Asociación Argentina

de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXVI, pp.1092-1103 Sergio A. Elaskar, Elvio A. Pilotta, Germán A. Torres (Eds.) Córdoba, Argentina, Octubre 2007

REDES DE BOLTZMANN PARA LA SIMULACIÓN DE ESCURRIMIENTOS SUPERFICIALES

D. Dalponte^a, P. Rinaldi^a, M. Vénere^b, A. Clausse^b

^aPLADEMA-CICPBA y Universidad Nacional del Centro, Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina, {ddalpont,prinaldi}@exa.unicen.edu.ar ^bCNEA-CONICET y Universidad Nacional del Centro, Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina, {venerem,clausse}@exa.unicen.edu.ar

Palabras Clave: Redes de Boltzmann, Autómatas Celulares, Escurrimiento superficial.

Resumen. Las redes de Boltzmann resuelven ecuaciones mesoscópicas que representan la interacción entre partículas, y a partir de dicha interacción se emula el comportamiento macroscópico del sistema. Cada celda de la red de Boltzmann representa una celda espacial que contiene partículas en reposo y moviéndose hacia las celdas vecinas, lo cual se representa con una función de distribución en cada una de estas celdas. Conocida la función distribución de velocidades, las variables macroscópicas del sistema (densidad, velocidad, presión) se obtienen fácilmente. En este trabajo se presenta una aplicación del método de redes (*Lattice*) de Boltzmann (LBM) a la simulación del modelo en una plataforma de desarrollo de un simulador de fluidos aplicable a otros dominios (*e.g.* Navier-Stokes, flujos compresibles, etc.).

1 INTRODUCTION

Los Autómatas Lattice Boltzmann (LBA) son una evolución de los Lattice Gas Cellular Automata (LGCA), y se plantearon inicialmente para superar sus problemas de "ruido" numérico de estos últimos (Succi, 2001). La idea básica de LBA es construir un modelo cinético mesoscópico con variable interna discreta (i.e. velocidad), cuyas propiedades macroscópicas promediadas cumplan con las ecuaciones macroscópicas deseadas (Chen y Doolen, 1998).

Entre las aplicaciones de los autómatas de Boltzmann se destacan las simulaciones de Higuera y Succi (1989) de flujos alrededor de obstáculos cilíndricos, Foti y Succi (1989) en simulaciones de flujos tridimensionales sobre geometrías complejas, los experimentos en medios permeables de Cancelliere et al. (1990), la simulación de alta resolución de Succi, Santangelo y Benzi (1988) de gases turbulentos, y la aplicación de Chen et al. (1991) al estudio de la interacción de campos magnéticos y fluidos conductivos como plasmas o metales líquidos.

En este trabajo se presenta un modelo LBA de las ecuaciones de flujo superficial con fuentes y sumideros de masa locales. Este modelo es una generalización del planteo de Zhou (2004), donde se demostró la viabilidad de LBA para tratar las ecuaciones de Saint-Venant.

2 MODELO DE LATTICE BOLTZMANN

El Modelo de Lattice Boltzmann (LBM) es un autómata celular que discretiza el espacio como una grilla regular de celdas cuyo estado está representado por una población de "partículas" mesoscópicas. El estado de las partículas se representa por una función distribución $f_{\alpha}(x,t)$ que representa la cantidad de partículas en la celda x en el tiempo t moviéndose con velocidad \vec{v}_{α} . Las variables macroscópicas (i.e. los observables físicos) se generan a partir de los momentos de $f_{\alpha}(x,t)$ respecto de la variable \vec{v}_{α} . En el caso de un flujo superficial, la altura de agua en la celda x al tiempo t, h(x,t), es el momento cero:

$$h(x,t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(x,t)$$
(1)

El flujo, $h(x,t) \vec{u}(x,t)$, está determinado por el primer momento:

$$h(x,t)\,\vec{u}(x,t) = \sum_{\alpha} \vec{v}_{\alpha} f_{\alpha}(x,t) \tag{2}$$

donde $\vec{u}(x,t)$ es la velocidad promedio del fluido.

