

UNIVERSIDAD DE ORIENTE  
NÚCLEO DE SUCRE  
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS  
POSTGRADO EN MATEMÁTICAS



**SIMULACIÓN DEL FLUJO MULTIFÁSICO EN MEDIO POROSO  
UTILIZANDO LA TÉCNICA DE AUTÓMATA CELULAR  
(MÉTODO DE *LATICCE* BOLTZMANN)**

INGENIERO JUAN FRANCISCO MAGO MARCANO

TRABAJO PRESENTADO COMO REQUISITO PARCIAL PARA OPTAR AL  
TÍTULO DE MAGISTER SCIENTIARUM EN MATEMÁTICAS

CUMANÁ, JULIO DE 2021

SIMULACIÓN DEL FLUJO MULTIFÁSICO EN MEDIO POROSO  
UTILIZANDO LA TÉCNICA DE AUTÓMATA CELULAR (MÉTODO DE  
*LATICCE* BOLTZMANN)

APROBADO POR:

---

Dra. María Malavé  
Tutor(a)

---

Dr. Ney Luiggi  
Jurado Principal

---

Dr. Julio Marin  
Jurado Principal

## RESOLUCIÓN

De acuerdo al Artículo 41 del reglamento de Trabajos de Grado de la Universidad de Oriente: “Los Trabajos de Grado son de exclusiva propiedad de la Universidad y sólo podrán ser utilizados para otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, el cual participará al Consejo Universitario”.

## DEDICATORIA

A mis Hijos Juan y Francisco.

A mis Padres Francisco y Noraima.

## AGRADECIMIENTOS

A Dios, a la Virgen del Valle y de todo corazón a la Dra. María Teresa Malavé por su infinita paciencia, por su valiosa orientación y formación en toda la maestría.

# ÍNDICE

	Pág.
<b>LISTA DE FIGURAS</b>	<b>X</b>
<b>LISTA DE TABLAS</b>	<b>XI</b>
<b>RESUMEN</b>	<b>XII</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS</b>	<b>4</b>
1.1 Ecuaciones de Navier-Stokes . . . . .	4
1.1.1 Ecuación de Continuidad . . . . .	4
1.1.2 Ecuación de Momento . . . . .	6
1.2 Autómata Celular . . . . .	8
1.2.1 Autómata Celular Unidimensional . . . . .	9
1.3 Autómata <i>Lattice</i> Gas . . . . .	10
1.4 Función de distribución y sus momentos . . . . .	13
1.5 Función de distribución de equilibrio . . . . .	15
1.6 La ecuación de Boltzmann y el operador de colisión . . . . .	15
1.7 De Boltzmann a Navier-Stokes . . . . .	16
1.8 Ecuación de <i>Lattice</i> Boltzmann . . . . .	18
1.8.1 Discretización de la Ecuación de Boltzmann . . . . .	18
1.8.2 Discretización de la Ecuación de Equilibrio de Maxwell Boltzmann . . . . .	19
1.8.3 Lattice Boltzmann-BGK a Navier-Stokes. . . . .	19
<b>2 MÉTODO DE <i>LATTICE</i> BOLTZMANN</b>	<b>23</b>
2.1 El paso del tiempo: Colisión y Propagación . . . . .	25

2.2	Implementación del método . . . . .	26
2.2.1	Inicio . . . . .	26
2.2.2	Algoritmo del Paso del Tiempo . . . . .	26
2.2.3	Condiciones de frontera de rebote . . . . .	27
2.2.4	Relación entre unidades <i>Lattice</i> y unidades físicas. . . . .	28
2.3	Modelo de Autómata Celular para flujo monofásico usando <i>Lattice</i> Boltzmann D2Q9. . . . .	29
2.3.1	Inicio . . . . .	29
2.3.2	Función de Distribución . . . . .	30
2.4	Condiciones de Frontera. . . . .	30
2.4.1	Propagación . . . . .	31
2.4.2	Gráficos . . . . .	32

### **3 MÉTODO DE *LATTICE* BOLTZMANN PARA FLUJO MULTIFÁSICO MULTICOMPONENTE 33**

3.1	Velocidad de Equilibrio en el Modelo Shan-Chen . . . . .	33
3.2	Cohesión fluido-fluido y adhesión fluido-sólido . . . . .	34
3.3	Determinación de $G_c$ y la tensión interfacial . . . . .	35
3.4	Ángulo de Contacto . . . . .	35
3.5	Fluidos Inmiscible y Fluidos Parcialmente Inmiscible. Tensión Inter- facial. . . . .	36
3.6	Condiciones de Frontera y Ángulo de Contacto . . . . .	38
3.7	Desarrollo del Modelo <i>Lattice</i> Boltzmann-BGK D2Q9 para flujo mul- tifásico . . . . .	40
3.7.1	Inicio . . . . .	40
3.7.2	Función de Distribución . . . . .	40
3.7.3	Condiciones de frontera . . . . .	42
3.8	Modelos de Flujos Multifásicos . . . . .	42
3.8.1	Separación de fases de dos fluidos inmiscibles . . . . .	42

3.8.2	Propiedades de los Fluidos . . . . .	43
3.8.3	Gráficos 1 . . . . .	45
3.9	Multifásico en Medio Poroso . . . . .	45
3.10	Gráficos 2 . . . . .	45
<b>CONCLUSIONES</b>		<b>48</b>
<b>RECOMENDACIONES</b>		<b>49</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>		<b>50</b>
<b>APÉNDICE A</b>		<b>52</b>
3.11	Programa para obtener la separación de fases de dos fluidos inmiscibles	52
<b>APÉNDICE B</b>		<b>55</b>
3.12	Programa para visualizar el desplazamiento de dos fluidos en un medio poroso . . . . .	55
<b>APÉNDICE C</b>		<b>57</b>
3.13	Programa para definir los obstáculos en el medio poroso, variables y funciones de distribución . . . . .	57



## LISTA DE FIGURAS

	Pág.
1.1 Elemento de volumen . . . . .	5
1.2 Ejemplo de suma $12 \bmod (7)$ . . . . .	10
1.3 Evolución espacio-temporal. Fuente: Ilachinski A. Cellular Autómata. A discrete universe. World Scientific Publishing. USA, 2001. . . . .	10
1.4 Evolución espacio-temporal. Fuente: Ilachinski A. Cellular Autómata. A discrete universe. World Scientific Publishing. USA, 2001 . . . . .	11
1.5 Rejilla y velocidad discreta del modelo HPP Fuente: G. Zhaoli, S. Chang. Lattice Boltzmann Method and its Application in Engineer- ing. World Scientific Publishing. USA, 2008. . . . .	12
1.6 Rejilla y velocidad discreta del modelo FHP Fuente: G. Zhaoli, S. Chang. Lattice Boltzmann Method and its Application in Engineering . World Scientific Publishing. USA, 2008. . . . .	14
2.1 Modelo de Velocidad Discreta (D2Q9) . . . . .	24
2.2 Modelo de Colisión . . . . .	26
2.3 Modelo de Propagación . . . . .	26
2.4 Algoritmo del método LB. Fuente: El autor . . . . .	27
2.5 Frontera no deslizante . . . . .	28
2.6 Ejemplo de Matrices de Funciones de Distribución D2Q9. Fuente: El autor . . . . .	30
2.7 Ejemplo Matriz Booleana. Fuente: El autor . . . . .	31
2.8 Ejemplo Matriz con Sólidos. Fuente: El autor . . . . .	31
2.9 Ejemplo de Propagación Horizontal. Fuente: El autor . . . . .	32
2.10 Perfil de Velocidades D2Q9 en Medio Poroso . . . . .	32

3.1	Densidad de componentes (eje izquierdo) y tensión interfacial de Lattice (eje derecho) en función del parámetro de cohesión $Gc$ . Multi-phase Lattice Boltzmann Methods. Haibo Huang, Michael Sukop y Xi Yun Lu. . . . .	36
3.2	Escala de componente de densidad (eje izquierdo) y escala de tensión superficial . . . . .	37
3.3	Algoritmo LB multifásico y multicomponentes . . . . .	39
3.4	Ejemplo de Matrices de valores de función de distribución . . . . .	40
3.5	Ejemplo de Matrices de Densidades. Fuente: El autor . . . . .	41
3.6	Ejemplo de Matriz Medio Poroso. Fuente: El autor . . . . .	43
3.7	Separación de dos fluidos inmiscibles $ts = 100, ts = 500, \tau_1 = 1, \tau_2 = 0.9$	45
3.8	Separación de dos fluidos inmiscible $ts=1000, ts = 100, \tau_1 = 1, \tau_2 = 0.9$	46
3.9	Flujo Bifásico desplazandose en un Medio Poroso . . . . .	47

## LISTA DE TABLAS

	Pág.
2.1 Pesos y velocidad del sonido . . . . .	24
3.1 Propiedades de los Fluidos . . . . .	43

## RESUMEN

Se utilizó el modelo bidimensional de velocidad D2Q9 para crear un autómata celular aplicando el método de *Lattice* Boltzmann a dos fluidos inmiscibles, agua y aceite y simular el proceso de separación de fases de ambos fluidos. Con la introducción de un medio poroso, se pudo simular la evolución de fluidos monofásicos en este medio y observar su comportamiento con el paso del tiempo. Básicamente la dinámica se basa en los procesos de colisión y propagación entre partículas. Se obtuvo una generalización de este algoritmo para flujos multifásicos con múltiples componentes. Parte de estas simulaciones, constituyen un punto de partida para el análisis de las emulsiones, sobre todo en las emulsiones que se forman en los pozos de petróleo y afectan la producción.

## INTRODUCCIÓN

El flujo de fluidos en medios porosos es un tema que es relevante en el contexto de la producción de hidrocarburos, flujo de aguas subterráneas, transporte de petróleo y gas en roca porosa, el flujo en el subsuelo de embalses, la propagación de contaminantes químicos, las operaciones de filtración y sedimentación, etc. Por lo que modelarlo resulta una de los objetivos de las ciencias aplicadas que tiene más beneficios económicos, como en el área petrolera y el de la prevención ambiental. Es posible realizar una descripción física del fluido en tres escalas espaciales diferentes: microscópica, mesoscópica y macroscópica. Los flujos multifásico en medios porosos se modelan normalmente utilizando simulaciones en la escala macroscópica. Un fluido compresible en esta escala, está caracterizado por sus variables macroscópicas densidad ( $\rho$ ), velocidad ( $v$ ), presión ( $P$ ) y temperatura ( $T$ ). Las ecuaciones de Navier Stokes describen la dinámica de estas variables y se derivan utilizando hipótesis de la mecánica del continuo. Esta es la descripción clásica del fluido y la más difundida en la literatura. Las ecuaciones de la mecánica de fluidos son en general difícil de resolver. Algunas soluciones analíticas pueden ser construidas sólo para casos básicos tales como los flujos Couette y Poiseuille. Situaciones con geometrías más complejas típicamente son resueltas utilizando métodos numéricos, sin embargo los métodos numéricos utilizados para resolver las ecuaciones de la mecánica de fluidos pueden ser difíciles de implementar. En los últimos años, una serie de técnicas de Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) han tenido éxito en la simulación de sistemas multifluidos, incluido el Volumen de Fluidos (VOF) (Apsley y Hu, 2003; Galea et al., 2010), Método de Conjunto de Nivel (LS) (Menard et al., 2007). Sin embargo, debido a la limitación del rendimiento del ordenador y el cambio de topología, no es fácil para el DFC que se basan en las ecuaciones Navier-Stokes, modelar el flujo de fluido multifásico en medios porosos. En la descripción microscópica se considera un volumen macroscópico que contiene un gran número de moléculas ( $N$ ).

Ignorando efectos cuánticos las moléculas pueden ser representadas como partículas cuyos movimientos pueden ser descritos por la mecánica clásica. El estado del sistema de partículas está determinado por la posición y la cantidad de movimiento de cada partícula,  $2N \times d$  variables describen el sistema donde  $d$  es la dimensión espacial. Conociendo las fuerzas de interacción entre las partículas y especificando un punto en el espacio de fases, es posible de las ecuaciones de movimiento, determinar el estado del sistema para todo tiempo  $t$ . Resolver este problema, conocer con precisión la posición y velocidad de  $N$  partículas, carece de sentido práctico, además de imposible dada la incapacidad de conocer con precisión el estado inicial del sistema. La descripción mesoscópica del fluido es una descripción intermedia entre la microscópica y la macroscópica. La descripción es estadística, no es de interés determinar la evolución de las partículas individuales, las variables que lo describen son funciones de distribución de densidad de probabilidad que representan una colección de partículas. La mecánica estadística brinda una conexión entre la escala microscópica y macroscópica. La ecuación de Boltzmann es la que describe la evolución de la función de distribución de densidad de probabilidad. La función de distribución de densidad de probabilidad puede ser vista como una generalización de la densidad que toma en cuenta la velocidad microscópica de la partícula. En 1950 el matemático Von Neumann introdujo el concepto de Autómatas Celulares como modelos simples de autoreproducción biológica. Los Autómatas Celulares son sistemas matemáticos discretos deterministas caracterizados por la interacción local y una forma de evolución propia. Una vez establecidas las reglas de evolución, se puede determinar las sucesivas configuraciones del autómata en cada paso del tiempo, ver [1]. En 1973 Hardy, de Pazzis y Pomeau propusieron un Autómata Celular para modelar el flujo de fluidos que consistía en una red cuadrada donde las partículas se mueven de forma diagonal, con una regla de colisión. El método se caracteriza por que las celdas pueden estar llenas o vacías. Este método presentaba ciertas inconsistencias, por lo que se abandonó el carácter booleano del estado por una función de distribución de partículas, de esta manera nació el método de *Lattice Boltzmann*.

