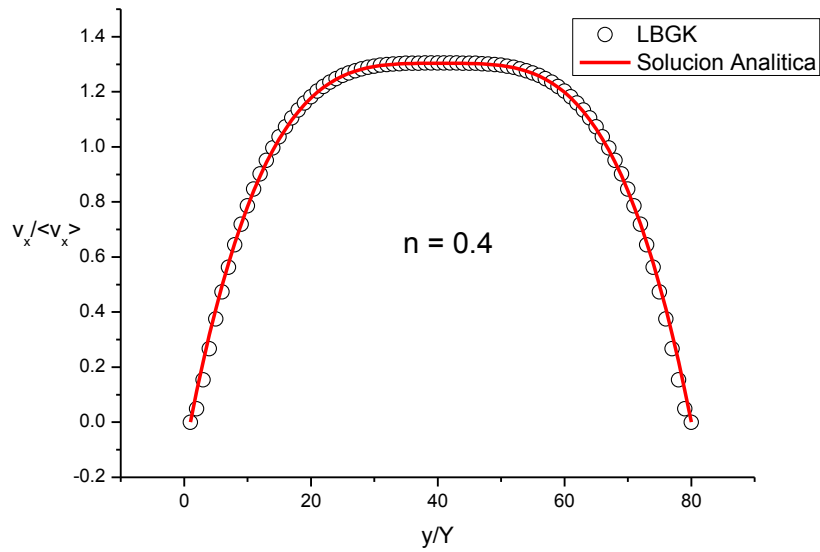


Figura 4.5 Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.4$, con un porcentaje de error relativo de 0.8577%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann

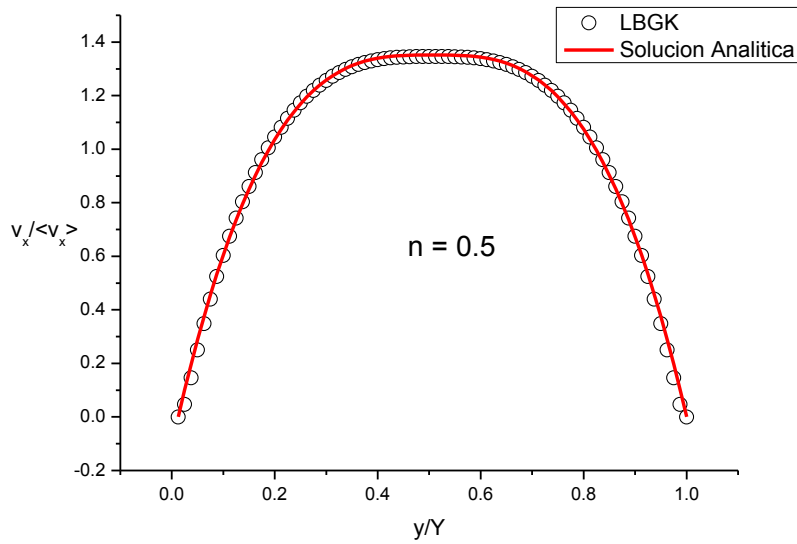


Figura 4.6 Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.5$, con un porcentaje de error relativo de 0.7899%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann

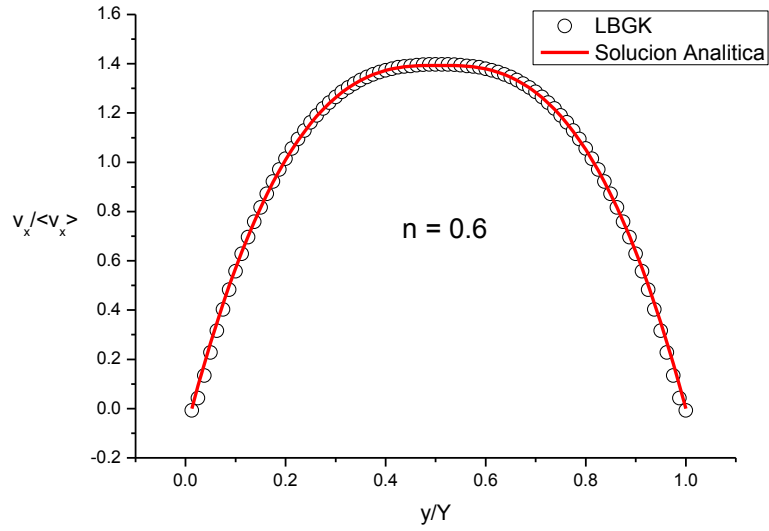


Figura 4.7 Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.6$, con un porcentaje de error relativo de 0.7206%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann

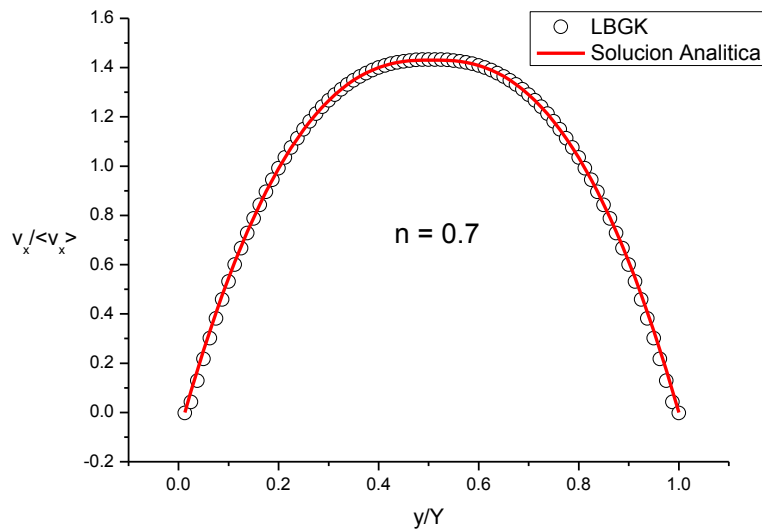


Figura 4.8 Perfil de velocidades para un fluido pseudoplástico con un valor de $n = 0.7$, con un porcentaje de error relativo de 0.7094%, entre la solución analítica y el obtenido con el método de redes de Boltzmann

En la figura (4.9), se muestran los perfiles de velocidad obtenidos a partir de la solución analítica de los siete fluidos pseudoplásticos a partir de la ecuación (4.5).

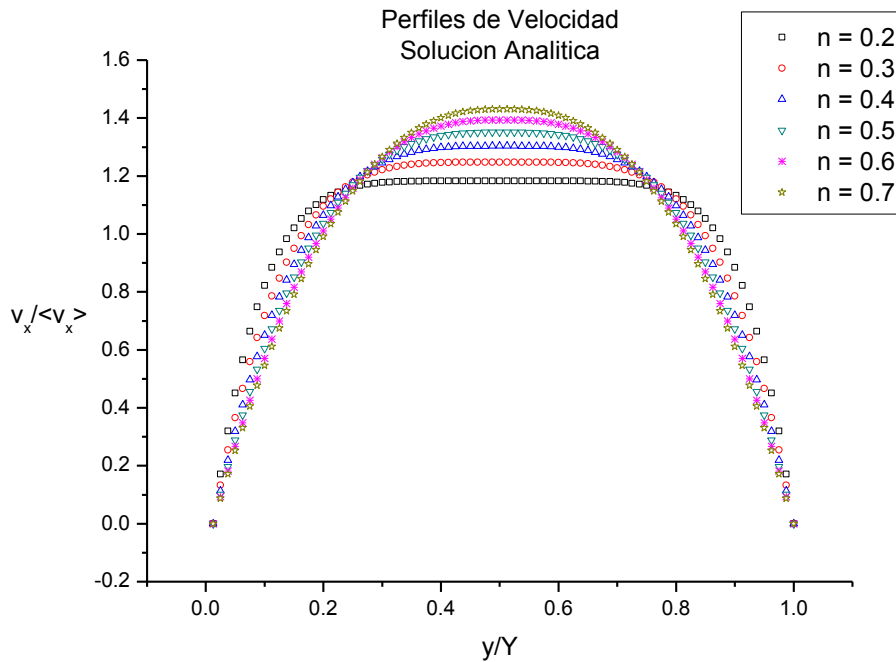


Figura 4.9 Perfiles de velocidades para un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 , obtenidos con la ecuación (4.5)

Así mismo, en la figura (4.10) se muestran los perfiles de velocidad como resultado de las simulaciones con el método de redes de Boltzmann, para los siete fluidos pseudoplásticos.