En este trabajo se utilizó la red de Moore, que define 8 vectores discretos de velocidad, que llevan a las partículas de su posición actual a las celdas vecinas, los cuales con el vector nulo completan un conjunto de 9 elementos. Las velocidades \vec{v}_{α} son entonces:

$$\vec{v}_{o} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{v}_{1} = \begin{pmatrix} v \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_{2} = \begin{pmatrix} 0 \\ v \end{pmatrix} \quad \vec{v}_{3} = \begin{pmatrix} -v \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_{4} = \begin{pmatrix} 0 \\ -v \end{pmatrix}$$

$$\vec{v}_{5} = \begin{pmatrix} v \\ v \end{pmatrix} \quad \vec{v}_{6} = \begin{pmatrix} v \\ -v \end{pmatrix} \quad \vec{v}_{7} = \begin{pmatrix} -v \\ v \end{pmatrix} \quad \vec{v}_{8} = \begin{pmatrix} -v \\ -v \end{pmatrix}$$
(3)

donde $v = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ es el cociente entre el ancho de celda y el paso de tiempo.

De acuerdo al esquema de los autómatas celulares, la función distribución $f(\vec{v}, \vec{x}, t)$ cambia de estado según reglas explícitas. LBM está basado en 3 reglas que se ejecutan secuencialmente:

2.1 Regla de Advección

La regla de *advección* transforma la función $f(\vec{v}, \vec{x}, t)$ de acuerdo a:

$$f^{a}(\vec{v}, \vec{x} + \vec{v} \Delta t, t + \Delta t) = f(\vec{v}, \vec{x}, t) + \Delta t S(\vec{v}, \vec{x}, t)$$
(4)

donde $S(\vec{v}, \vec{x}, t)$ es un término fuente.

2.2 Regla de Colisión

La regla de colisión hace que las partículas de una misma celda cambien de velocidad \vec{v}_{α} de manera tal que se satisfagan las ecuaciones de conservación en el nivel macroscópico. En el caso de flujo superficial la regla de colisión cambia la distribución f en una distribución f^e (llamada de equilibrio) de manera de satisfacer las ecuaciones de conservación de masa y momento, lo cual implica que los momentos 0, 1 y 2 de f deben cumplir en cada celda (Zhou, 2004):

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}^{e} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} = h \tag{5}$$

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}^{e} \vec{v}_{\alpha} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \vec{v}_{\alpha} = h\vec{u}$$
(6)

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}^{e} \vec{v}_{\alpha} \vec{v}_{\alpha}^{T} = \vec{\pi} = h \vec{u} \vec{u}^{T} + \frac{g h^{2}}{2} I$$
(7)

En cada celda, los nueve valores de f_{α}^{e} deben satisfacer las ecuaciones (5), (6) y (7), por lo cual hay una indeterminación de 2 grados de libertad. Una manera de cerrar las ecuaciones es postulando que en cada celda f_{α}^{e} es una función de las variables macroscópicas h y \vec{u} .

Desarrollando a segundo orden en \vec{u} se tiene (Zhou, 2004):

$$f_{\alpha}^{\ e} = A_{\alpha} + B_{\alpha} \vec{v}_{\alpha}^{T} \vec{u} + \left[\left(C_{\alpha} \vec{\vec{\pi}} + D_{\alpha} I \right) \vec{u} \right]^{T} \vec{u}$$

$$\tag{8}$$

donde los coeficientes A, B, C, y D son funciones de h.

Dado que la función distribución tiene que conservar la simetría de la grilla, deben satisfacer:

$$A_1 = A_2 = A_3 = A_4 = \overline{A}$$
 y $A_5 = A_6 = A_7 = A_8 = \overline{A}$ (9)

y expresiones análogas para B_{α}, C_{α} y D_{α} .