El método de *Lattice Boltzmann* es una discretización particular en el tiempo y en el espacio de fases de la ecuación de Boltzmann, la ecuación discreta se denomina ecuación *Lattice Boltzmann*, ver [2]. La LBE determina la dinámica de un conjunto discreto de funciones de distribución de densidad de probabilidad en una grilla espacial regular (*Lattice*). Los métodos numéricos que utilizan la ecuación discreta de un modelo cinético como LBE, operando sobre una rejilla espacial regular y un conjunto finito de velocidades se denomina método de *Lattice Boltzmann*. En las últimas dos décadas, el método de *Lattice Boltzmann* ha emergido como una prometedora herramienta para modelar las ecuaciones de Navier-Stokes y simulaciones complejas de flujo de fluidos. El método *Lattice Boltzmann* está basado en modelos microscópicos y ecuaciones cinéticas mesoscópicas.

El presente trabajo está organizado de la siguiente manera: en el capítulo 1 se dan los basamentos teóricos relacionados con la simulación de fluidos, autómatas celulares y discretización de las ecuaciones necesarias para implementar los algoritmos. Posteriormente, en el capítulo 2, se estudia el método de *Lattice Boltzmann* con sus respectivas variantes, en particular definimos la función de distribución que se utilizará en el método y los operadores de colisión involucrados. Finalmente en el capítulo 3, basados en el trabajo de Shan y Chen [3], se empleó el método de *Lattice Boltzmann* a flujos multifásicos inmiscibles en un medio poroso, los resultados aquí expuestos pueden ser utilizados para aplicarlos en la industria petrolera e industrias afines.

# CAPÍTULO 1

## FUNDAMENTOS TEÓRICOS

### 1.1 Ecuaciones de Navier-Stokes

Los flujos de fluidos son una presencia generalizada en la mayoría de las ramas de la actividad humana y la vida diaria en primer lugar. Aunque las ecuaciones básicas que rigen el movimiento de los flujos de fluidos se han conocido durante casi dos siglos, desde la obra de Claude-Louis Navier (1785-1836) y Gabriel Stokes (1819-1903), estas ecuaciones todavía establecen un desafío formidable a nuestra comprensión cuantitativa, y a veces incluso cualitativa, de la forma en que la materia fluida fluye en el espacio y el tiempo [4]. Un fluido a escala macroscópica está caracterizado por sus variables macroscópicas densidad, velocidad, presión y temperatura. Las ecuaciones de Navier Stokes describen la dinámica de estas variables y se derivan utilizando hipótesis de la mecánica del continuo. En este capítulo se derivaran estas ecuaciones (ecuación de continuidad y ecuación de Euler) aplicando la mecánica del continuo solo con objetivo de rescatarlas en los siguientes capítulos desde la Ecuación de Boltzmann y la Ecuación de *Lattice* Boltzmann para demostrar que el método de *Lattice* Boltzmann (MLB) es una aproximación a la solución de las Ecuaciones de Navier-Stokes.

#### 1.1.1 Ecuación de Continuidad

La primera de estas dos ecuaciones es la aplicación de la ley de conservación de la masa, a un pequeño pero finito volumen de líquido. El cambio en el tiempo de la masa en el volumen se debe al desequilibrio entre los flujos de masas entrantes y salientes. Se considera un volumen cuadrado  $V = \Delta x \Delta y$  por simplicidad y sin pérdida de generalidad, (ver figura 1.1.1).



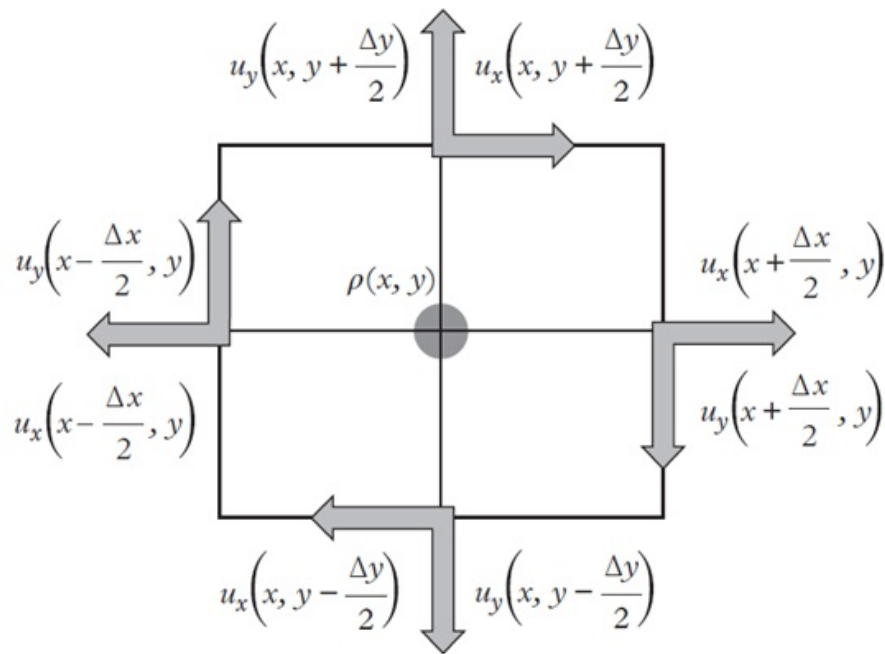


Figura 1.1: Elemento de volumen

El incremento de masa del elemento en el lapso de tiempo  $\Delta t$  está dado por

$$\begin{aligned} \frac{\delta(\rho\Delta x\Delta y)}{\delta t} &= \left[ (\rho u_x) \left( x - \frac{\Delta x}{2}, y \right) - (\rho u_x) \left( x + \frac{\Delta x}{2}, y \right) \right] \Delta y \\ &+ \left[ (\rho u_y) \left( x, y - \frac{\Delta y}{2} \right) - (\rho u_y) \left( x, y + \frac{\Delta y}{2} \right) \right] \Delta x \end{aligned}$$

El lado derecho es la suma de la diferencia entre la masa que entra y la masa que sale. Dividiendo por  $\Delta x\Delta y$ , y tomando el límite continuo cuando  $\delta$  y  $t$  tienden a cero, obtenemos

$$\partial_t \rho = -\partial_x(\rho u_x) - \partial_y(\rho u_y).$$

Aplicando la definición de gradiente la ecuación la podemos escribir de la siguiente manera:

$$\partial_t \rho + \nabla(\rho u) = 0. \quad (1.1)$$

La ecuación (1.1) es la **ecuación de continuidad**.

### 1.1.2 Ecuación de Momento

Para derivar la ecuación de momento se inicia con la segunda ley de movimiento de Newton

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a} = \frac{d\vec{p}}{dt} \quad (1.2)$$

donde  $\vec{p} = m\vec{v}$ . Se considera un elemento de fluido  $\delta V = \int dV$  en un campo de fuerza externa  $\vec{F}_{ext}$ , en muchas aplicaciones esta fuerza externa es la gravedad, que es una fuerza conservativa.

El momento del elemento de fluido considerado es por  $\vec{p} = \int \rho \vec{u} dV$ . De aquí se puede escribir la segunda ley de movimiento de Newton como

$$\frac{d}{dt} \left[ \int \rho \vec{u} dV \right] = \int \vec{F}' dV \quad (1.3)$$

donde  $F'$  es la fuerza total por unidad de volumen actuando sobre el elemento de fluido considerado. En el lado izquierdo de la ecuación anterior no podemos tomar la derivada dentro de la integral ya que el  $V$  es un volumen Lagrangiano del elemento del fluido y es función del tiempo, en lugar consideramos el elemento lo suficientemente pequeño como para despreciar los cambios en el término  $\rho \vec{u}$  dentro del elemento del fluido (Van den Bosch et al, 2018 ver [5]). Lo anterior lo podemos escribir de la siguiente manera

$$\frac{d}{dt} \left[ \int \rho \vec{u} dV \right] = \frac{d\rho \vec{u} [\int dV]}{dt} = \frac{d(\vec{u} \rho \delta V)}{dt} = \rho \delta V \frac{d\vec{u}}{dt}. \quad (1.4)$$

Este resultado equivale a la expresión del lado izquierdo de la ecuación (1.3). En la ecuación se aplicó la regla de derivada de una multiplicación y se anuló el término  $\frac{d(\rho \delta V)}{dt} = 0$ , dado que la masa del elemento se conserva.

En el lado derecho de la ecuación  $\int \vec{F}' dV$ , la fuerza que actúa en el elemento del fluido consta de dos componentes: la fuerza externa al cuerpo y la fuerza interna debido a la presión del fluido. La gravedad  $\vec{F}'$  se define como:

$$\vec{F}' = \rho \nabla \phi \quad (1.5)$$

donde  $\phi$  es el potencial gravitacional de Newton. Para la contribución debido a la presión del fluido, se considera la presión isotrópica. La presión que actúa sobre un elemento infinitesimal de superficie del elemento de fluido considerado es  $-Pd\vec{S}$ , donde el menos es por la orientación de las fuerzas actuando sobre el fluido. Por lo tanto la fuerza total de presión actuando sobre el elemento de fluido en dirección  $\hat{n}$  es

$$\vec{F} \cdot \hat{n} = \int_S -P \cdot \hat{n} d\vec{S} = \int_V \nabla \cdot (P \cdot \hat{n}) dV.$$

En la ecuación anterior se aplicó el teorema de Divergencia de Gauss (ver cualquier texto referente a integrales múltiples e integral de superficie), el cual es un teorema que relaciona el flujo de un campo vectorial a través de una superficie cerrada con la divergencia del campo en el volumen delimitado por dicha superficie.

$$\vec{F} \cdot \hat{n} = -\nabla \cdot (P \cdot \hat{n}) = -P\nabla \cdot \hat{n} - \nabla P \cdot \hat{n}$$

$$\vec{F} \cdot \hat{n} = -\nabla P \cdot \hat{n}.$$

La igualdad se debe a que  $\hat{n}$  es un vector unitario con dirección constante. La fuerza interna por unidad de volumen es

$$\vec{F} = -\nabla P. \quad (1.6)$$

Igualando el resultado de la ecuación (1.4) con las ecuaciones (1.5) y (1.6), se obtiene

$$\rho \delta V \frac{d\vec{u}}{dt} = -\nabla P \delta V - \rho \nabla \phi \delta V.$$

Como esto se cumple para todos los elementos del fluido, la ecuación de momento es:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} - \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (1.7)$$

Esta ecuación es llamada la **ecuación de Euler**.

## 1.2 Autómata Celular

Los autómatas celulares son sistemas matemáticos discretos (temporal y espacial) deterministas caracterizados por la interacción local y una forma inherentemente paralela de evolución. Introducidos por primera vez por von Neumann a principios de 1950 para actuar como modelos simples de autoreproducción biológica [1]. Los autómatas celulares son modelos prototípicos para sistemas y procesos complejos que consisten en un gran número de componentes idénticos, simples e interactuantes localmente [1]. El estudio de estos sistemas ha generado gran interés a lo largo de los años debido a su capacidad para generar un rico espectro de patrones de comportamiento muy complejos. Además, parecen representar muchas características esenciales del complejo comportamiento cooperativo autoorganizante observado en sistemas reales. Aunque gran parte del trabajo teórico con autómatas celulares se ha limitado a las matemáticas y las ciencias de la computación, han habido numerosas aplicaciones a la física, la biología, la química, la bioquímica y la geología, entre otras disciplinas. Si bien hay una enorme variedad de modelos de autómatas celulares particulares cada uno cuidadosamente diseñado para adaptarse a las necesidades de un sistema específico, la mayoría de los modelos de autómatas celulares por lo general poseen estas cinco características generales:

- (a) Enmallado discreto de las células: el fundamento del sistema consiste en una red enmallada de una, dos o tres dimensiones.
- (b) Homogeneidad: todas las células son equivalentes.
- (c) Estados discretos: cada célula toma uno de un número finito de posibles estados discretos.
- (d) Interacciones locales: cada célula interactúa sólo con las celdas que están en su vecindad.
- (e) Dinámica discreta: en cada unidad discreta, cada célula actualiza su estado

actual de acuerdo con una regla de transición teniendo en cuenta el estado de las células en su vecindad.