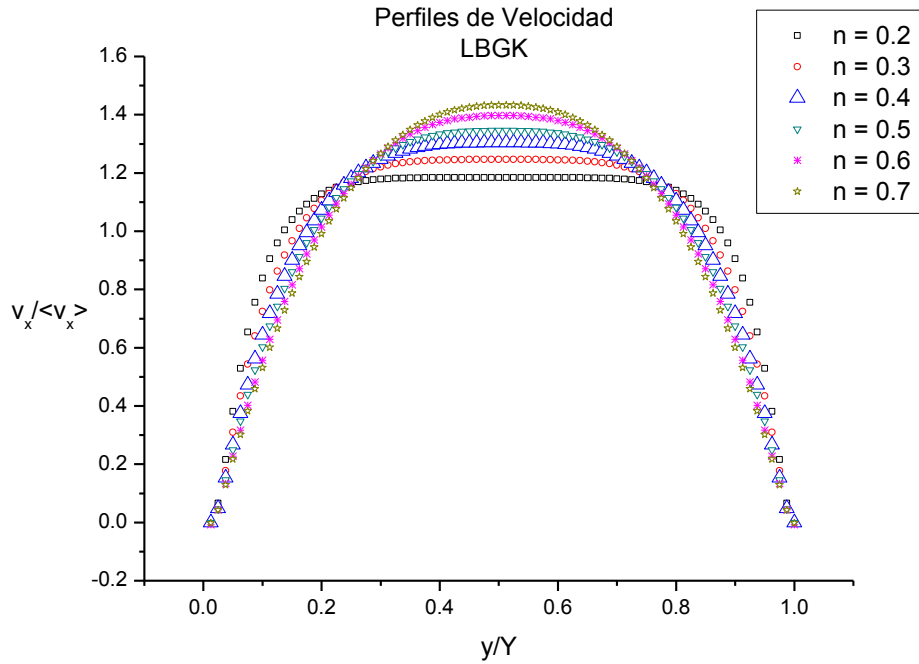


Figura 4.10 Perfiles de velocidades para un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 ., obtenidos a partir de las simulaciones con el método de redes de Boltzmann

Con la finalidad de comparar todos los perfiles de velocidad obtenidos a partir de la solución analítica con el método de redes de Boltzmann, en la figura (4.11) y (4.12), se presentan todos los resultados para los siete valores del índice de comportamiento al fluido.

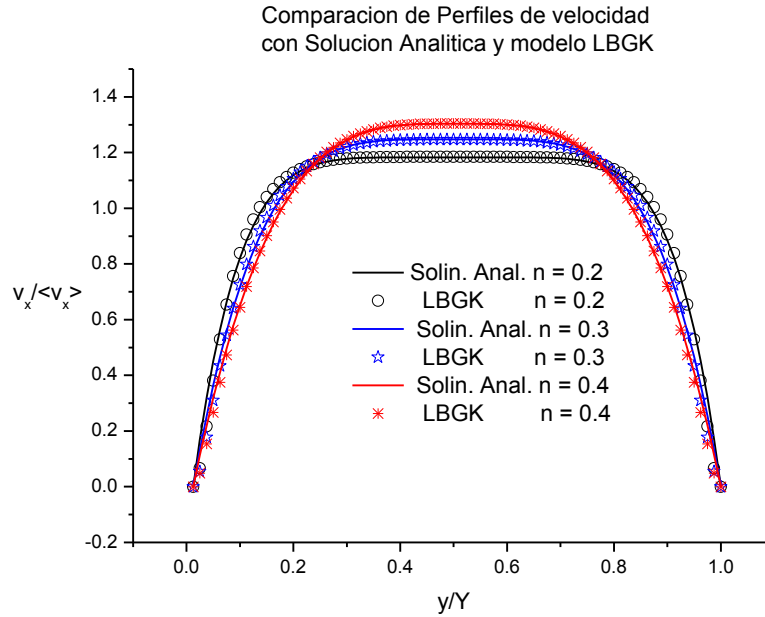


Figura 4.11 Comparación de los Perfiles de velocidad para un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.2, 0.3, 0.4$, obtenidos a partir de las simulaciones con el método de redes de Boltzmann y con solución analítica

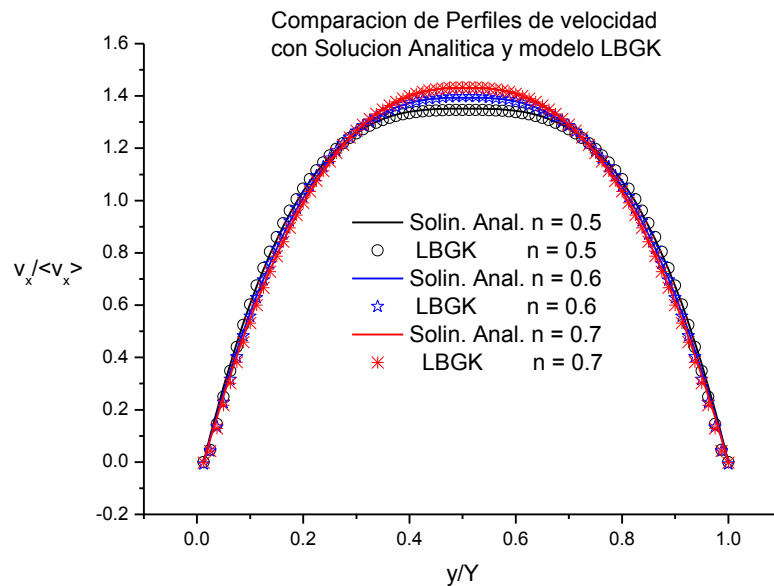


Figura 4.12 Comparación de los Perfiles de velocidad para un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.5, 0.6, 0.7$, obtenidos a partir de las simulaciones con el método de redes de Boltzmann y con solución analítica

4.2 SIMULACIÓN DE FLUIDOS CON EL MÉTODO DE REDES DE BOLTZMANN CON DATOS EXPERIMENTALES DE GOMAS DE FLAMBOYAN

4.2.1 ANTECEDENTES

Las gomas, también denominados hidrocoloides, se caracterizan por ser polisacáridos con pesos moleculares altos. Algunas semillas presentan galactomananos, los cuales poseen generalmente cadenas principalmente formadas por enlaces β -(1,4) de D-manopiranosas. Dichas cadenas presentan ramificaciones de enlaces β -(1,6) de D galactopiranosas. Se dice que tienen alta viscosidad, así como interacciones sinérgicas con otros polisacáridos, tales como la xantana y la agarosa, por lo que se usan a menudo como agentes espesantes y estabilizantes en la industria alimentaria.