Combinando las ecuaciones (5), (6) y (7) se obtiene (Zhou, 2004):

$$A_{0} = h - \frac{5gh^{2}}{6e^{2}} \qquad D_{0} = -\frac{2h^{2}}{3e^{2}}$$
$$\overline{A} = \frac{gh^{2}}{6e^{2}} \qquad \overline{B} = \frac{h}{3e^{2}} \qquad \overline{C} = \frac{h}{2e^{4}} \qquad \overline{D} = -\frac{h}{6e^{2}}$$
$$\widetilde{A} = \frac{gh^{2}}{24e^{2}} \qquad \widetilde{B} = \frac{h}{12e^{2}} \qquad \widetilde{C} = \frac{h}{8e^{4}} \qquad \widetilde{D} = -\frac{h}{24e^{2}}$$
(10)

2.3 Regla de Relajación

Finalmente, en el paso de relajación se calcula una combinación lineal entre la función advectada f^a y la colisionada f^{eq} , es decir:

$$f^{r} = \varepsilon f^{a} + (1 - \varepsilon) f^{eq}$$
⁽¹¹⁾

2.4 Límite Diferencial a Primer Orden

El modelo LBA descrito tiende a las ecuaciones de aguas superficiales en el límite diferencial a primer orden. Considerando $\varepsilon = 1$ (i.e. sin relajación), se tiene:

$$f^{a}(\vec{v},\vec{x},t) = f^{e}(\vec{v},\vec{x}-\vec{v}\,\Delta t,t-\Delta t) + \Delta t\,S(\vec{v},\vec{x}-\vec{v}\,\Delta t,t-\Delta t)$$
(12)

Desarrollando el miembro de la izquierda a primer orden en Δt :

$$f^{a}(\vec{v},\vec{x},t) = f^{e}(\vec{v},\vec{x},t) - \Delta t \left[\frac{\partial f^{e}(\vec{v},\vec{x},t)}{\partial t} + \nabla \bullet \vec{v} f^{e}(\vec{v},\vec{x},t) \right] + \Delta t \ S(\vec{v},\vec{x},t)$$
(13)

Tomando los momentos 0 y 1 de la ecuación (13) respecto de \vec{v} , y usando las ecuaciones (5), (6) y (7) obtenemos:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \bullet \left(h\vec{u}\right) = \Delta t \, S_o \tag{14}$$

$$\frac{\partial(h\vec{u})}{\partial t} + \nabla \bullet \vec{\vec{\pi}} = \Delta t \, \vec{S}_1 \tag{15}$$

donde

$$S_o(\vec{x},t) = \sum_{\vec{v}} S(\vec{v},\vec{x},t)$$
(16)

$$\vec{S}_1(\vec{x},t) = \sum_{\vec{v}} \vec{v} S(\vec{v},\vec{x},t)$$
(17)

El paso de relajación $(0 \le \varepsilon < 1)$ introduce el término de viscosidad (Zhou, 2004) con viscosidad equivalente:

$$\nu = \frac{\nu^2 \,\Delta t}{6} \left(\frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon} \right) \tag{18}$$

3 TÉRMINO FUENTE

Las ecuaciones (16) y (17) representan las fuentes de masa y de impulso. Zhou (2004) propone la fuente:

$$S_{\alpha} = \frac{\vec{v}_{\alpha}^{T} \vec{F} \vec{v}_{\alpha}}{6v^{2}}$$
(19)

donde $\vec{F} = -g h \nabla z_b$ es la fuerza específica por unidad de altura debido al gradiente del terreno, ∇z_b , y g es la gravedad. Combinando las ecuaciones (16), (17) y (19):

$$S_o = 0 \tag{20}$$

$$\vec{S}_1 = \vec{F} \tag{21}$$

Con lo cual el autómata tiende a primer orden a las ecuaciones de aguas superficiales con gradiente finito de terreno, sin fuente de masa.