### 1.2.1 Autómata Celular Unidimensional

Para una autómata celular unidimensional, el valor de la celda  $i$  en el momento  $t$  denotado por  $c_i(t)$  evoluciona en el tiempo de acuerdo con una regla  $F$  que es una función de  $c_i(t)$  y otras celdas que están dentro de un rango  $r$  (a la izquierda y a la derecha) de  $c_i(t)$ .

$$c_i(t) = F(c_{i-r}(t-1), c_{i-r+1}(t-1), \dots, c_{i+r-1}(t-1), c_{i+r}(t-1)). \quad (1.8)$$

Dado que cada celda toma uno de los  $k$  valores posibles que es  $c_i(t) \in 0, 1, 2, \dots, k$ . La regla  $F$  se define completamente especificando el valor asignado a cada una de las  $k^{2r+1}$  configuraciones posibles  $(2r+1)$ -uplas para una vecindad de rango  $r$ .

$$\begin{array}{ccccccc} c_{i-r}(t-1) & \cdots & c_i(t-1) & \cdots & c_{i+r}(t-1) & \cdots & c_i(t) \\ 0 & & 0 & & 0 & & F(0, 0, \dots, 0) \\ 0 & & 0 & & 1 & & F(0, 0, \dots, 1) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & F(0, 0, \dots, 0) \\ k & & k & \cdots & & & F(k, k, \dots, k) \end{array}$$

Puesto que  $F$  asigna cualquiera de los  $k$  valores a cada una de las  $(2r+1)$ -uplas, hay un total de  $k^{2r+1}$  posibles estados. Por ejemplo sea  $k = 2$ , es decir  $c_i(t) \in \{0, 1\}$  y rango  $r = 1$  y la regla  $c_i(t) : \{0, 1\}^3 \rightarrow 0, 1$  definida por:

$$F(c_{i-r}(t), c_i(t), c_{i+r}(t)) = c_{i-r}(t) \oplus_2 c_{i+r}(t), \quad (1.9)$$

donde  $\oplus_2$  es la suma módulo 2. La forma explícita de la dinámica es dada por el listado, para cada uno de los ocho posibles estados locales en los que pueden estar tres celdas adyacentes en el momento  $t$ , el estado correspondiente en el momento  $t+1$  que es asignado por  $F$  a la celda central de estas 3 uplas

$$\begin{array}{cccccccc} 111 & 110 & 101 & 100 & 011 & 010 & 001 & 000 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array}$$

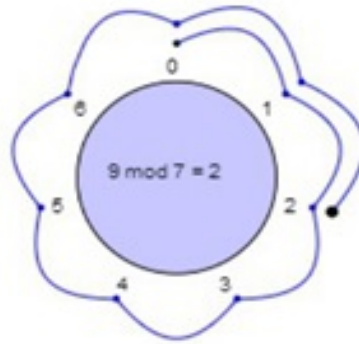


Figura 1.2: Ejemplo de suma  $12 \bmod (7)$

Se entenderá como suma modular de ahora en adelante lo siguiente: en la figura 1.2.1 se ejemplificó con una suma:  $12 \bmod (7)$  es 5, es decir el contador se va a incrementar hasta el módulo en este caso 7 y luego se reiniciará en 0.

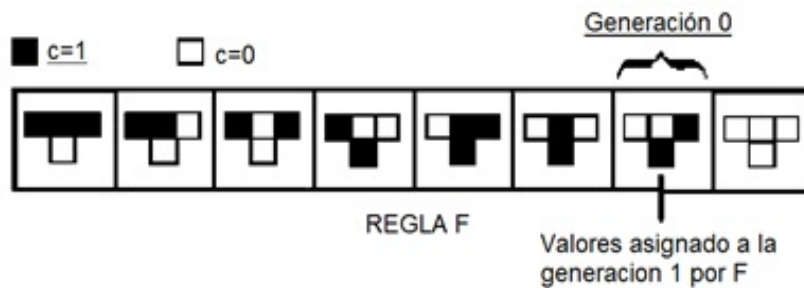


Figura 1.3: Evolución espacio-temporal. Fuente: Ilachinski A. *Cellular Automata. A discrete universe*. World Scientific Publishing. USA, 2001.

Por lo tanto su evolución en el espacio-tiempo se puede ver en la figura anterior.

### 1.3 Autómata *Lattice Gas*

El Autómata *Lattice Gas*, (LGA por sus siglas en inglés), es un Autómata Celular precursor del método de Lattice Boltzmann (LBM), que tiene como objetivo simular flujos de fluidos con modelos de fluidos simples. En LGA, el fluido se trata como un conjunto de partículas simuladas que residen en un *Lattice* o rejilla regular con

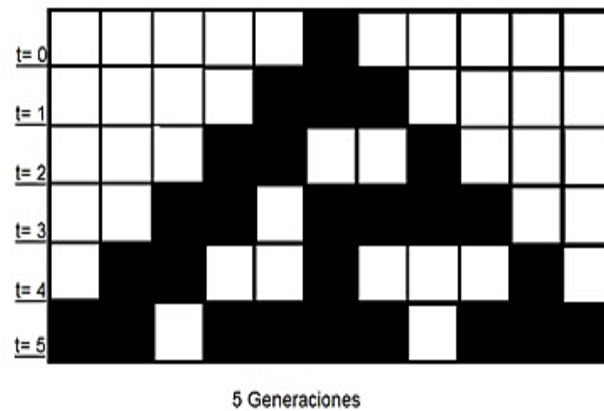


Figura 1.4: Evolución espacio-temporal. Fuente: Ilachinski A. Cellular Automata. A discrete universe. World Scientific Publishing. USA, 2001

ciertas propiedades de simetría, donde chocan y se propagan siguiendo algunas reglas prescritas que satisfacen algunas leyes físicas necesarias. La filosofía detrás de LGA es que el comportamiento de un fluido en la macroescala no es más que el resultado colectivo estadístico de la microdinámica de las moléculas de fluidos, y son insensibles a la información detallada de las moléculas individuales [3]. En otras palabras, fluidos con diferentes microestructuras e interacciones pueden tener los mismos fenómenos macroscópicos. Por lo tanto, es posible simular flujos macroscópicos con un modelo de microfluido ficticio que tiene microdinámica simple pero satisface algunas leyes físicas necesarias. LGA es sólo uno de estos modelos de fluidos, y el requisito clave de un modelo LGA es que la masa, el impulso y la energía deben conservarse durante los procesos de colisión y transmisión de partículas.

El primer modelo fue propuesto por Hardy, de Pazzis y Pomeau en 1973. Llamado el método HPP en honor a sus creadores [6]. Este modelo utiliza una rejilla cuadrada bidimensional en la que las partículas de gas en un nodo pueden moverse a cualquiera de los cuatro nodos vecinos más cercanos a lo largo de las líneas de la rejilla. La colisión del modelo HPP sigue la llamada regla de cabecera, a saber, cuando dos partículas se mueven a un mismo nodo con velocidades opuestas, las

velocidades girarán alrededor de  $90^\circ$  después de la colisión. En cualquier otro caso, no se produce ninguna colisión y las velocidades de las partículas permanecen inalteradas. Matemáticamente, el movimiento de las partículas en el modelo HPP puede ser descrito por la siguiente ecuación cinética discreta

$$n_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = n_i(x, t) + C_i(n(x, t)) \quad (1.10)$$

donde  $n_i(x, t) = 0$  ó  $1$  representa el número de partículas moviéndose con velocidad  $c_i$  en el nodo  $x$  y a un tiempo  $t$ ,  $\Delta t$  es un intervalo de tiempo,  $C_i$  es el operador de colisión.

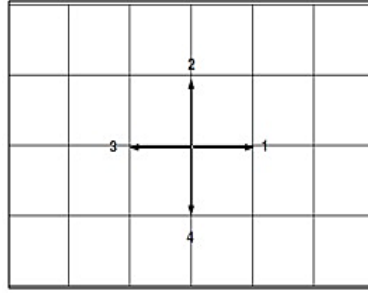


Figura 1.5: Rejilla y velocidad discreta del modelo HPP Fuente: G. Zhaoli, S. Chang. Lattice Boltzmann Method and its Application in Engineering. World Scientific Publishing. USA, 2008.

El conjunto de velocidad discreta del modelo HPP es dada por  $c_i = ce_i$  con  $e_1 = (1, 0)$ ,  $e_2 = (-1, 0)$ ,  $e_3 = (-1, 0)$  y  $e_4 = (0, -1)$ , y  $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$  es la velocidad del retículo y  $\Delta x$  la distancia del retículo. El operador de colisión descrito por la regla de colisión cabeza a cabeza puede ser expresada como:

$$C_i = n_{i \oplus 1} n_{i \oplus 3} (1 - n_i) (1 - n_{i \oplus 2}) - (1 - n_{i \oplus 1}) (1 - n_{i \oplus 3}) n_i n_{i \oplus 2} \quad (1.11)$$

donde  $\oplus$  es la adición módulo 4. Se puede verificar que  $C_i$  conserva la masa, momento y energía:

$$\sum_i C_i = 0, \quad \sum_i c_i C_i = 0, \quad \sum_i \frac{c_i^2}{2} C_i = 0 \quad (1.12)$$



La evolución de las partículas ficticias se descompone en dos subprocesos:

$$\text{Colisión: } n'_i(x, t) = n_i(x, t) + C_i(n(x, t)) \quad (1.13)$$

$$\text{Propagación: } n'_i(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) = n'_i(x, t) \quad (1.14)$$

Las variables de flujo como la densidad, la velocidad y la temperatura se pueden obtener de la media del conjunto (función de distribución) del número Booleano  $f_i = \langle n_i \rangle$ ,

$$\rho = \sum_i m f_i, \quad \rho u = \sum_i m C_i f_i, \quad \rho e = \rho R T = \sum_i \frac{m}{2} (c_i - u_i)^2 f_i \quad (1.15)$$

donde  $m$  es la masa molecular del gas, y se supone que es 1 sin pérdida de generalidad. No es sencillo calcular el promedio de conjunto de  $n_i$ . Aunque la microdinámica del modelo HPP satisface la ley de conservación de la masa, las variables hidrodinámicas no satisfacen la ecuación de continuidad debido a la insuficiente simetría del enmallado. En realidad, el modelo HPP fue diseñado como un modelo de microfluido en lugar de un método computacional para los flujos hidrodinámicos. Aunque, la idea básica detrás del modelo HPP abre una nueva forma de cómputos.

El requisito de simetría en el enmallado se descubrió por primera vez en 1986 cuando Frisch, Hasslacher y Pomeau [7] propusieron su LGA hexagonal. Este modelo usa un enmallado triangular y cada nodo tiene seis vecinos cercanos. Las velocidades discretas pueden ser expresadas como  $C_i = c(\cos\theta_i, \sin\theta_i)$  con  $\theta = (i - 1)\pi/3$  para  $i = \{1, \dots, 6\}$ . Al igual que en el modelo HPP, el estado del modelo FHP pueden ser descritos por seis números booleanos  $n_i$  que representan el número de partículas moviéndose con velocidad  $c_i$ . Las reglas de colisión incluyen cinco casos diferentes.

#### 1.4 Función de distribución y sus momentos

Una variable fundamental en la teoría cinética es la función de distribución de una partícula  $f(x, \xi, t)$ , esta puede verse como una generalización de la densidad que

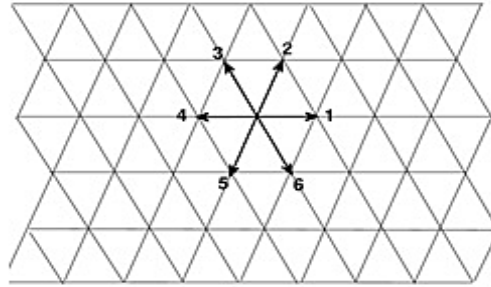


Figura 1.6: Rejilla y velocidad discreta del modelo FHP Fuente: G. Zhaoli, S. Chang. Lattice Boltzmann Method and its Application in Engineering . World Scientific Publishing, USA, 2008.

también toma en cuenta la velocidad de la partícula [8]. Mientras  $\rho(x, t)$  representa la densidad de masa en el espacio físico,  $f(x, \xi, t)$  representa simultáneamente la densidad de masa en el espacio físico tridimensional y en el espacio de velocidades tridimensional [8].

Las cantidades que caracterizan un estado macroscópico son definidos en términos de la función de distribución  $f(x, \xi, t)$ . De hecho, sobre la base de las cantidades microscópicas de las moléculas de gas como masa, momento y energía, se define la densidad de masa  $\rho$ , densidad de momento  $m\xi_i$  y densidad de energía total  $m\xi^2/2$  a través de las relaciones:

- Densidad de masa

$$\rho(x, t) = \int m f(x, \xi, t) d\xi$$

- Densidad de momento

$$\rho v_i(x, t) = \int m \xi_i f(x, \xi, t) d\xi$$

- Densidad de energía

$$\rho u(x, t) = \frac{1}{2} \int m \xi^2 f(x, \xi, t) d\xi$$

## 1.5 Función de distribución de equilibrio

Las direcciones de salida de dos esferas que colisionan son sensibles a sus posiciones iniciales relativas, por lo tanto un sistema que fue perturbado se deja sin perturbación en un largo período de tiempo y este tiende a alcanzar un estado determinado. La función de distribución de equilibrio fue deducida por Maxwell.

$$f^{\text{eq}} = \rho(2\pi\theta)^{-3/2} e^{\left[-\frac{(\xi-u)^2}{2\theta}\right]} \quad (1.16)$$

donde  $\theta = RT$ . La deducción que realizó Maxwell de esta ecuación está en [9].

## 1.6 La ecuación de Boltzmann y el operador de colisión

Ya se conoce la función de distribución  $f(x, \xi, t)$ , en la sección 1.4 se detalló que representa, pero ¿cómo se puede construir una ecuación que represente su evolución en el tiempo? Aquí se responde esta interrogante.