La goma de semilla del árbol de flamboyán (*Delonix Regia*) posee propiedades de ausencia de toxicidad, retención de agua, espesamiento, gelificación, emulsificación, estabilización de suspensiones y la formación de películas.

En el trabajo presente, se utilizaron los resultados obtenidos de la caracterización reológica de la goma de Flamboyán, realizados por varios investigadores de instituciones como la Universidad Autónoma de Yucatán (UAY), Instituto Politécnico Nacional (IPN) y de la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán UNAM, en las instalaciones de la Facultad de Ingeniería Química de la UAY. El equipo utilizado para dichas caracterizaciones fue el Viscosímetro Haake RT20, obteniendo las condiciones, así como los resultados que se presentan en la tabla (4.1).

Goma Flamboyán, muestra A GN-4%, pH=9.0 @ 5°C	Goma Flamboyán, muestra B GN-4%, pH=9.0 @ 5°C
Índice de comportamiento al fluido $n = 0.5$ [=] adimensional	Índice de comportamiento al fluido $n = 0.52$ [=] adimensional
Índice de consistencia $k = 16.06 \text{ Pa s}^n$	Índice de consistencia $k = 16.32 \text{ Pa s}^n$
Goma Flamboyán, muestra A GN-4%, pH=9.0 @ 25°C	Goma Flamboyán, muestra B GN-4%, pH=9.0 @ 25°C
Índice de comportamiento al fluido $n = 0.4708$ [=] adimensional	Índice de comportamiento al fluido $n = 0.4961$ [=] adimensional
Índice de consistencia $k = 13.8158 \text{ Pa s}^n$	Índice de consistencia $k = 12.0731 \text{ Pa s}^n$
Goma Flamboyán, muestra A GN-4%, pH=9.0 @ 45°C	Goma Flamboyán, muestra B GN-4%, pH=9.0 @ 45°C
Índice de comportamiento al fluido $n = 0.5$ [=] adimensional	Índice de comportamiento al fluido $n = 0.46$ [=] adimensional
Índice de consistencia $k = 7.84 \text{ Pa s}^n$	Índice de consistencia $k = 13.47 \text{ Pa s}^n$

Tabla 4.1 Datos experimentales obtenidos para una goma Flamboyán obtenidos en un Viscosímetro Haake RT20

Como puede verse de acuerdo a la tabla (4.1), todos los valores obtenidos experimentalmente para la goma flamboyán presentan un comportamiento pseudoplástico, es por ello, que fueron los datos pertinentes para nuestras simulaciones.

En las figuras (4.13 - 4.18) se presentan las gráficas de los esfuerzos de corte vs velocidad de deformación, obtenidas con los valores experimentales con la goma Flamboyán.

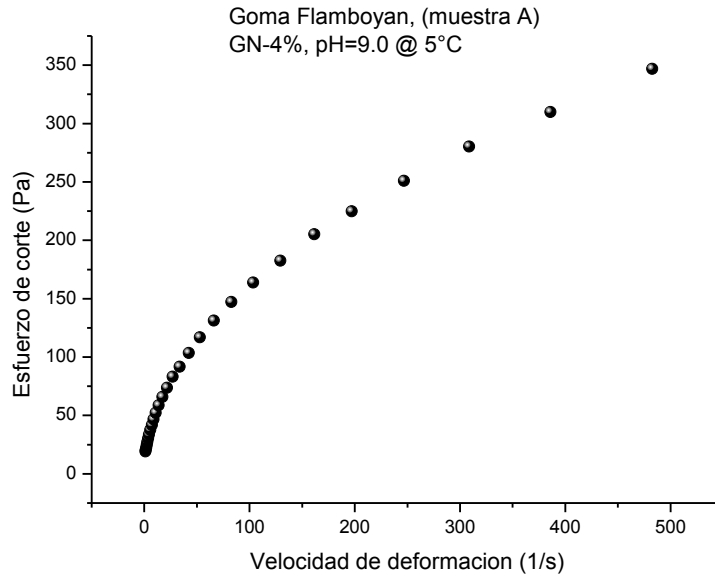


Figura 4.13 Gráficas de flujo para goma flamboyán (muestra A), GN-4%, pH=9.0 @ 5°C

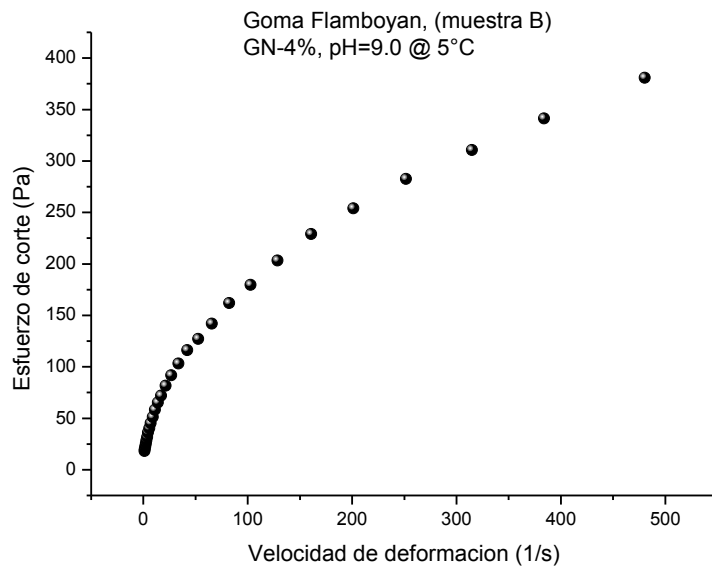


Figura 4.14 Gráficas de flujo para goma flamboyán (muestra B), GN-4%, pH=9.0 @ 5°C

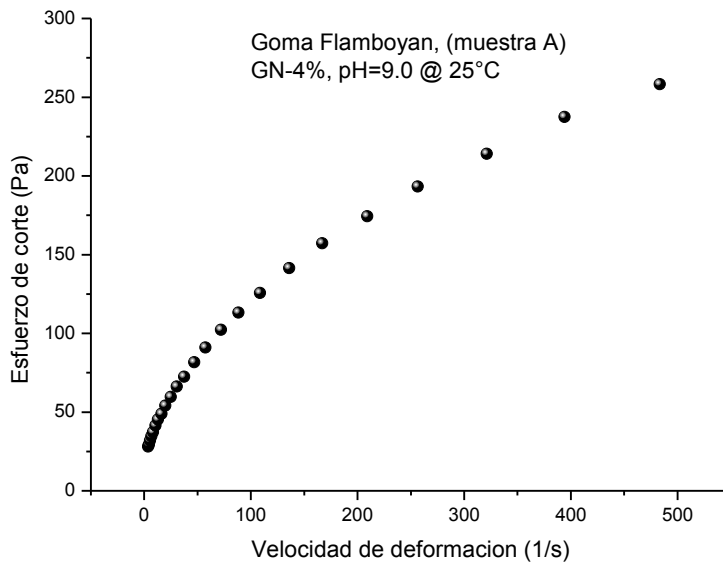


Figura 4.15 Gráficas de flujo para goma flamboyán (muestra A), GN-4%, pH=9.0@ 25°C