Para poder simular escurrimientos superficiales con fuentes de masa (i.e. precipitación, infiltración, evapotraspiración (Horton, 1933)) es necesario incluir un término fuente adicional, que no debe introducir fuerzas. Se propone:

$$S_{\alpha} = \frac{\dot{h}}{9} + \frac{\vec{v}_{\alpha}^{T} \vec{F} \vec{v}_{\alpha}}{6v^{2}}$$
(22)

Combinando las ecuaciones (20), (21) y (22):

$$S_o = \dot{h} \tag{23}$$

$$\vec{S}_1 = \vec{F} \tag{24}$$

4 RESULTADOS

4.1 Flujo Constante sobre un Bump

La simulación de un flujo de agua superficial sobre un bump semicilíndrico (montículo) es un problema clásico utilizado para validar modelos de simulación de escurrimientos superficiales, ya que existe solución analítica. La prueba consiste en simular un flujo sobre un canal cuyo fondo se define por:

$$z_{b}(x) = \begin{cases} 0.2 - 0.05(x - 10)^{2}, & 8 < x < 12\\ 0, & otro \ x \end{cases}$$
(25)

Se calculó el estado estacionario de un canal sin pendiente con flujo de entrada constante. Los parámetros de entrada-salida se muestran en la Tabla 1:

Parámetro	Valor
3	1/3
Δt	6.67 ms
Velocidad de entrada	0.02 m/s
Altura a la entrada	2.21 m
Δx	0.1 m

Tabla 1: Parámetros de simulación del flujo sobre bump.

La Figura 1 muestra el perfil de la superficie de agua a lo largo del canal comparado con la resolución analítica. Puede observarse que se produce una depresión en la superficie del fluido correspondiente en la zona del montículo. En la Figura 2 se muestra la visualización del mapa de contornos de altura, velocidad y vorticidad. Como en estado estacionario el caudal es uniforme a lo largo del canal, el fluido se acelera delante y se frena detrás del montículo, siguiendo la inversa de la altura. La vorticidad muestra efectos bidimensionales que son resultado de la interacción de la fricción en el montículo y los bordes.



Figura 1: Altura del fluido en un canal con bump (la curva es la solución analítica y los círculos son la simulación LBM).



Figura 2: Velocidad, altura y vorticidad del flujo en un canal con un bump.

4.2 Flujo alrededor de un cilindro

Esta prueba consiste en un flujo en un canal con un obstáculo (cilindro parado). Es un problema clásico de hidráulica que caracteriza a un conjunto de problemas fluviales, como el flujo alrededor de una isla o de un pilote de un puente.

Se simuló el flujo de agua en un canal de 4mts de largo por 2mts de ancho, con un obstáculo cilíndrico de 0.11 m de radio en el centro, para el cual se dispone de datos experimentales para comparar (Zhou, 2004). El caudal de entrada es 0.248m3/s y la altura del agua 0.185 m. Los parámetros de la simulación se muestran en la Tabla 2.

Parámetro	Valor
3	1/2
Δt	1 ms
Δx	0.1 m
Pendiente del fondo	0.0000468515742

Tabla 2: Parámetros de la simulación del flujo en un canal con obstáculo.

Los resultados obtenidos se comparan con los resultados experimentales en la Figura 3.



Figura 3: Altura de agua en la línea central de un flujo alrededor de un cilindro (la curva es el resultado de la simulación y los círculos son datos experimentales).

Como se observa en la Figura 3, los resultados se ajustan muy bien a los valores experimentales delante del cilindro. Detrás del cilindro la simulación difiere de las mediciones debido a que este modelo de LBM no contempla la turbulencia del flujo. El modelado de flujos turbulentos (muy importante en la simulación de problemas reales) requiere que el parámetro de relajación ε sea una función de u. Un ejemplo de modelado con turbulencia se presenta en Eggels (1996), en el cual se introduce un tensor de turbulencia al esquema de Boltzmann (ver Eggels y Somers, 1995).

5 PERTURBACIÓN DE UNA SUPERFICIE ESTANCADA POR LA CAÍDA DE GOTAS

La siguiente prueba tiene como objetivo mostrar el comportamiento de un fluido estancado sometido a una perturbación originada por pulsos de masa puntual e instantánea (gotas). Se simuló una cuba cuadrada con 5 cm de altura de agua. Los parámetros de la simulación se detallan en la Tabla 3.