Para mayor claridad en la notación, se dejará de escribir la dependencia de  $f$  con respecto a la terna  $(x, \xi, t)$ . Por otro lado, como  $f$  es una función de posición  $x$ , velocidad de partícula  $\xi$  y tiempo  $t$ , su derivada total con respecto a  $t$  viene dada por

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \frac{dt}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta}\right) \frac{dx_\beta}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta}\right) \frac{d\xi_\beta}{dt}. \quad (1.17)$$

Para sistemas que no presentan colisiones. Observe que:  $\frac{dt}{dt} = 1$ ,  $\frac{dx_\beta}{dt} = \xi_\beta$ , y por la segunda ley de Newton la fuerza específica del cuerpo es  $\frac{d\xi_\beta}{dt} = \frac{F_\beta}{\rho}$ . Sustituyendo estos valores en la ecuación (1.17) se obtiene la Ecuación de Boltzmann,

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta}\right) \xi_\beta + \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta}\right) \frac{F_\beta}{\rho}. \quad (1.18)$$

En la ecuación de Boltzmann original el término de derivada total se conoce como integral de colisión y es de la forma de un doble integral sobre el espacio de velocidad. Considera todos los posibles resultados de colisiones de dos partículas para cualquier elección de fuerzas intermoleculares. Sin embargo, los operadores de

colisión utilizados en la LBM se basan generalmente en el operador de colisión BGK mucho más simple

$$I[f] = -\frac{1}{\tau}(f - f^{\text{eq}})$$

donde  $I$  es el factor de colisión,  $f$  es la función de distribución y  $f^{\text{eq}}$  es la función de distribución de equilibrio.

Este operador, llamado así por sus inventores Bhatnagar, Gross y Krook [10], directamente captura la relajación de la función de distribución hacia la distribución de equilibrio. La constante de tiempo, que determina la velocidad de este equilibrio, se conoce como el tiempo de relajación. El valor se determina directamente de los coeficientes de transporte como la viscosidad y la difusividad del calor. La ecuación de Boltzmann BGK queda expresada de la siguiente manera

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta}\right)\xi_\beta + \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta}\right)\frac{F_\beta}{\rho} = -\frac{1}{\tau}(f - f^{\text{eq}}) \quad (1.19)$$

## 1.7 De Boltzmann a Navier-Stokes

En la sección anterior se obtuvo la ecuación de Boltzmann. El factor de colisión se anula con las invariantes de colisión, que son cantidades que se mantienen invariables después de la colisión como la masa, el momento y la energía. Se puede utilizar la ecuación de Boltzmann para describir la evolución del tiempo de estas cantidades considerando ecuaciones de momento de la ecuación de Boltzmann. En nuestro caso, considere la función escalar  $Q(\vec{v})$ . El valor esperado para  $Q$  en la ubicación  $\vec{x}$  en el momento  $t$  se da por

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle(\vec{x}, t) = \frac{\int Q(\vec{v})f(\vec{x}, \vec{v}, t)d^3\vec{v}}{\int f(\vec{x}, \vec{v}, t)d^3\vec{v}}. \quad (1.20)$$

Se tiene que  $n = n(x, t) = \int f(x, v, t)d^3v$ , de aquí se deduce

$$n\langle Q \rangle = \int Q(\vec{v})f(\vec{x}, \vec{v}, t)d^3\vec{v}.$$

Se pueden obtener ecuaciones dinámicas para el flujo macroscópico de cantidades multiplicando la ecuación de Boltzmann con las funciones apropiadas, e integrando en todo el espacio de velocidad.

Por lo tanto, las soluciones son de la forma

$$\begin{aligned}\int \frac{\partial f}{\partial t} Q(\xi) d^3 \xi + \frac{\partial f}{\partial t} \xi Q(\xi) d^3 v - \frac{\partial f}{\partial t} \frac{F}{m} Q(\xi) d^3 \xi &= \int I[f] d^3 \xi \\ \int \frac{\partial f}{\partial t} Q(\xi) d^3 \xi + \frac{\partial f}{\partial t} \xi Q(\xi) d^3 v - \frac{\partial f}{\partial t} \frac{F}{m} Q(\xi) d^3 \xi &= 0\end{aligned}$$

El problema se reduce a la solución de tres integrales:

Integral I:

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} Q(\xi) d^3 \xi = \int \frac{\partial Q f}{\partial t} d^3 \vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} \int Q f d^3 \vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} n \langle Q \rangle$$

Integral II:

$$\int \frac{\partial f}{\partial x_i} \xi_i Q(\xi) d^3 v = \int \frac{\partial Q \xi_i f}{\partial x_i} d^3 \vec{v} = \frac{\partial}{\partial x_i} \int Q \xi_i f d^3 \vec{v} = \frac{\partial}{\partial x_i} n \langle Q \xi_i \rangle$$

Integral III:

$$\begin{aligned}\int \vec{F} Q \nabla_v f \xi d^3 \vec{\xi} &= \int \nabla_\xi \cdot (Q f F) d^3 \vec{\xi} - \int f \nabla_v (Q \vec{F}) d^3 \vec{\xi} \\ &= \int Q f F d^2 S_v - \int f \frac{\partial Q F_i}{\partial \xi_i} d^3 \vec{\xi} \\ &= - \int f Q \frac{\partial F}{\partial \xi} d^3 \vec{\xi} - \int f F_i \frac{\partial Q}{\partial \xi_i} d^3 \xi_i \\ &= - \int f \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial Q}{\partial \xi_i} d^3 \xi = - \frac{\partial \phi}{\partial x_i} n \left\langle \frac{\partial Q}{\partial \xi_i} \right\rangle.\end{aligned}$$

Combinando los tres resultados

$$\frac{\partial}{\partial t} n \langle Q \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} n \langle Q \xi_i \rangle + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} n \left\langle \frac{\partial Q}{\partial \xi_i} \right\rangle = 0.$$

Sustituimos en lugar de  $Q$  las variantes de colisión. Para  $Q = m$

$$\frac{\partial}{\partial t} n \langle m \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} n \langle m \xi_i \rangle + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} n \left\langle \frac{\partial m}{\partial \xi_i} \right\rangle = 0 \quad (1.21)$$

Tomando en cuenta que  $\langle m \rangle = m, \langle m \xi_i \rangle = m \langle \xi_i \rangle = m u_i$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (1.22)$$

Que es la ecuación de continuidad como la deducida anteriormente, ecuación 1.1

Para  $Q = m\xi_i$

$$\frac{\partial}{\partial t}n\langle m\xi_i \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i}n\langle m\xi_i\xi_i \rangle - \frac{\partial\phi}{\partial x_i}n\left\langle \frac{\partial m\xi_i}{\partial \xi_i} \right\rangle = 0 \quad (1.23)$$

$$\frac{\partial(\rho\xi_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho\langle \xi_i\xi_i \rangle - \frac{\partial\phi}{\partial x_i}n\left\langle \frac{\partial m\xi_i}{\partial \xi_i} \right\rangle = 0. \quad (1.24)$$

Para simplificar este resultado se tienen los siguientes resultados,  $\rho = \langle nm \rangle$  y  $\frac{\partial \xi_i}{\partial \xi_i} = 1$

$$\frac{\partial\phi}{\partial x_i}n\left\langle \frac{\partial m\xi_i}{\partial \xi_i} \right\rangle = \frac{\partial\phi}{\partial x_i}\rho\left\langle \frac{\partial \xi_i}{\partial \xi_i} \right\rangle = \rho\frac{\partial\phi}{\partial x_i}.$$

Aplicando la regla del producto y sustituyendo la ecuación de continuidad  $\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i}$

$$\frac{\partial(\rho\xi_j)}{\partial t} = \rho\frac{\partial\xi_j}{\partial t} + \xi_j\frac{\partial\rho}{\partial t} = \rho\frac{\partial\xi_j}{\partial t} - \xi_j\frac{\partial(\rho u_k)}{\partial x_k}.$$

Sustituyendo en la ecuación 1.24

$$\rho\frac{\partial u_j}{\partial t} - u_j\frac{\partial\rho u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial\rho\xi_i\xi_j}{\partial x_i} - \rho\frac{\partial\phi}{\partial x_j} = \rho\frac{\partial u_j}{\partial t} - \left[ \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} - \rho u_i\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial\rho\langle \xi_i\xi_i \rangle}{\partial x_i} + \rho\frac{\partial\phi}{\partial x_j} = 0.$$

$$\rho\frac{\partial u_j}{\partial t} + \rho u_i\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial[\rho u_i u_j - \rho\langle \xi_i\xi_i \rangle]}{\partial x_i} + \rho\frac{\partial\phi}{\partial x_j} = 0. \quad (1.25)$$

la ecuación 1.25 es la ecuación de **Navier-Stokes**.

## 1.8 Ecuación de *Lattice Boltzmann*

La ecuación de Lattice Boltzmann nace de la necesidad de discretización de la ecuación de Boltzmann.

### 1.8.1 Discretización de la Ecuación de Boltzmann

Esta deducción es de Li Shi Lou [11]. La ecuación de Boltzmann BGK se puede reescribir de la siguiente manera de forma de ecuación diferencial ordinaria (EDO):

$$D_t f + \frac{1}{\lambda}f = \frac{1}{\lambda}f^{(0)} \quad D_t = \partial_t + \xi \cdot \nabla \quad (1.26)$$

Integrando sobre un intervalo de tiempo  $\Delta t$ :

$$f(x + \xi \Delta t, \xi, t + \Delta t) = e^{-\frac{\Delta t}{\lambda}} f(x, \xi, t) + \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{\Delta t}{\lambda}} \int_0^{\Delta t} e^{\frac{t'}{\lambda}} f^{(0)}(x + \xi t', \xi, t + t').$$

Por aproximación lineal,

$$f^{(0)}(x + \xi t', \xi, t + t') = \left(1 - \frac{t'}{\Delta t}\right) f^{(0)}(t) + \frac{t'}{\Delta t} f^{(0)}(t + \Delta t) + O(\delta_t^2).$$

Con la expansión de Taylor en  $\Delta t$  y  $\tau = \frac{\lambda}{\Delta t}$ ,

$$f(x + \xi \Delta t, \xi, t + \Delta t) - f(x, \xi, t) = -\frac{1}{\tau} [f(x, \xi, t) - f^{(0)}(x, \xi, t)] + O(\delta_t^2) \quad (1.27)$$

Esta es una ecuación importante en el método ya que representa la evolución de la función de distribución de partícula.

### 1.8.2 Discretización de la Ecuación de Equilibrio de Maxwell Boltzmann

La siguiente deducción se encuentra en [11].

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \rho \left[ 1 + \frac{(c_i \cdot u)}{c^2} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{u^2}{2c^2} \right] \quad (1.28)$$

### 1.8.3 Lattice Boltzmann-BGK a Navier-Stokes.

Para validar que de la discretización en el espacio y en el tiempo de la ecuación de Boltzmann se deduce las ecuaciones de movimiento se realiza el siguiente análisis. Se presenta un método de análisis multiescala basado en la expansión de Chapman-Enskog (ChE) para evaluar la consistencia de los modelos cinéticos con las ecuaciones de NS. Se introduce un parámetro  $\epsilon$ . Se define como la relación entre una escala macroscópica y una microscópica.  $\epsilon \ll 1$  es el límite de interés donde se considera válida la descripción hidrodinámica del movimiento colectivo de partículas microscópicas. Se introducen soluciones de la forma:

$$f_i = f_i^{\text{eq}} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \dots \quad (1.29)$$

El operador de colisión BGK conserva la masa y el momento. Esta conservación puede ser expresada como:

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} = 0, \quad \sum_i c_i f_i^{\text{eq}} = 0. \quad (1.30)$$

Se escriben estas ecuaciones en función de la expansión

$$\sum_i f_i^{(n)} = 0, \quad \sum_i c_i f_i^{(n)} = 0. \quad (1.31)$$

Ahora se expande la ecuación discretizada (Ec. 1.30) en serie de Taylor

$$f(x + \xi \Delta t, \xi, t + \Delta t) - f(x, \xi, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f(x, \xi, t) - f^{(0)}(x, \xi, t)] \quad (1.32)$$

Se desarrolla en serie de Taylor al primer término de la izquierda:

$$(\partial_t f_i \Delta t + \partial_\alpha f_i \xi_{i\alpha} \Delta t) + (\partial_t^2 f_i \frac{\Delta t^2}{2} + \partial_t \partial_\alpha f_i \Delta t \xi_{i\alpha} \Delta t + \partial_\alpha^2 f_i \xi_{i\alpha}^2 \frac{\Delta t^2}{2}) + o(\Delta t^3) = -\frac{\Delta t}{\tau} f_i^{\text{neq}}.$$

Se reducen los términos derivados de segundo orden. Restando  $\frac{\Delta t}{2}(\partial_t + \partial_\alpha \xi_{i\alpha})$  y aplicándolo sobre la misma ecuación:

$$\Delta t (\partial_t + \partial_\alpha \xi_{i\alpha}) f_i = -\frac{\Delta t}{\tau} f_i^{\text{neq}} + \Delta t (\partial_t + \partial_\alpha \xi_{i\alpha}) \frac{\Delta t}{2\tau} f_i^{\text{neq}} \quad (1.33)$$

Se expande  $f_i$  en la ecuación anterior

$$\begin{aligned} \Delta t \partial_t f_i &= \Delta t \left( \in \partial_t^{(1)} f_i + \in^2 \partial_t^{(2)} f_i + \dots \right) \\ \Delta t \xi_{i\alpha} \partial_t f_i &= \Delta t \left( \in \xi_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} f_i \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} O(\in) : \quad \left( \partial_t^{(1)} + \xi_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} \right) f_i^{\text{neq}} &= \frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \\ (\in^2) : \quad \partial_t^{(2)} f_i^{\text{neq}} + \left( \partial_t^{(1)} + \xi_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} \right) \left( 1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) f_i^{\text{neq}} &= \frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \end{aligned}$$