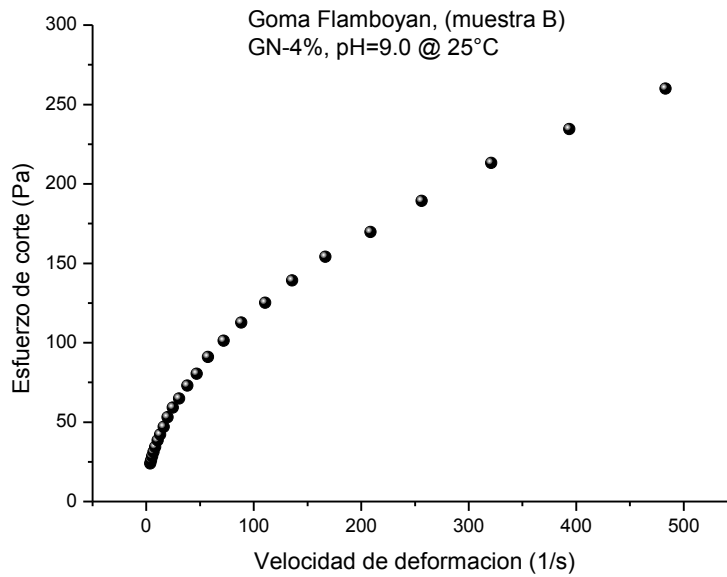


Figura 4.16 Gráficas de flujo para goma flamboyán (muestra B), GN-4%, pH=9.0@ 25°C

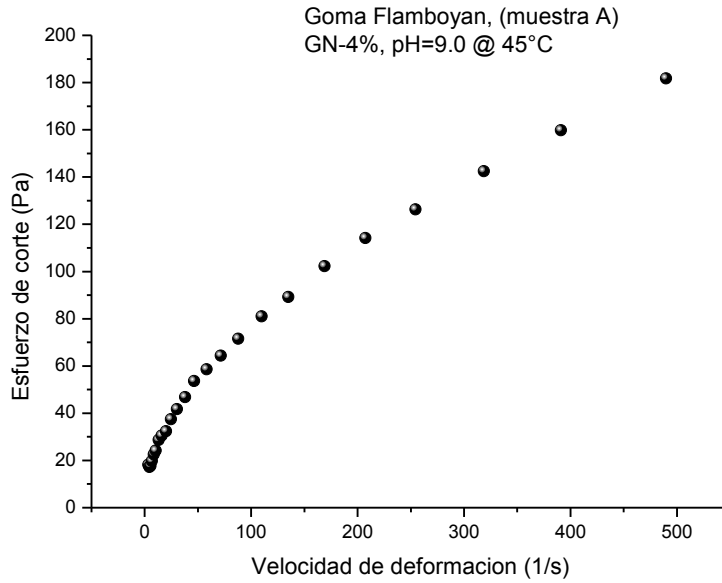


Figura 4.17 Gráficas de flujo para goma flamboyán (muestra A), GN-4%, pH=9.0 @ 45°C

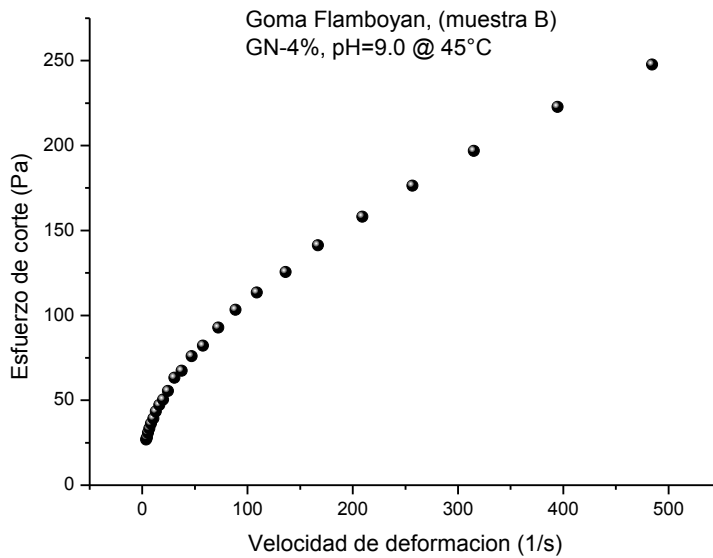


Figura 4.18 Gráficas de flujo para goma flamboyán (muestra B), GN-4%, pH=9.0 @ 45°C

Con los valores experimentales de la goma Flamboyán, se procedió a calcular el perfil de velocidades teórico de acuerdo a las ecuaciones (4.2) y (4.5). La figura (4.19) muestra las gráficas de los perfiles de velocidad para los seis valores de “n”.

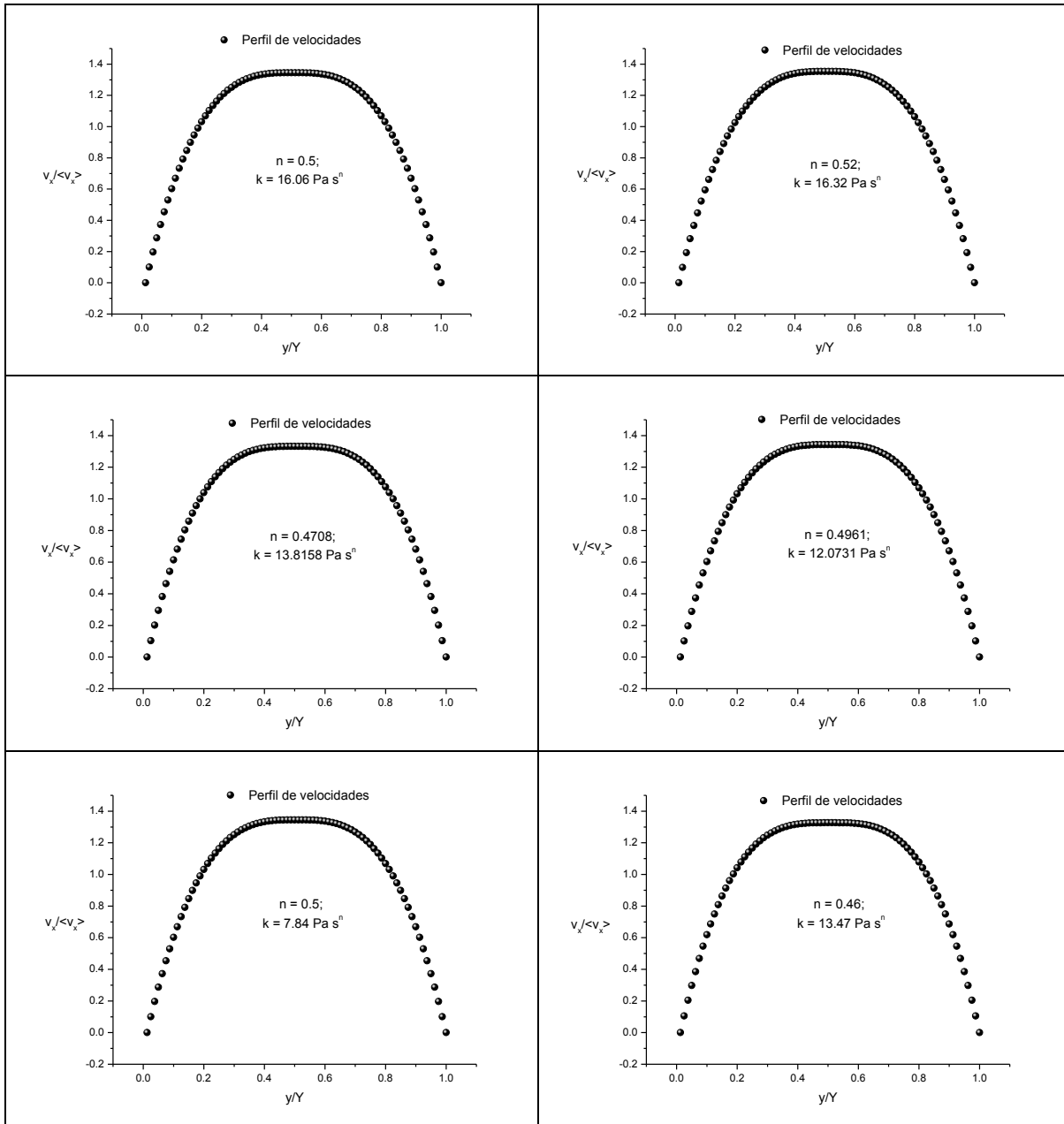


Figura 4.19 Perfiles de velocidad utilizando las ecuaciones (4.4) y (4.5) para los valores de $n = 0.5, 0.52, 0.4708, 0.4961, 0.5$ y 0.46 , con valores de $k = 16.06, 16.32, 13.8158, 12.0731, 7.84$ y 13.47 Pa.s^n respectivamente

En la figura (4.20), se presenta la gráfica con los acercamientos de los perfiles de velocidad con los seis valores de “n”.