Parámetro	Valor
3	1/3
Δt	1 s
Δx	1 m

Tabla 3: Parámetros de la simulación de gotas en una cuba.

En t = 0 se activa durante un solo paso temporal una fuente puntual de masa (altura) de 0.05 m/s en el centro de la superficie, lo cual simula la caída de una gota. Las Figuras 4 y 5 muestran una visualización en 4 instantes de tiempo luego de introducir la perturbación. En la parte superior de la imagen se muestra el campo de módulo de la velocidad y en la parte inferior la altura del fluido. Se puede ver que el autómata simula la típica onda circular que produce la gota y los rebotes en los bordes. En los pasos 3 y 4 se visualizan efectos de

interferencia de ondas.



Figura 4: Simulación con fuente de masa puntual e instantánea.



Figura 5: Simulación con fuente de masa puntual e instantánea.

En la Figura 6 se muestra la propagación de una onda simulada en un canal abierto, en el cual se introduce una perturbación similar a la anterior. Se grafican los valores de altura del flujo a lo largo del canal en función del tiempo sobre 4 puntos ubicados en el centro del canal, a distancia X de la celda perturbada. La velocidad de propagación de la onda se corresponde con los valores analíticos esperados:

$$v = \sqrt{gh} \tag{25}$$



Figura 6: Velocidad de propagación de la onda en un canal sin pendiente.

6 CONCLUSIONES

Se presentó la implementación de un autómata lattice Boltzmann de flujo superficial. La evolución temporal del autómata permite obtener las variables físicas macroscópicas (velocidad y altura de líquido) como promedio de las variables internas, las cuales representan poblaciones locales de partículas mesoscópicas. Se propuso un término simple de fuente, que permite la simulación de flujos superficiales con incorporación de fuentes de masa locales y dependientes del tiempo. Los resultados del modelo fueron comparados con soluciones analíticas y datos experimentales, mostrando buen acuerdo. A partir de los resultados obtenidos en este trabajo se plantean diversas extensiones y trabajos futuros. Entre las propuestas se incluye la inclusión de modelos de turbulencia y de fuentes de fuerzas externas como rozamiento o viento.

REFERENCES

Cancelliere A., Chan E., Fotu E., Rothman D. and Succi S., The permeability of a random media: comparison of simulation with theory, Phys. Fluids Lett. A 2, 2085, 1990.

Chen S., Chen H., Martinez D. y Matthaeus W., Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics, Phys. Rev. Lett. 67(27), 3776, 1991.

Chen S., Doolen G. D., Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows, Annual Reviews Fluid

Mechanics. 30:329-64, 1998.

- Eggels, Jack G. M., Direct and large-eddy simulation of turbulent fluid flow using the lattice-Boltzmann scheme, Int J Heat Fluid Flow 17 (1996), pp. 307–323.
- Eggels, J. G. M. y Somers, J. A. 1995. Numerical simulation of the free convective flow using the lattice-Boltzmann scheme. Int. J. Heat Fluid Flow, 16, 357-364
- Foti E. y Succi S., Three-dimensional flows in complex geometries with the lattice Boltzmann method, Europhys. Lett. 10(5), 433, 1989.
- Higuera F. and Succi S., Simulating the flow around a circular cylinder with a lattice Boltzmann equation, Europhys, Lett. 8, 517, 1989
- Horton R. E., The role of infiltration in the hydrologic cycle, Trans. Am. Geophys. Union. vol.14, pp.446-460, 1933.
- Succi S., The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Clarendon Press, Oxford, 2001.
- Succi S., Santangelo P. y Benzi R., High resolution lattice gas simulation of two-dimensional lattice gas turbulence, Phys. Rev. Lett. 60, 2738, 1988.
- Zhou J. G., Lattice Boltzmann methods for Shallow Water Flows. Springer-Verlag, 2004.