Tomando los segundos momentos de la ecuación 1.33 (es decir, multiplicando por 1,  $\xi_{i\alpha}$  y  $\xi_{i\alpha} \xi_{i\beta}$ , respectivamente, y luego sumando sobre todos los  $i$ ), podemos encontrar



las ecuaciones de momento:

$$\left( \partial_t^{(1)} f_i^{\text{neq}} + \xi_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} f_i^{\text{neq}} \right) = \frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \quad (1.34)$$

$$\left( \partial_t^{(1)} f_i^{\text{neq}} \xi_{i\alpha} + \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} f_i^{\text{neq}} \right) = \xi_{i\alpha} \frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \quad (1.35)$$

$$\left( \partial_t^{(1)} f_i^{\text{neq}} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} + \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \partial_\alpha^{(1)} f_i^{\text{neq}} \right) = \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \quad (1.36)$$

Tomando sumatoria sobre  $i$  en la ecuación 1.34

$$\begin{aligned} \sum_i \partial_t^{(1)} f_i^{\text{neq}} + \sum_i \xi_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} f_i^{\text{neq}} &= \sum_i \frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \\ \partial_t^{(1)} \sum_i f_i^{\text{neq}} + \partial_\alpha^{(1)} \sum_i \xi_{i\alpha} f_i^{\text{neq}} &= \frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(1)} \\ \partial_t^{(1)}(\rho) + \partial_\alpha^{(1)}(\rho u_\alpha) &= 0. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Tomando sumatoria sobre  $i$  de la ecuación 1.35

$$\begin{aligned} \sum_i \partial_t^{(1)} f_i^{\text{neq}} \xi_{i\alpha} + \sum_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} f_i^{\text{neq}} &= \sum_i \xi_{i\alpha} \frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \\ \partial_t^{(1)} \sum_i f_i^{\text{neq}} \xi_{i\alpha} + \partial_\alpha^{(1)} \sum_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} f_i^{\text{neq}} &= \frac{1}{\tau} \sum_i \xi_{i\alpha} f_i^{(1)} \\ \partial_t^{(1)}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{\text{eq}} &= 0 \end{aligned} \quad (1.38)$$

Tomando sumatoria sobre  $i$  de la ecuación 1.36

$$\begin{aligned} \sum_i \partial_t^{(1)} f_i^{\text{neq}} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} + \sum_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \partial_\alpha^{(1)} f_i^{\text{neq}} &= \sum_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \\ \partial_t^{(1)} \sum_i f_i^{\text{neq}} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} + \partial_\alpha^{(1)} \sum_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} f_i^{\text{neq}} &= \frac{1}{\tau} \sum_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} f_i^{(1)} \\ \partial_t^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{\text{eq}} + \partial_\gamma^{(1)} \Pi_{\alpha\beta\gamma}^{\text{eq}} &= -\frac{\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}}{\tau} \end{aligned} \quad (1.39)$$

En el mismo orden de ideas se obtiene de las otras ecuaciones:

$$\begin{aligned} \partial_t^{(2)} \rho &= 0 \\ \partial_t^{(2)}(\rho u_\alpha) + \partial_\beta^{(1)} \left( 1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} &= 0 \end{aligned}$$

Se ensamblan la masa y el momento de las ecuaciones anteriores  $O(\epsilon)$  y  $O(\epsilon^2)$

$$\begin{aligned} \left( \epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} \right) \rho + \epsilon \partial_\alpha^{(1)} (\rho u_\alpha) &= 0 \\ \left( \epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} \right) (\rho u_\alpha) + \epsilon \partial_\beta^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{\text{eq}} &= - \epsilon \partial_\beta^{(1)} \left( 1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0 \end{aligned}$$

Estas ecuaciones se convierten en la ecuación de continuidad y la ecuación de conservación de impulso,

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) &= 0 \\ \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (u_\alpha u_\beta) &= \partial_\alpha p + \partial_\beta [\eta (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)] \end{aligned}$$

con  $p = \rho c^2$ ,  $\eta = \rho \xi^2 \left( \tau - \frac{\Delta t}{2} \right)$ .

## CAPÍTULO 2

### MÉTODO DE *LATTICE* BOLTZMANN

Todos los modelos LGCA (Capítulo 1) sufren defectos inherentes, en particular la falta de invariancia galileana para flujos rápidos y ruido estadístico [12]. En McNamara y Zanetti [13], se prescindió de las partículas individuales del autómata *Lattice Gas* y los reemplazó por una función de distribución media pero direccionalmente discreta. Esto eliminó por completo el ruido estadístico. La matriz de colisión de Higuera [14] es reemplazada por un solo tiempo de relajación, que conduce al modelo de Bhatnagar, Gross y Krook (BGK) [10].

En el método *Lattice* BGK, se introduce una función de distribución discreta para representar el fluido. Esta función de distribución satisface la siguiente ecuación de *Lattice Boltzmann*, que fue deducida en secciones anteriores, la ecuación 1.32.

$$f(x + \xi\Delta t, \xi, t + \Delta t) - f(x, \xi, t) = -\frac{1}{\tau}[f(x, \xi, t) - f^{(0)}(x, \xi, t)]$$

donde  $f(x, \xi, t)$  es la función de distribución de densidad relacionada con la velocidad discreta con dirección  $i$  y  $\tau$  es el tiempo de relajación, que está relacionado con la viscosidad cinemática por

$$\nu = c_s^2(\tau - 0.5)\Delta t$$

donde  $c_s$  es la velocidad del sonido. La función de distribución de equilibrio, ecuación 1.28

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \rho \left[ 1 + \frac{(c_i \cdot u)}{c^2} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{u^2}{2c^2} \right]$$

Donde  $c_i$  son las velocidades discretas y  $\omega_i$  son los pesos.  $\rho$  es la densidad macroscópica y  $u$  es el vector de velocidad macroscópica.

Los modelos de velocidades discretos son usualmente especificados como  $DnQm$  donde  $n$  es la dimensión espacial y  $m$  es el número de velocidades. En la tabla siguiente se presentan los diferentes modelos de velocidades.

MODELO	$\omega_i$	$c^2$
D2Q7	$\frac{1}{2} (i = 0), \frac{1}{12} (i = 1, \dots, 6)$	$\frac{c^2}{4}$
D2Q9	$\frac{4}{9} (i = 0), \frac{1}{9} (i = 1, 2, 3, 4), \frac{1}{9} (i = 5, 6, 7, 8)$	$\frac{c^2}{3}$
D3Q15	$\frac{2}{9} (i = 0), \frac{1}{9} (i = 1, \dots, 6), \frac{1}{72} (i = 7, \dots, 14)$	$\frac{c^2}{3}$
D3Q19	$\frac{1}{3} (i = 0), \frac{1}{18} (i = 1, \dots, 6), \frac{1}{36} (i = 7, \dots, 18)$	$\frac{c^2}{3}$

Tabla 2.1: Pesos y velocidad del sonido

Para este trabajo utilizaremos el modelo D2Q9.

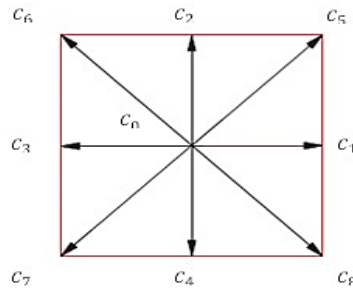


Figura 2.1: Modelo de Velocidad Discreta (D2Q9)

Las velocidades discretas  $c_i$ , dependen del modelo de velocidad particular y en el caso del modelo D2Q9 (modelo bidimensional de nueve velocidades), los  $c_i$  se obtienen mediante la siguiente fórmula:

$$c_i = \begin{cases} 0 & i = 0 \\ \left( \cos \left[ \frac{(i-1)\pi}{2} \right], \text{sen} \left[ \frac{(i-1)\pi}{2} \right] \right) & i \in \{1, \dots, 4\} \\ \sqrt{2} \left( \cos \left[ \frac{(i-5)\pi}{2} \right], \text{sen} \left[ \frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right] \right) & i \in \{5, \dots, 8\} \end{cases}$$

de allí se obtiene que:  $c_0 = (0, 0)$ ,  $c_1 = (1, 0)$ ,  $c_2 = (0, 1)$ ,  $c_3 = (-1, 0)$ ,  $c_4 = (0, -1)$ ,  $c_5 = (1, 1)$ ,  $c_6 = (-1, 1)$ ,  $c_7 = (-1, -1)$ ,  $c_8 = (1, -1)$ .

La densidad del fluido  $\rho$  puede ser obtenida,

$$\rho = \sum_i f_i \quad (2.1)$$

que es la simple suma de las funciones de distribución de las velocidades. La velocidad macroscópica del fluido es dada por

$$u = \frac{1}{\rho} \sum_i c_i f_i. \quad (2.2)$$

En términos de componentes

$$u_\alpha = \frac{1}{\rho} \sum_i c_{i\alpha} f_i$$

## 2.1 El paso del tiempo: Colisión y Propagación

El término de propagación en el método es la ecuación 1.32

$$f(x + \xi\Delta t, \xi, t + \Delta t) - f(x, \xi, t) = -\frac{1}{\tau} [f(x, \xi, t) - f^{(0)}(x, \xi, t)].$$

Podemos descomponer esta ecuación en dos partes distintas

### (a) Colisión o relajación

$$f_i^*(x, t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{(0)}(x, t)]$$

donde  $f_i^*(x, t)$  representa la función de distribución después de la colisión y  $f_i^{(0)}(x, t)$  se calcula a partir de ecuación 1.32 con los pesos y velocidades según el modelo de velocidad adecuado para cada caso.

### (a) Propagación

La segunda parte es la propagación

$$f_i(x + \xi\Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(x, t)$$

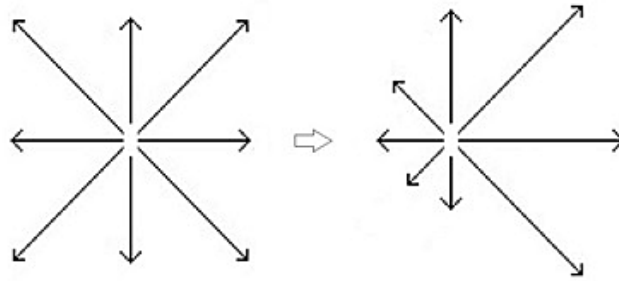


Figura 2.2: Modelo de Colisión

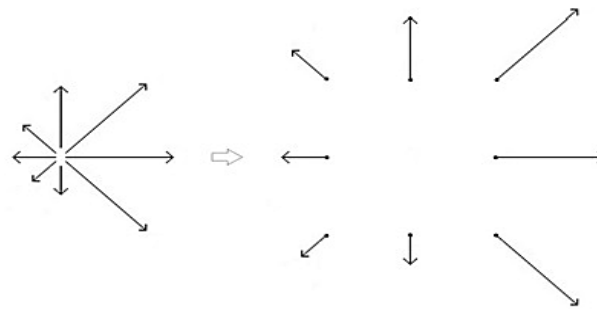


Figura 2.3: Modelo de Propagación

## 2.2 Implementación del método

### 2.2.1 Inicio

El enfoque más simple para inicializar las poblaciones al inicio de una simulación es  $f_i^{\text{eq}}(x, t = 0) = f_i^{\text{eq}}(\rho(x, t = 0), u(x, t = 0))$ . A menudo los valores  $\rho(x, t = 0) = 1$ ,  $u(x, t = 0) = 0$ .

### 2.2.2 Algoritmo del Paso del Tiempo

En general, el algoritmo central LBM consiste en una secuencia cíclica de subpasos, con cada ciclo correspondiente a un paso de tiempo

1. Calcule los momentos macroscópicos  $\rho(x, t)$  y  $u(x, t)$  de  $f_i(x, t)$  mediante las ecuaciones 2.1 y 2.2.

2. Obtenga la función de distribución de equilibrio de la ecuación 1.28.
3. Realizar colisión (relajación) como se muestra en la figura 2.1.
4. Realizar propagación como en la figura 2.1.
5. Aumente el paso del tiempo y vuelva al paso 1.

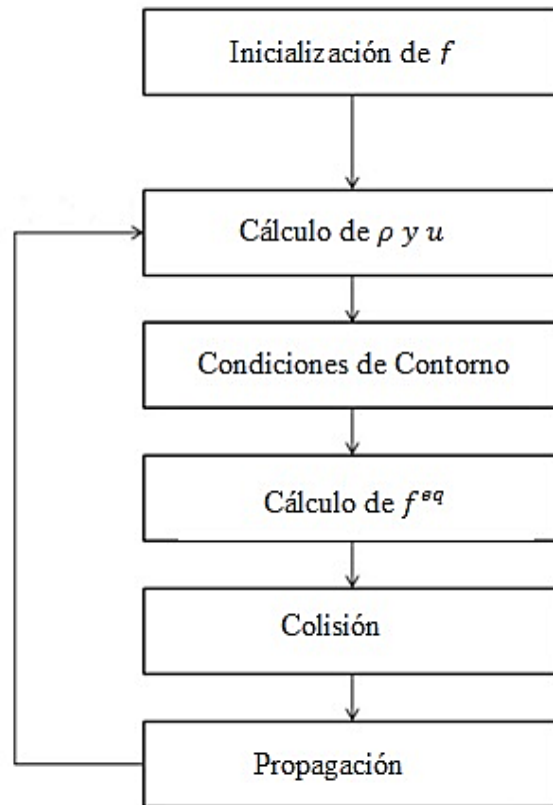


Figura 2.4: Algoritmo del método LB. Fuente: El autor

### 2.2.3 Condiciones de frontera de rebote

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 2.5, muestra lo que sucede al aplicar este tipo de condiciones de frontera

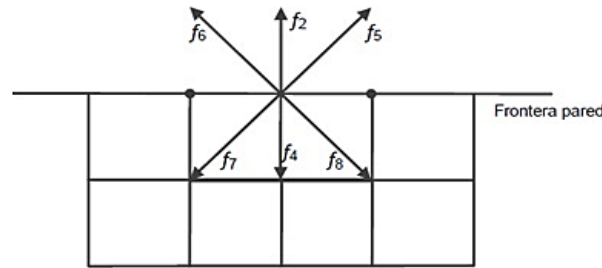


Figura 2.5: Frontera no deslizante

Se puede observar que las funciones  $f_2, f_5$  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  $f_8 = f_6$ .