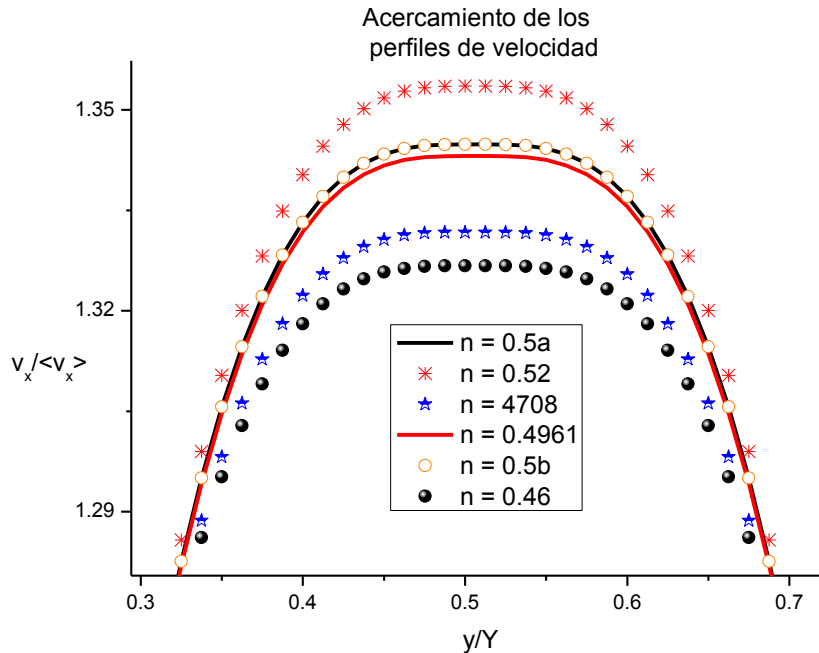


Figura 4.20 Acercamientos de los perfiles de velocidad para los valores de $n = 0.5a$, 0.52 , 0.4708 , 0.4961 , $0.5b$ y 0.46

En seguida, se procedió a realizar simulaciones con el método de redes de Boltzmann con los datos experimentales obtenidos a partir de la goma flamboyán. Un aspecto de suma importancia en lo que se refiere a la simulación de sistemas reales, es la correcta transformación de unidades; es decir, conversión de unidades físicas a unidades de red y viceversa. Para ello, fue necesario realizar conversiones de los valores experimentales que presentan unidades físicas con unidades de rejilla. En la tabla (4.2), se presentan los cálculos que fueron realizados para las variables en las que fue necesario hacer la conversión.

Goma Flamboyán (muestra A) Fluido Pseudoplástico n = 0.5	Propiedades físicas: $T = 5^{\circ}C$; $n = 0.5$; $\rho_f = 1005.83 \frac{kg}{m^3}$; $k_f = 16.06 Pa \cdot s^n$ $GN = 4.0\%$ $L = 1.5m$.
---	---

Obtención de unidades físicas:

<p>Longitud</p> $\Delta x = \frac{L}{N} = \frac{1.5m}{80} = 0.01875m$	<p>Tiempo</p> $\Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{físico}} \Delta x \quad \text{sea } C_s^{LB} = \sqrt{\frac{1}{3}}$ $C_s^{físico} = 340.3 \frac{m}{s} \Big _{15.5^{\circ}C \text{ y } 1 \text{ atm}}$ $\Rightarrow \Delta t = \frac{C_s^{LB}}{C_s^{físico}} \Delta x = \frac{\sqrt{\frac{1}{3}}}{340.3 \frac{m}{s}} (0.01875m) = 3.1811 \times 10^{-5} s$
<p>Índice de consistencia</p> $k_{LB} = \frac{k_{fís} (\Delta t)^{2-n}}{\rho_{fís} (\Delta x)^2} = \frac{16.06 Pa \cdot s^n (3.1811 \times 10^{-5})^{2-0.5}}{1005.83 \frac{kg}{m^3} (0.01875)^2} = 8.1486 \times 10^{-5}$	

Tabla 4.2 Conversión de unidades físicas a unidades de rejilla para algunas variables utilizadas

De igual manera, en la tabla (4.3) se presenta los valores del índice de consistencia, como resultado de las conversiones para todas las muestras de la goma Flamboyán.

Goma Flamboyán (muestra A)				
T= 5°C; GN = 4.0%; pH = 9.0				
n = 0.5	Variables en el Sistema Internacional de Unidades	Valores	Variables en unidades de Rejilla	Valores
		$k_f [=] Pa \cdot s^n$	16.06	k_{LB}
Goma Flamboyán (muestra B)				
T= 5°C; GN = 4.0%; pH = 9.0				

n = 0.52	VARIABLES EN EL SISTEMA INTERNACIONAL DE UNIDADES	Valores	VARIABLES EN UNIDADES DE REJILLA	Valores
	$k_f [=] \text{Pa} \cdot \text{s}^n$	16.32	k_{LB}	1.0186×10^{-5}
Goma Flamboyán (muestra A) T = 25°C; GN = 4.0%; pH = 9.0				
n = 0.4708	VARIABLES EN EL SISTEMA INTERNACIONAL DE UNIDADES	Valores	VARIABLES EN UNIDADES DE REJILLA	Valores
	$k_f [=] \text{Pa} \cdot \text{s}^n$	13.8158	k_{LB}	5.1807×10^{-5}
Goma Flamboyán (muestra B) T = 25°C; GN = 4.0%; pH = 9.0				
n = 0.4961	VARIABLES EN EL SISTEMA INTERNACIONAL DE UNIDADES	Valores	VARIABLES EN UNIDADES DE REJILLA	Valores
	$k_f [=] \text{Pa} \cdot \text{s}^n$	12.0731	k_{LB}	5.883×10^{-5}
Goma Flamboyán (muestra A) T = 45°C; GN = 4.0%; pH = 9.0				
n = 0.5	VARIABLES EN EL SISTEMA INTERNACIONAL DE UNIDADES	Valores	VARIABLES EN UNIDADES DE REJILLA	Valores
	$k_f [=] \text{Pa} \cdot \text{s}^n$	7.84	k_{LB}	3.978×10^{-5}
Goma Flamboyán (muestra B) T = 45°C; GN = 4.0%; pH = 9.0				
n = 0.46	VARIABLES EN EL SISTEMA INTERNACIONAL DE UNIDADES	Valores	VARIABLES EN UNIDADES DE REJILLA	Valores
	$k_f [=] \text{Pa} \cdot \text{s}^n$	13.47	k_{LB}	4.5165×10^{-5}

Tabla 4.3 Valores del índice de consistencia en unidades de red

Una vez conocidos los valores de las variables físicas en unidades de red, se realizó la simulación computacional para las seis muestras de la goma Flamboyán.