#### 2.2.4 Relación entre unidades *Lattice* y unidades físicas.

La viscosidad dinámica es la relación entre la viscosidad cinemática y la densidad:

$$\eta = \frac{\nu}{\rho}.$$

El término de relajación  $\tau$  se relaciona con la velocidad cinemática del fluido mediante la siguiente formula:

$$\nu_\sigma = c_s^2(\tau_\sigma - 0.5\Delta t).$$

Se conoce como relación de viscosidad dinámica entre dos fluidos al cociente entre las viscosidades dinámicas de los fluidos  $\eta_m$  y  $\eta_n$ , para este caso utilizamos los subíndices  $m$  y  $n$  por conveniencia para denotar fase mojanter y no mojanter. Si conocemos la relación entre las viscosidades dinámicas de los fluidos y el término de relajación de



uno de ellos podemos calcular el otro de la siguiente manera:

$$\frac{\eta_{n,\text{físico}}}{\eta_{m,\text{físico}}} = \frac{\eta_{n,\text{LBM}}}{\eta_{m,\text{LBM}}} = \frac{\rho_n c_s^2 (\tau_n - 0.5)}{\rho_m c_s^2 (\tau_m - 0.5)}.$$

Por lo general, la conversión de parámetros se puede realizar a través de parámetros no dimensionales, por ejemplo, número de Reynolds  $Re$ , número de Weber  $We$  o número capilar  $Ca$ .

$$\begin{aligned} Ca &= \frac{u_m \eta_m}{\sigma} \\ M &= \frac{\eta_n}{\eta_m} \\ B_o &= g_o (\rho_n - \rho_m) \frac{R^2}{\sigma} \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$Ca = \frac{u_m \eta_m}{\sigma_{\text{física}}} = \frac{u_{m,\text{LBM}} \eta_{m,\text{LBM}}}{\sigma_{\text{LBM}}}.$$

En el caso de un  $Ca$  conocido y  $\sigma_{\text{LBM}}$ . Se puede calcular el desplazamiento  $u_{m,\text{LBM}}$ .

## 2.3 Modelo de Autómata Celular para flujo monofásico usando *Lattice Boltzmann D2Q9*.

En esta sección se implementa el método de *Lattice Boltzmann* para un flujo monofásico en un medio poroso. Este algoritmo fue implementado en MATLAB versión R2009a en una máquina Intel Core i3-270M con un procesador de 2.4 G y memoria RAM 2GB. El código completo se encuentra en el Apéndice B.

### 2.3.1 Inicio

Para este paso, se utiliza 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

$$\begin{aligned} \rho(t=0) &= 1 \\ \nu(t=0) &= 0 \\ f_i(t=0) &= f_i^{\text{eq}} \end{aligned}$$

### 2.3.2 Función de Distribución

Se crea una matriz  $lx \times ly$  de 9 dimensiones. Una por cada dirección de velocidades dadas en la figura 2.6,  $F = \text{repmat}(\text{rho}/9, [lx \ ly \ 9])$

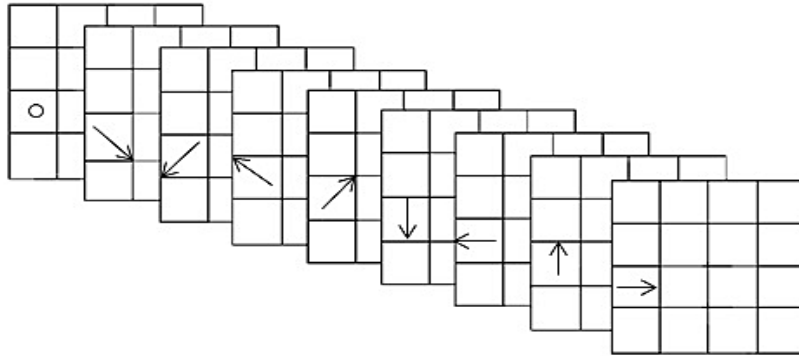


Figura 2.6: Ejemplo de Matrices de Funciones de Distribución D2Q9. Fuente: El autor

De tal manera que para calcular la densidad se suman las matrices, según la fórmula 2.1. El valor de la función de distribución inicial es uno dividido entre 9, ya que se estableció 1 como densidad.

### 2.4 Condiciones de Frontera.

Para crear un medio poroso se creó una matriz de valores booleano, donde el 0 representa los poros y el 1 el sólido. Como se ejemplifica en la figura.

$$\text{BOUND} = \text{rand}(lx, ly) > 0.7$$

Se crea un vector con la posiciones de los valores no ceros de la matriz con la función `find`

$$\text{ON} = \text{find}(\text{BOUND})$$

Después de la propagación las partículas que se localicen en los valores de este vector cambian de sentido. Condición de frontera *Bouncedback*.

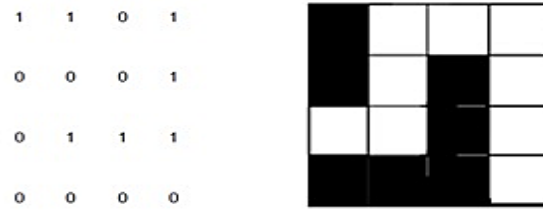


Figura 2.7: Ejemplo Matriz Booleana. Fuente: El autor

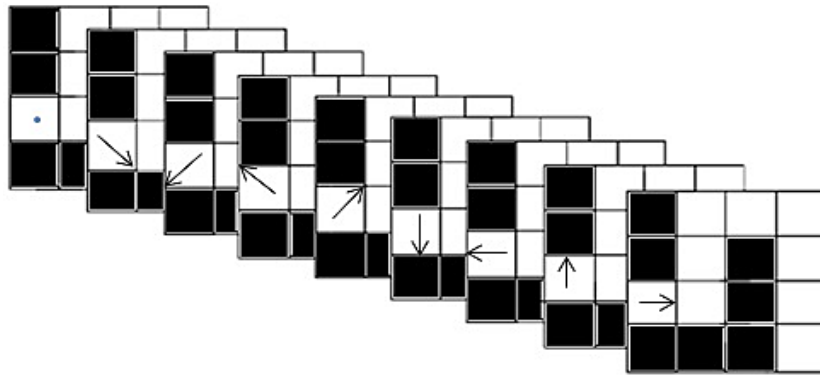


Figura 2.8: Ejemplo Matriz con Sólidos. Fuente: El autor

### 2.4.1 Propagación

La propagación se logra intercambiando los valores de las matrices de valores de la función de distribución de la siguiente manera:

$$F(:, :, 1) = F([1x \ 1:lx-1], :, 1)$$

$$F(:, :, 2) = F([1x \ 1:lx-1], [1y \ 1:ly-1], 2)$$

Para las otras direcciones se utilizan las siguientes:

$$F(:, :, 4) = F([2:lx \ 1], [1y \ 1:ly-1], 4); F(:, :, 3) = F(:, [1y \ 1:ly-1], 3);$$

$$F(:, :, 2) = F([1x \ 1:lx-1], [1y \ 1:ly-1], 2); F(:, :, 5) = F([2:lx \ 1], :, 5);$$

$$F(:, :, 1) = F([1x \ 1:lx-1], :, 1); F(:, :, 6) = F([2:lx \ 1], [2:ly \ 1], 6);$$

$$F(:, :, 7) = F(:, [2:ly \ 1], 7); F(:, :, 8) = F([1x \ 1:lx-1], [2:ly \ 1], 8)$$



Figura 2.9: Ejemplo de Propagación Horizontal. Fuente: El autor

### 2.4.2 Gráficos

En la imagen se muestra el perfil de velocidad obtenido aplicando el método de *Lattice Boltzmann*, el código completo en MATLAB en el anexo.

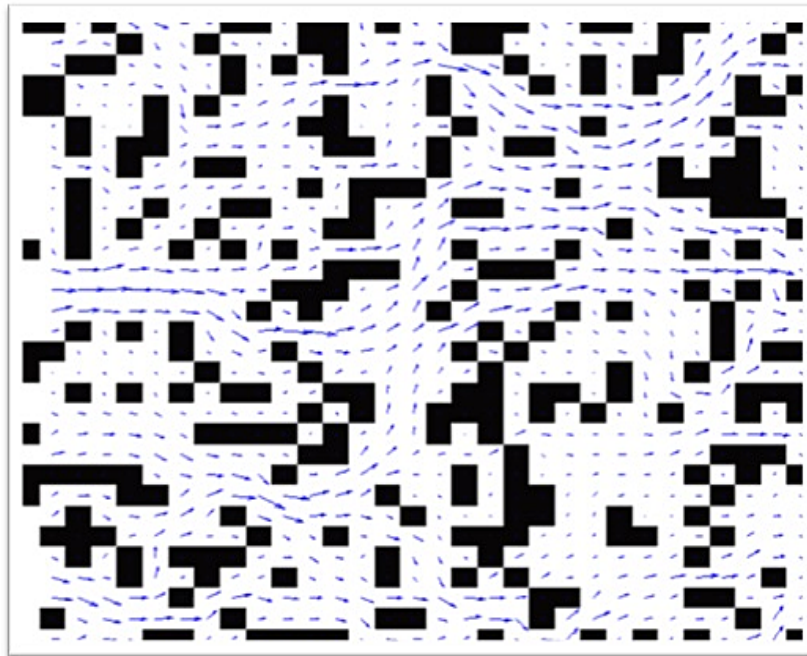


Figura 2.10: Perfil de Velocidades D2Q9 en Medio Poroso

# CAPÍTULO 3

## MÉTODO DE *LATTICE* BOLTZMANN PARA FLUJO MULTIFÁSICO MULTICOMPONENTE

### 3.1 Velocidad de Equilibrio en el Modelo Shan-Chen

En el esquema propuesto por Shan and Chen, ver [3] después del paso de colisión, el momento de las partículas del fluido son calculadas

$$\rho u_\alpha = \sum_i c_{i\alpha} f_i \quad (3.1)$$

Shan y Chen introdujeron en el método LB un potencial de interacción entre las partículas que constituyen el fluido para modelar la realidad física respecto a las interacciones microscópicas. Así, además de la separación entre fluidos inmiscibles (que no se mezclan de forma natural, como el agua y el aceite), el modelo es capaz de reproducir la transición de la fase de vapor líquido, lo que permite simular la coexistencia de dos fases distintas en equilibrio, en el que la densidad identifica automáticamente ambas fases [3]. Este es el modelo matemático que utilizamos en la simulación.

En el modelo, se introduce una función de distribución para cada una de los dos o más componentes fluidos. Aquí trabajamos con sólo dos componentes, pero muchos más componentes podrían ser considerados. Cada función de distribución representa un componente fluido y satisface la siguiente ecuación de *Lattice* Boltzmann

$$f^\sigma(x + \xi \Delta t, \xi, t + \Delta t) - f^\sigma(x, \xi, t) = -\frac{1}{\tau_\sigma} [f^\sigma(x, \xi, t) - f^{\sigma, \text{eq}}(x, \xi, t)]. \quad (3.2)$$

Donde  $f^\sigma(x, \xi, t)$  es la función de distribución de densidad del componente  $\sigma$  en la dirección  $i$  de velocidad y  $\tau_\sigma$  es el tiempo de relajación en el modelo BGK, que está relacionado con la viscosidad cinemática

$$\nu_\sigma = c_s^2(\tau_\sigma - 0.5\Delta t) \quad (3.3)$$

La función de distribución de equilibrio  $f^{\sigma,\text{eq}}(x, t)$  se puede calcular como

$$f^{\sigma,\text{eq}} = \omega_i \rho_\sigma \left\{ 1 + \frac{(c_i \cdot u_\sigma^{\text{eq}})}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot u_\sigma^{\text{eq}})^2}{2c_s^4} - \frac{(u_\sigma^{\text{eq}})^2}{2c_s^2} \right\} \quad (3.4)$$

$\rho_\sigma$  es la densidad del componente  $\sigma$ , que es obtenida por:

$$\rho_\sigma = \sum_i f_i^\sigma.$$

La velocidad macroscópica  $u_\sigma^{\text{eq}}$  dada por (Shan and Chen 1993)

$$u_\sigma^{\text{eq}} = u' + \frac{\tau_\sigma F_\sigma}{\rho_\sigma}. \quad (3.5)$$

Donde  $u'$  es la velocidad común de los varios componentes y está definida como:

$$u' = \frac{\sum_\sigma \sum_i \frac{f_i^\sigma c_i}{\tau_\sigma}}{\sum_\sigma \frac{\rho_\sigma}{\tau_\sigma}} \quad (3.6)$$

Esta velocidad se considera como la velocidad de todo el fluido. La densidad general del fluido en el dominio es aproximadamente uniforme porque las densidades son complementarias en el sentido de que:

$$\rho = \sum_\sigma \rho_\sigma$$

### 3.2 Cohesión fluido-fluido y adhesión fluido-sólido

La fuerza cohesiva que actúa sobre el  $\sigma$  componente es definida como (Martys y Chen, 1996 ver [15]):

$$F(x, t) = -G_C \rho_\sigma(x, t) \sum_i \omega_i \rho_{\bar{\sigma}}(x + c_i \Delta t, t) c_i \quad (3.7)$$

donde  $\sigma$  y  $\bar{\sigma}$  denotan diferentes componentes del fluido.  $G_C$  es un parámetro de control de la fuerza de cohesión. La fuerza de superficie que actúa sobre el componente  $\sigma$  puede ser computado como (Martys y Chen, 1996 ver [15]):

$$F(x, t)_{\text{ads},\sigma} = -G_{\text{ads},\sigma} \rho_\sigma(x, t) \sigma_i \omega_i s(x + c_i \Delta t, t) c_i \quad (3.8)$$

Aquí  $s(x + c_i \Delta t, t)$  es una función indicadora que es igual a 1 o 0 para un sólido o un nodo de dominio del fluido, respectivamente. La fuerza de interacción entre cada fluido y una pared se puede ajustar por los parámetros  $G_{\text{ads}} \cdot G_{\text{ads}}$  debe ser positivo para el líquido no humectante y negativo para el líquido humectante (Chen et al. 2014; ver [16]). La diferencia entre los  $G_{\text{ads}}$  determina el ángulo de contacto. En nuestras simulaciones, para nodos sólidos, el algoritmo de rebote se implementa antes del paso de transmisión para imitar una condición de límite de pared antideslizante.

### 3.3 Determinación de $G_c$ y la tensión interfacial

En el modelo Shan-Chen, el parámetro  $G_c$  controla la tensión interfacial fluido-fluido y hay un valor umbral  $G_{c,\text{crit}} = \frac{1}{\rho_1 + \rho_2}$  para  $G_c$  (Martys y Chen 1996) por debajo del cual un sistema mixto inicialmente uniforme de dos fluidos inmiscibles producirá una solución estable. Es bien sabido que tres parámetros adimensionales son importantes para el flujo bifásico inmiscible a través de medios porosos. Estos parámetros son la viscosidad de radio, número de Reynolds y el número capilar.  $G_c$  debe ser elegido cuidadosamente.  $G_c$  más grande es preferible para simulaciones multifásico porque aumenta la nitidez de la interfaz y limita la "solubilidad" de los fluidos dentro de cada uno.

### 3.4 Ángulo de Contacto

Cuando una gota entra en contacto con un sólido, hay una línea de contacto que delimita el punto de contacto entre la humectación y fluidos no humectantes y la superficie sólida. El ángulo de contacto entre los fluidos y la superficie se pueden calcular a través de la ecuación de Young. Previstas las tensiones interfaciales entre los fluidos  $\sigma_{12}$  y entre los fluidos y el sólido  $\sigma_{s1}$  y  $\sigma_{s2}$ .

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{s2} - \sigma_{s1}}{\sigma_{12}} \quad (3.9)$$

En Huang et al. (2007) se propuso existosamente la aplicación de la ecuación de Youngs con sustitución del parámetro de cohesión LBM y el factor de densidad

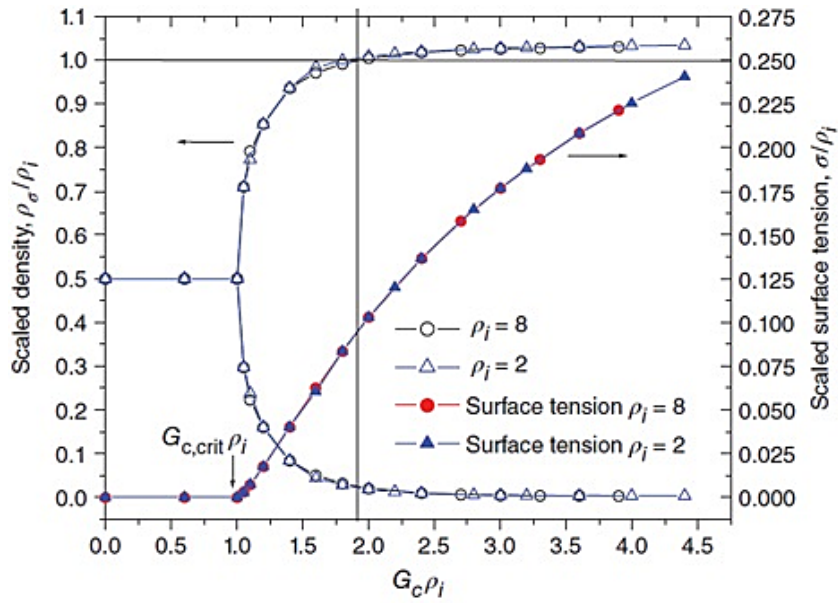


Figura 3.1: Densidad de componentes (eje izquierdo) y tensión interfacial de Lattice (eje derecho) en función del parámetro de cohesión  $G_c$ . Multiphase Lattice Boltzmann Methods. Haibo Huang, Michael Sukop y Xi Yun Lu.

$G_c = \frac{\rho_1 - \rho_2}{2}$  para la interacción fluido-fluido, y el parámetro de adhesión  $G_{ads,1}$  y  $G_{ads,2}$  para la correspondiente cohesión sólido-fluidos.

$$\cos \theta = \frac{G_{ads,1} - G_{ads,2}}{G_c \left( \frac{\rho_1 - \rho_2}{2} \right)} \quad (3.10)$$

### 3.5 Fluidos Inmiscible y Fluidos Parcialmente Inmiscible. Tensión Interfacial.

Consideremos un sistema de dos fluidos con fuerza de interacción  $G_{12}$ . Para  $G_{12} = 0$ , Ambos fluidos interactúan solo a través de su velocidad común, pero no hay fuerza de interacción y el sistema es una mezcla de fluidos ideal y por lo tanto completamente miscible. Al aumentar  $G_{12}$ , ambos componentes se repelen; por encima de un valor crítico de  $G_{12}$ , ambos fluidos finalmente se separan y forman una interfaz. Cuando más grande es  $G_{12}$ , más delgada es la región de la interfaz. Como se muestra en la figura 3.2.



Si la repulsión fuera lo suficientemente fuerte, los fluidos se separarían completamente (completamente inmiscibles).

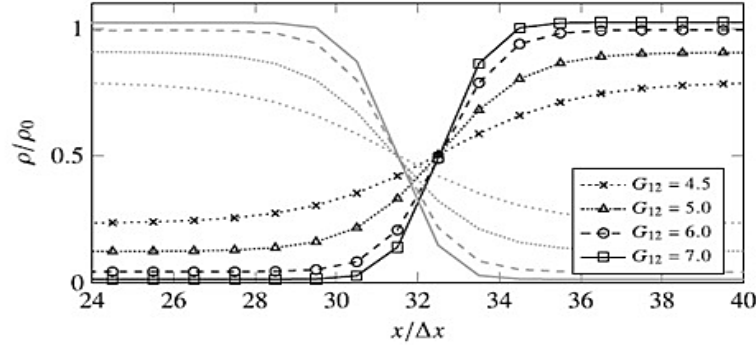


Figura 3.2: Escala de componente de densidad (eje izquierdo) y escala de tensión superficial

Sin embargo, en realidad, siempre hay una pequeña cantidad del fluido 1 en el dominio del fluido 2 y el al revés (parcialmente miscible). Particularmente con los métodos de interfaz difusa, no es posible lograr fluidos completamente inmiscibles. En el caso del modelo Shan-Chen, las fuerzas se volverían tan grandes y numéricamente rígidas en algún punto que el componente de las densidades se volverían negativas y el algoritmo inestable. En el límite miscible, donde  $G_{12}$  es finito pero suficientemente pequeño, el sistema es caracterizado por la difusión mutua de los componentes. El modelo Shan-Chen es particularmente poderoso cuando los componentes son inmiscibles. Para  $G_{12}$  suficientemente grande, cuando se produce la desmezcla y las interfaces entre componentes aparecen, la tensión superficial es una característica emergente del modelo Shan-Chen. Desafortunadamente, no está claro cual es el valor de la tensión interfacial para una elección dada del parámetro de interacción  $G_{12}$ .

Para esto se realiza la prueba Young-Laplace para encontrar la relación entre  $G_{12}$  y una elección dada de pseudopotencial. Para realizar la prueba de Young-Laplace, necesitamos conocer la presión del fluido multicomponente. La ecuación de estado

para el modelo Shan-Chen multicomponente en el límite continuo es

$$p = c_s^2 \sum_{\sigma} \rho^{\sigma} + \frac{c_s^2 \Delta t^2}{2} \sum_{\sigma, \bar{\sigma}} G_{\sigma, \bar{\sigma}} \psi^{(\sigma)} \psi^{(\bar{\sigma})} \quad (3.11)$$

El primer término en el lado derecho refleja las propiedades de gas ideales de los componentes, mientras que el segundo término denota la interacción entre ellos. Es este segundo término lo que puede conducir a la separación de fase de los componentes.

### 3.6 Condiciones de Frontera y Ángulo de Contacto

Una de las aplicaciones más importantes del modelo multicomponente es el flujo en medio poroso donde el comportamiento del fluido es dominado por la interacción entre la fase fluida y la fase sólida. Esta situación es comúnmente encontrada en la recuperación de petróleo, la industria farmacéutica y la industria alimenticia. La interacción de un fluido con una pared solida consta de dos partes: i) condición no deslizante ii) condición de humectabilidad. El primero se realiza normalmente por el método simple de rebote para todos los componentes de fluidos. Con el fin de lograr el ángulo de contacto deseado en la superficie sólida, los diferentes componentes de fluidos tienen que interactuar de manera diferente con el sólido. El ángulo de contacto satisface la ecuación (3.9) donde el gas "g" y líquido "l" tienen que ser reemplazados por fluido 1 y fluido 2. Martys y Chen [15] propusieron una fuerza de interacción entre el fluido y nodos sólidos

$$F(x, t)_{ads, \sigma} = -G_{ads, \sigma} \rho_{\sigma}(x, t) \sigma_i \omega_i s(x + c_i \Delta t, t) c_i \quad (3.12)$$

Aquí  $s(x + c_i \Delta t, t)$  es una función indicadora que es igual a 1 o 0 para un sólido o un nodo de dominio fluido, respectivamente. La fuerza de interacción entre cada fluido y una pared se puede ajustar por los parámetros  $G_{ads}$ .  $G_{ads}$  debe ser positivo para el líquido no humectante y negativo para el líquido humectante. La diferencia entre los  $G_{ads}$  determina el ángulo de contacto. Tomando un fluido binario con un valor dado de  $G_{12}$  como ejemplo, el ángulo de contacto se puede ajustar variando los dos

parámetros libres  $G_{1s}$  y  $G_{2ss}$ . Podemos encontrar diferentes modelos de fuerza de superficie-fluido en la literatura Chen et al. 2014 [16] propone una forma que es

$$F^{s(\sigma)} = -G_{\sigma s} \psi^{(\sigma)}(x) w_i \psi(\rho_s) c_i \Delta t \quad (3.13)$$

Este modelo incluye una "densidad sólida"  $\rho_s$  como otro grado de libertad. La densidad del sólido se puede utilizar para ajustar el ángulo de contacto, ver [17] y [18] por ejemplo. Dependiendo de los detalles exactos del modelo de interacción fluido-sólido elegido, generalmente es necesario ejecutar una serie de simulaciones para establecer la relación entre el ángulo de contacto deseado y los parámetros de simulación ( $G_{12}, G_{1s}, G_{2s}$  and  $\rho_s$ ).

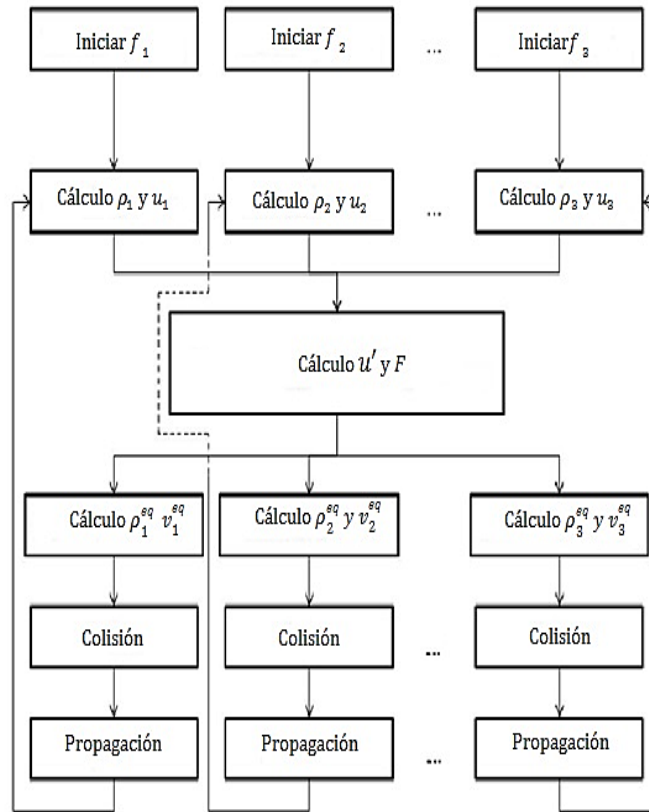


Figura 3.3: Algoritmo LB multifásico y multicomponentes

### 3.7 Desarrollo del Modelo *Lattice* Boltzmann-BGK D2Q9 para flujo multifásico

En esta sección se desarrolla flujo multifásico en medio poroso, las fases son inmiscibles y la simulación se iniciará con la segregación de fases.