En la figura (4.21), se muestra el programa utilizado, con los valores en unidades de red para el caso de $n = 0.5$ con un valor de $k_{LB} = 8.1486 \times 10^{-5}$

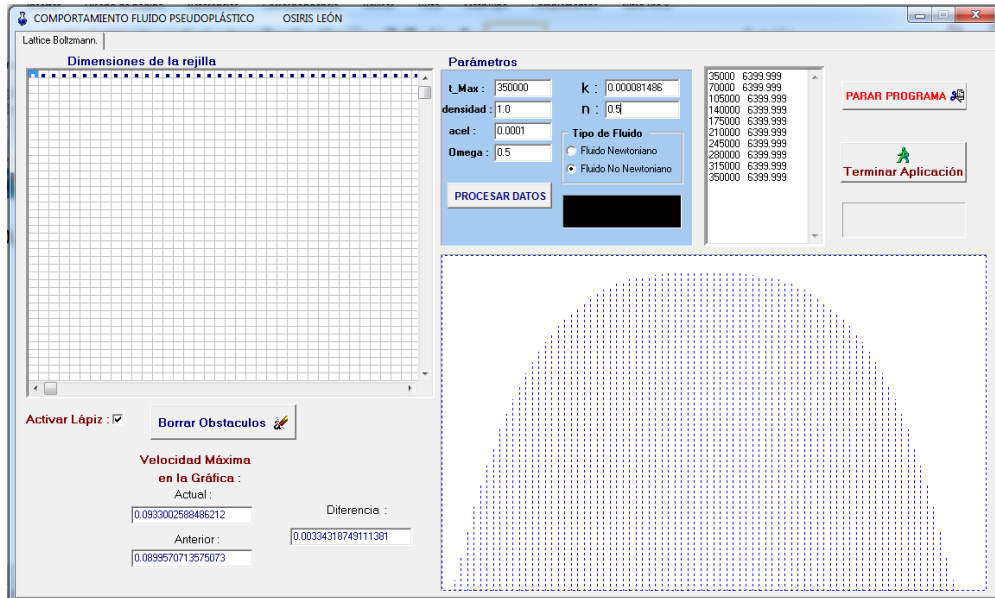


Figura 4.21 Programa para simular fluidos pseudoplásticos con el método de redes de Boltzmann, para un valor de $n = 0.5$ y $k_{LB} = 8.1486 \times 10^{-5}$

En la Figura (4.22) se presenta la comparación de las seis simulaciones con redes de Boltzmann con los perfiles de velocidad obtenidos para las muestras de goma Flamboyán, los cuales fueron mostrados en las figuras (4.17 y 4.18). Cabe mencionar que los errores relativos entre ambas graficas fue menor que el 1.02%.

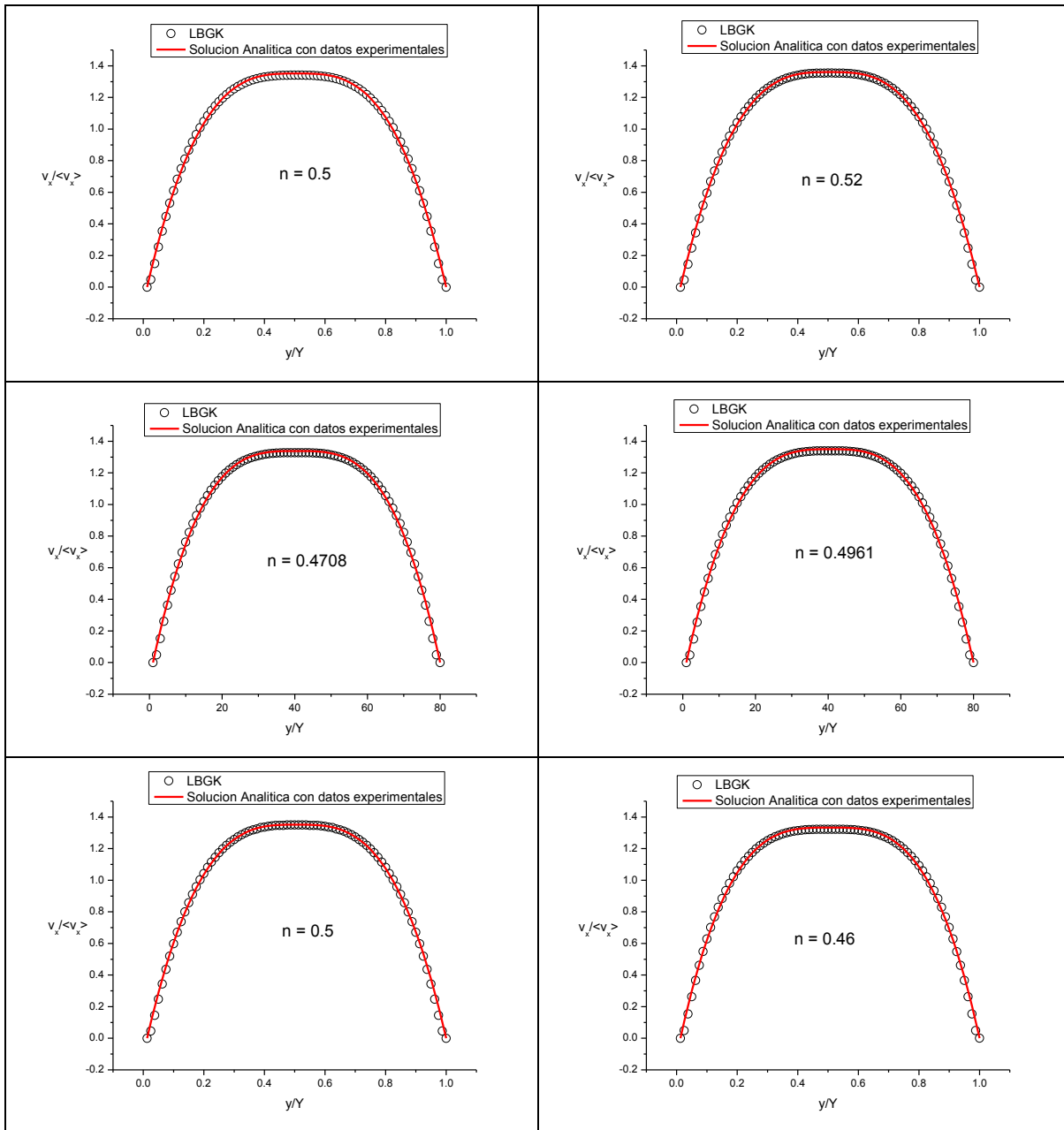


Figura 4.22 Perfiles de velocidad con redes de Boltzmann y con la solución analítica utilizando las ecuaciones (4.4) y (4.5) para los valores de $n = 0.5, 0.52, 0.4708, 0.4961, 0.5$ y 0.46 , con valores adimensionales de velocidad y de posición

Por último, se obtuvieron los valores para los esfuerzos de corte y las velocidades de deformación para solución teórica, con las simulaciones del método de redes de Boltzmann y los valores experimentales obtenidos con el Viscosímetro Haake RT20, para las seis muestras; para lo cual, se normalizaron todos los valores. Las figuras (4.23) – (4.28) muestran las tendencias de dichos valores.

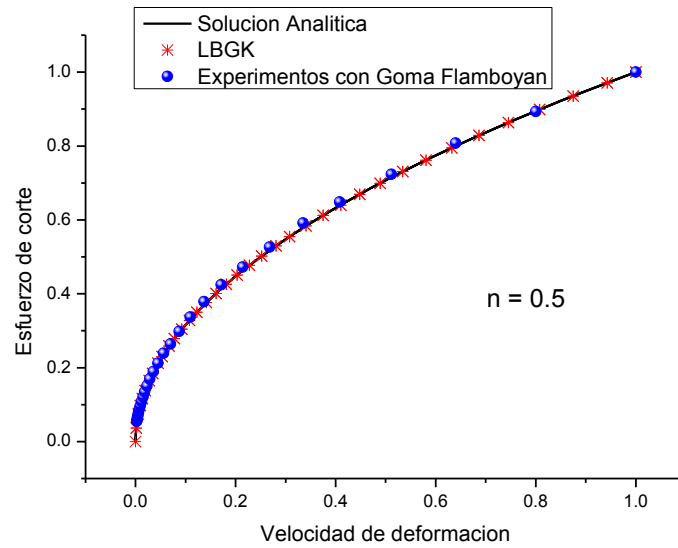


Figura 4.23 Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.5$, y $k = 16.06 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$

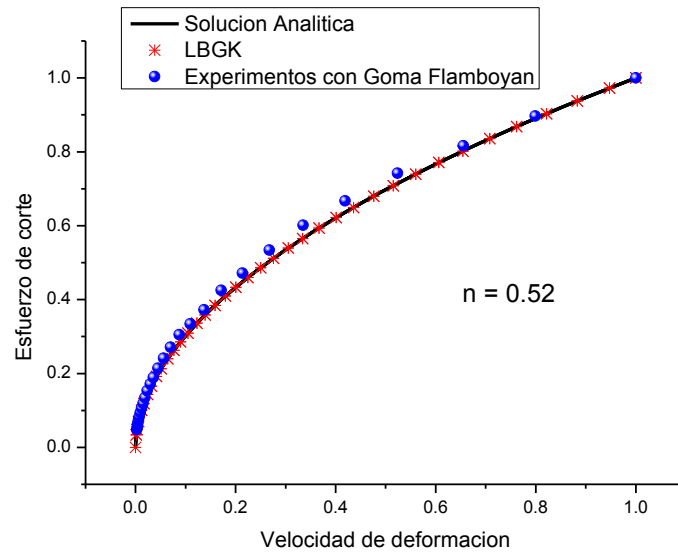


Figura 4.24 Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.52$, y $k = 16.32 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$

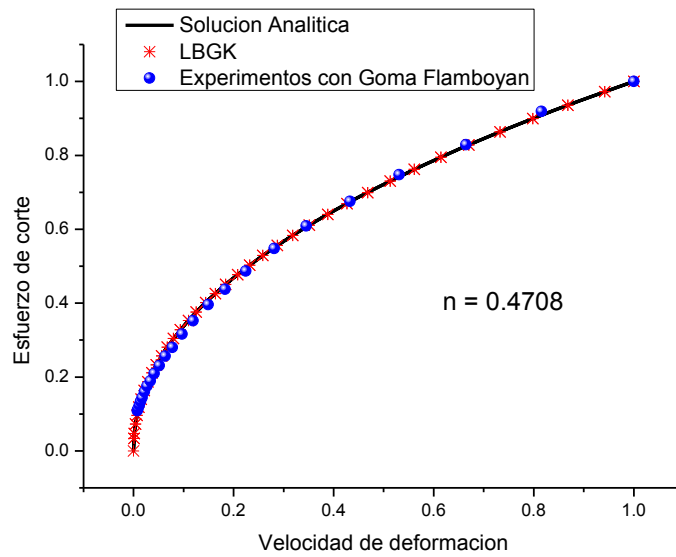


Figura 4.25 Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.4708$, y $k = 13.8158 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$

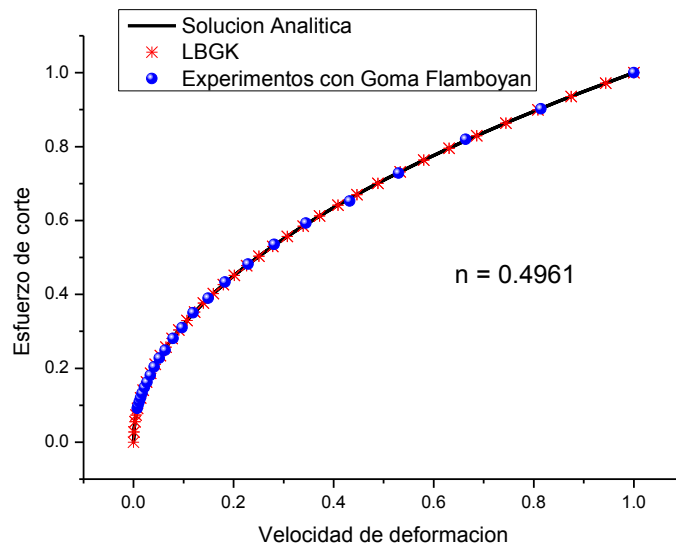


Figura 4.26 Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.4961$, y $k = 12.0731 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$

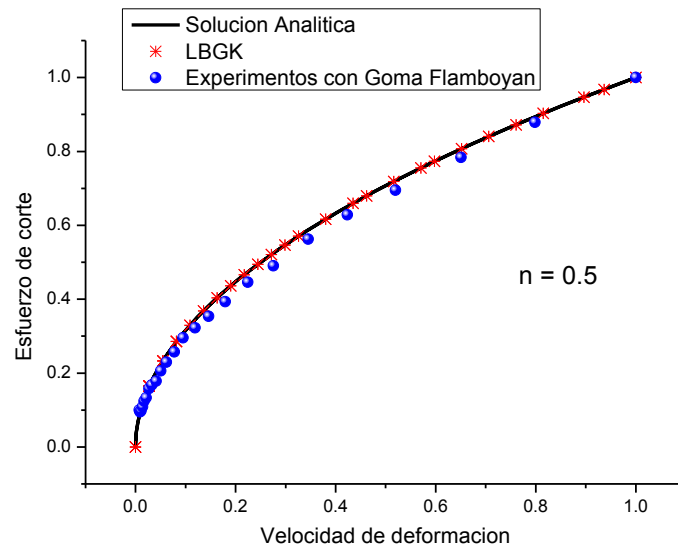


Figura 4.27 Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.5$, y $k = 7.84 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$

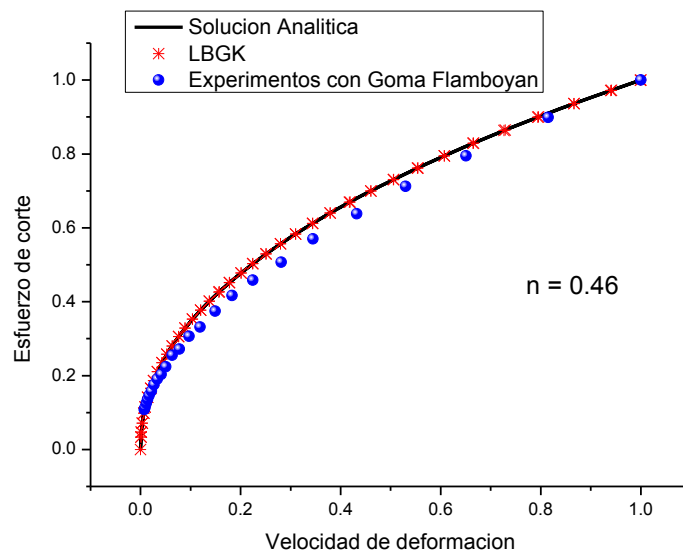


Figura 4.28 Esfuerzo de corte vs velocidad de deformación normalizados con solución analítica, redes de Boltzmann y con valores obtenidos de la experimentación con goma Flamboyán $n = 0.46$, y $k = 13.47 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$

REFERENCIAS

- [1] Bruno M. L. “Modelado y analisis del flujo de agua en medios porosos heterogéneos total o parcialmente saturados”, Tesis de Doctorado, Facultad de Ciencias Astronomicas y Geofisicas. Universidad Nacional de la Plata, 2013.
- [2] Carrasco. B. A. Application of the Lattice Boltzmann Method to issues of coolant flows in nuclear power reactors. Master Thesis, Lehrstuhl für Nukleartechnik, 2013.
- [3] Chhabra R. P. and Richardson J.F. “Non-Newtonian flow in the process industries”, 1ª Edición, Butterworth,-Heinemann 1999.
- [4] Fridtjov I. “Rheology and Non-Newtonian fluids”, 1ª Edition, Springer, 2014.
- [5] José Luis Velázquez Ortega, “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.
- [6] Llumiquinga Suquillo Jenny Elizabeth, “Estudio de las viscosidades medias en las tuberías de sistemas de distribución de fluidos no Newtonianos tipo Barbotina en la empresa FV para propósitos de aumento de la eficiencia en procesos de producción”, Escuela Politécnica Nacional – Facultad de Ingeniería Mecánica. Quito, enero 2012.
- [7] Ma Eugenia Ramírez-Ortiz, Wilbert Rodríguez-Canto, Luis Jorge Corzo-Rios, Santiago Gallegos-Tintoré, David Betancur-Ancona and Luis Chel-Guerrero. Capítulo 4: “Evaluación de algunas características reológicas y bioactivas de hidrocoloides mixtos provenientes de goma de Flamboyán (Delonix regia) y proteínas de leguminosas (Phaseolus Lunatus y Vigna Unguiculata), para su potencial aplicación como ingrediente funcional”. Tendencias de innovación en la ingeniería de alimentos. Barcelona, España: OmniaScience. 91-138, 2016.
- [8] Noelia Llorente Remartínez, “Validación del método de redes de Boltzmann para la simulación multifásica de un plato perforado de columna de destilación”, proyecto tesis, Universidad Politécnica de Madrid, España. E.T.S. de Ingenieros Industriales. Madrid, Octubre de 2016.
- [9] Panayotis A. S. Modeling flue pipes: subsonic flows, lattice Boltzmann, and parallel distributed Computers. PhD Thesis, Massachusetts Institute of Technology, January 1995.

- [10] Pérez D. J. L. SimBoltz: Simulación de fluidos mediante el método de Lattice Boltzmann. Proyecto de Sistemas Informáticos, Universidad Complutense de Madrid, 2009-2010.
- [11] Phi H. N. Numerical Simulation of the Lattice Boltzmann Method for determination of hydrodynamics properties of fractal Aggregates. Docteur ès sciences, Université de Genève, juillet 2007.
- [12] Skordos P. A. "Modeling flue pipes: subsonic flow, Lattice Boltzmann, and parallel distributed computers", Thesis Doctor of Philosophy, Massachusetts Institute of Technology, 1995.
- [13] Steffe, J. F. "Rheological Methods in food process engineering", 2^a Edition, Freeman Press, 1996.
- [14] Steffe, J. F. and Daubert, C. R. "Bioprocessing Pipelines: Rheology and Analysis", Freeman Press, 2006.

5 CONCLUSIONES

En el trabajo presente, fue aplicado el método de redes de Boltzmann a fluidos no Newtonianos de la potencia con comportamiento pseudoplástico.

Se realizaron validaciones con la solución analítica de los perfiles de velocidad y las simulaciones con redes de Boltzmann, para el caso de fluidos con comportamiento pseudoplástico para valores del índice de consistencia (n) de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6 y 0.7. En todas las simulaciones, el error relativo entre ambos resultados no superó el 0.86%.

Para el caso de seis muestras de gomas de Flamboyán, se obtuvieron resultados experimentales (por investigadores de la Universidad Autónoma de Yucatán (UAY), Instituto Politécnico Nacional (IPN) y de la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán UNAM) en un Viscosímetro Haake RT20, los cuales mostraron el comportamiento de un fluido pseudoplástico con valores de $n = 0.5, 0.52, 0.4708, 0.4961, 0.5$ y 0.46 y con un valor de índice de consistencia (k) de 16.06, 16.32, 13.8158, 12.0731, 7.84 y 13.47 Pa·s ^{n} respectivamente. Con los resultados anteriores se calcularon los perfiles de velocidad teóricos y se realizaron simulaciones con el modelo de redes de Boltzmann propuesto. Nuevamente se hicieron comparaciones entre ambos, obteniendo un error relativo menor al 1.02%. De igual forma, se compararon los resultados experimentales obtenidos con las seis muestras de goma de Flamboyán, solución teórica y con las simulaciones con redes de Boltzmann, para las gráficas de esfuerzo de corte y velocidad de deformación, obteniendo resultados aceptables en los comportamientos de las mismas.

El método de redes de Boltzmann, resulta ser una alternativa a los métodos convencionales de la mecánica de fluidos computacional, además de presentar facilidad en cuanto a su programación y su implementación.

Como un trabajo próximo, sería conveniente aplicar la técnica de redes de Boltzmann en la caracterización de propiedades reológicas de aleaciones que son fabricadas mediante técnicas de procesamiento de semisólidos.

Por otra parte, redes de Boltzmann podría ser aplicado a problemas de procesamiento de metales en los que estén involucrados fenómenos de transporte, ya que resulta ser un área de oportunidad para aplicar dicha técnica.

Redes de Boltzmann resulta ser una herramienta importante en la simulación y su posible predicción de resultados en problemas de transferencia de momento, calor y masa en procesamiento de metales con la ventaja de reducir un gran número de experimentos, así como de poder hacer eficientes estos procesos.

Sería conveniente comparar la técnica de redes de Boltzmann con otras técnicas computacionales, como podrían ser el método del elemento finito, volumen finito, diferencias finitas y el método de Montecarlo, desde el punto de vista computacional con la intención de conocer las bondades que presentan dichas técnicas.

El procesamiento de aleaciones en estado semisólido, en sus versiones, *Rheocasting*, *Thixoforming*, *Thixoforging* o *Thixocasting*, por todas las ventajas que ofrecen existen varias líneas de investigación, profundizar en el fenómeno de la transformación dendrítica y en el desarrollo y aplicación de modelos útiles en la simulación de procesos.

Debido a que las aleaciones en estado semisólido tienen un comportamiento pseudoplástico y con los resultados expuestos en este trabajo, el método de redes de Boltzmann se presenta como una opción viable para la simulación en el modelado.

Un área de oportunidad para ser trabajada con la técnica aquí presentada, sería la relacionada con la mecánica de fluidos y la transferencia de calor de medios porosos inmersos en el procesamiento de nuevos materiales.

Resultaría interesante conjuntar los trabajos de los expertos que trabajan en el área de materiales de la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, con el personal de la Facultad que trabaja con la técnica de redes de Boltzmann, con la finalidad de colaborar en proyectos teórico-experimentales.