#### 3.7.1 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.

#### 3.7.2 Función de Distribución

Dos matrices de valores de función de distribución, una por cada fluido. A una matriz la representamos con la letra  $f^2$  fluido de menor densidad y a la otra matriz con la letra  $f^1$  fluido de mayor densidad.

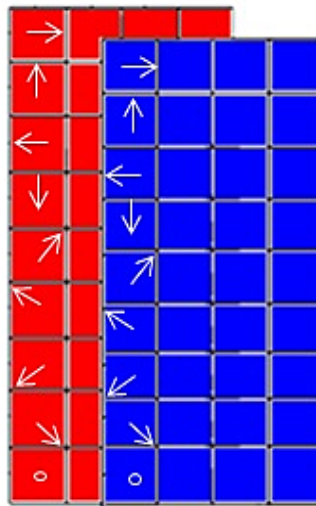


Figura 3.4: Ejemplo de Matrices de valores de función de distribución

En este caso la densidad se calcula como la suma de las columnas de las matrices.

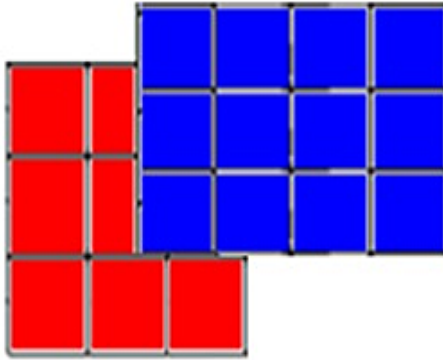


Figura 3.5: Ejemplo de Matrices de Densidades. Fuente: El autor

Luego calculamos la interacción entre los fluidos, y la velocidad total por componentes, con estas propiedades se obtiene la función de distribución de equilibrio y podemos calcular el nuevo valor de función de distribución mediante el término de colisión.

$$F(x, t) = -G_C \rho_1(x, t) \sum_i \omega_i \rho_2(x + c_i \Delta t, t) c_i$$

$G_C = -1.7$  Amplitud de la fuerza de interacción intermolecular.

$\rho_1$  =Matriz (rho1). Densidad de componente 1.

$w_i = [4/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/36, 1/36, 1/36, 1/36]$  Pesos.

$\rho_2$  =Matriz (rho). Densidad de componente 2.

$c_i$  = Velocidad en la componente  $i$ .

Donde  $u'$  es la velocidad del sistema y está definida como:

$$u' = \frac{\sum_{\sigma} \sum_i \frac{f_i^{\sigma} c_i}{\tau_{\sigma}}}{\sum_{\sigma} \frac{\rho_{\sigma}}{\tau_{\sigma}}}.$$

Reduciendo la ecuación anterior a dos fluidos tenemos:

$$u' = \frac{\frac{\sum_i f_i^1 c_i}{\tau_1} + \frac{\sum_i f_i^2 c_i}{\tau_2}}{\frac{\rho_1}{\tau_1} + \frac{\rho_2}{\tau_2}}.$$

La velocidad macroscópica  $u_{\sigma}^{\text{eq}}$  es dada por (Shan and Chen 1993)

$$u_{\sigma}^{\text{eq}} = u' + \frac{\tau_{\sigma} F_{\sigma}}{\rho_{\sigma}}.$$

Simplificando:

$$u_1^{\text{eq}} = u' + \frac{\tau_1 F_1}{\rho_1}.$$

Y,

$$u_2^{\text{eq}} = u' + \frac{\tau_2 F_2}{\rho_2}.$$

La función de distribución de equilibrio  $f^{\text{eq}}(x, t)$  se puede calcular como

$$f^{1,\text{eq}} = \omega_i \rho_1 \left\{ 1 + \frac{(c_i \cdot u_1^{\text{eq}})}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot u_1^{\text{eq}})^2}{2c_s^4} - \frac{(u_1^{\text{eq}})^2}{2c_s^2} \right\}$$

$$f^{2,\text{eq}} = \omega_i \rho_2 \left\{ 1 + \frac{(c_i \cdot u_2^{\text{eq}})}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot u_2^{\text{eq}})^2}{2c_s^4} - \frac{(u_2^{\text{eq}})^2}{2c_s^2} \right\}$$

Se calculan los nuevos valores de la función de distribución con el término de colisión

$$f^{1*} = f^1 - \frac{1}{\tau_1} [f^1 - f^{1,\text{eq}}]$$

$$f^{2*} = f^2 - \frac{1}{\tau_2} [f^2 - f^{2,\text{eq}}]$$

### 3.7.3 Condiciones de frontera

Para construir el medio poroso incluimos círculos dentro del dominio de la matriz de la forma siguiente

$$\text{obst} = (x-a)^2 + (y-b)^2 \leq c^2;$$

$a$  y  $b$  son las coordenadas  $x$  e  $y$  dentro del dominio y  $c$  es el diámetro del círculo. Los círculos se visualizan en la figura 3.7.3. Para ambos fluidos se aplica la condición de frontera *Bounced-Back*.

## 3.8 Modelos de Flujos Multifásicos

### 3.8.1 Separación de fases de dos fluidos inmiscibles

En esta sección se simuló la separación de dos fluidos inmiscibles, agua y aceite, utilizando el método de Shan-Chen como introducción a la simulación en un medio

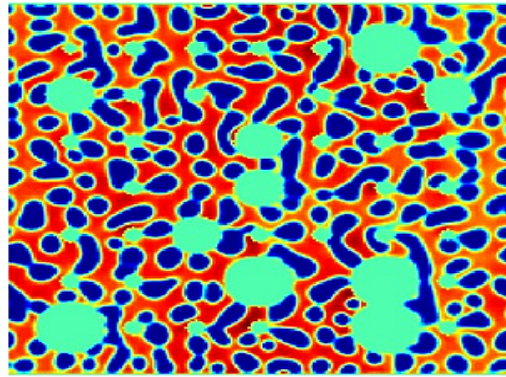


Figura 3.6: Ejemplo de Matriz Medio Poroso. Fuente: El autor

poroso. Esta simulación es un punto de partida para el análisis de las emulsiones, sobre todo en las emulsiones que se forman en los pozos de petróleo y afectan la producción. Simulando a diferentes números de Reynolds podemos ver el comportamiento de la emulsión del aceite en agua. También podemos modelar los efectos de los agentes surfactantes en las emulsiones. Se utiliza  $G = -1.2$  como factor de interacción intermolecular.

### 3.8.2 Propiedades de los Fluidos

Los datos que se muestran en la tabla siguiente son los datos que utilizamos para cargar el modelo.

Densidad del aceite( $\rho_n$ )	$0.8 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$
Densidad del agua( $\rho_m$ )	$1 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$
Viscosidad cinemática aceite( $\eta_n$ )	$1.844 \times 10^{-3} \text{ pa s}$
Viscosidad cinemática agua( $\eta_m$ )	$1 \times 10^{-3} \text{ pa s}$

Tabla 3.1: Propiedades de los Fluidos

Con estos datos calculamos el factor de relajación. La viscosidad dinámica es la relación entre la viscosidad cinemática y la densidad:

$$\eta = \frac{\nu}{\rho}$$

El término de relajación  $\rho$  se relaciona con la velocidad cinemática del fluido mediante la siguiente formula:

$$\nu_\sigma = c_s^2(\tau_\sigma - 0.5\Delta t).$$

Se conoce como relación de viscosidad dinámica entre dos fluidos al cociente entre las viscosidades dinámicas de los fluidos  $\eta_m$  y  $\eta_n$ , para este caso utilizamos los subíndices m y n por conveniencia para denotar fase mojanete y no mojanete. Si conocemos la relación entre las viscosidades dinámicas de los fluidos y el término de relajación de uno de ellos podemos calcular el otro de la siguiente manera:

$$\frac{\eta_{n,\text{físico}}}{\eta_{m,\text{físico}}} = \frac{\eta_{n,\text{LBM}}}{\eta_{m,\text{LBM}}} = \frac{\rho_n c_s^2(\tau_n - 0.5)}{\rho_m c_s^2(\tau_m - 0.5)}$$

Por lo general, la conversión de parámetros se puede realizar a través de parámetros no dimensionales, por ejemplo, número de Reynolds  $Re$ , número de Weber  $We$  o número capilar  $Ca$

$$Ca = \frac{u_m \eta_m}{\sigma}, \quad M = \frac{\eta_n}{\eta_m}, \quad Bo = g_o(\rho_n - \rho_m) \frac{R^2}{\sigma}.$$

Por lo tanto,

$$Ca = \frac{u_m \eta_m}{\sigma_{\text{física}}} = \frac{u_{m,\text{LBM}} \eta_{m,\text{LBM}}}{\sigma_{\text{LBM}}}.$$

En el caso de un  $Ca$  conocido y  $\sigma_{\text{LBM}}$ . Se puede calcular el desplazamiento  $u_{m,\text{LBM}}$ . Podemos calcular el término de relajación del aceite, con los datos anteriores

$$\frac{\eta_{n,\text{físico}}}{\eta_{m,\text{físico}}} = \frac{\eta_{n,\text{LBM}}}{\eta_{m,\text{LBM}}} = \frac{\rho_n c_s^2(\tau_n - 0.5)}{\rho_m c_s^2(\tau_m - 0.5)}.$$

Despejando  $\tau_n$  y asumiendo que el término de relajación del agua es 1, tenemos:

$$\frac{\rho_m c_s^2(\tau_m - 0.5)\eta_n}{\eta_m \rho_n c_s^2} + 0.5 = \tau_n.$$



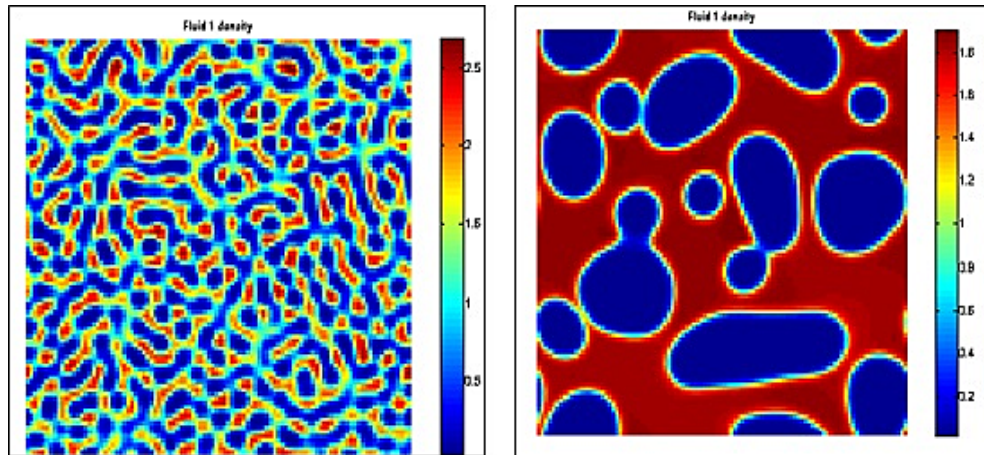


Figura 3.7: Separación de dos fluidos inmiscibles  $ts = 100$ ,  $ts = 500$ ,  $\tau_1 = 1, \tau_2 = 0.9$

### 3.8.3 Gráficos 1

## 3.9 Multifásico en Medio Poroso

En esta sección se incluyeron círculos que simulan los granos de un medio poroso, en estos círculos se aplicó la condición de rebote para ambos fluidos. La velocidad de flujo en dirección  $x$  es del orden de  $10^{-3}$  unidades de la rejilla. Consideramos dos fluidos en el medio poroso que inicialmente se separan y fluyen por separados dentro del medio: fluido 1 y fluido 2. Cada uno de ellos interactúa con el medio poroso de manera diferente y la forma de incluir esto en el modelo está descrito en la sección, para este modelo se incluye el factor de interacción intermolecular de los fluidos  $G = -1.7$ . En esta simulación cualquier nodo del enmallado en la matriz representa un nodo sólido o un nodo fluido. Para los nodos sólidos el algoritmo rebote se implementa para efectos de colisión antes del paso de propagación para minimizar los efectos no deslizante de las paredes, (ver figuras 3.7 y 3.8).

### 3.10 Gráficos 2

En las gráficas vemos un fluido desplazándose hacia la derecha simulando un fluido multifásico en un medio poroso, este está representado por círculos con la

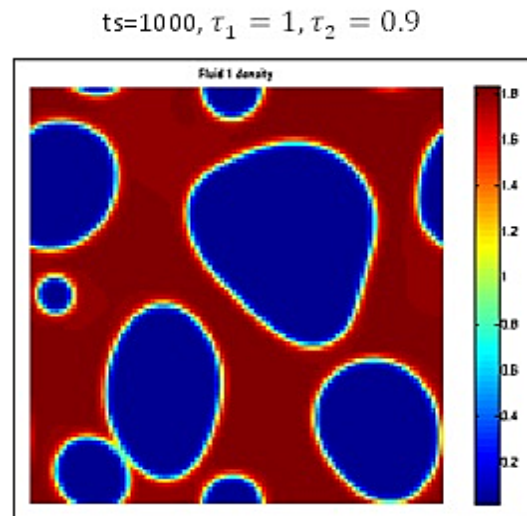


Figura 3.8: Separación de dos fluidos inmiscible  $ts=1000, ts = 100, \tau_1 = 1, \tau_2 = 0.9$

condición de rebote. En la figura 3.9 se observa el desplazamiento de ambos fluidos a través del medio poroso para distintos valores de tiempo  $t$ .

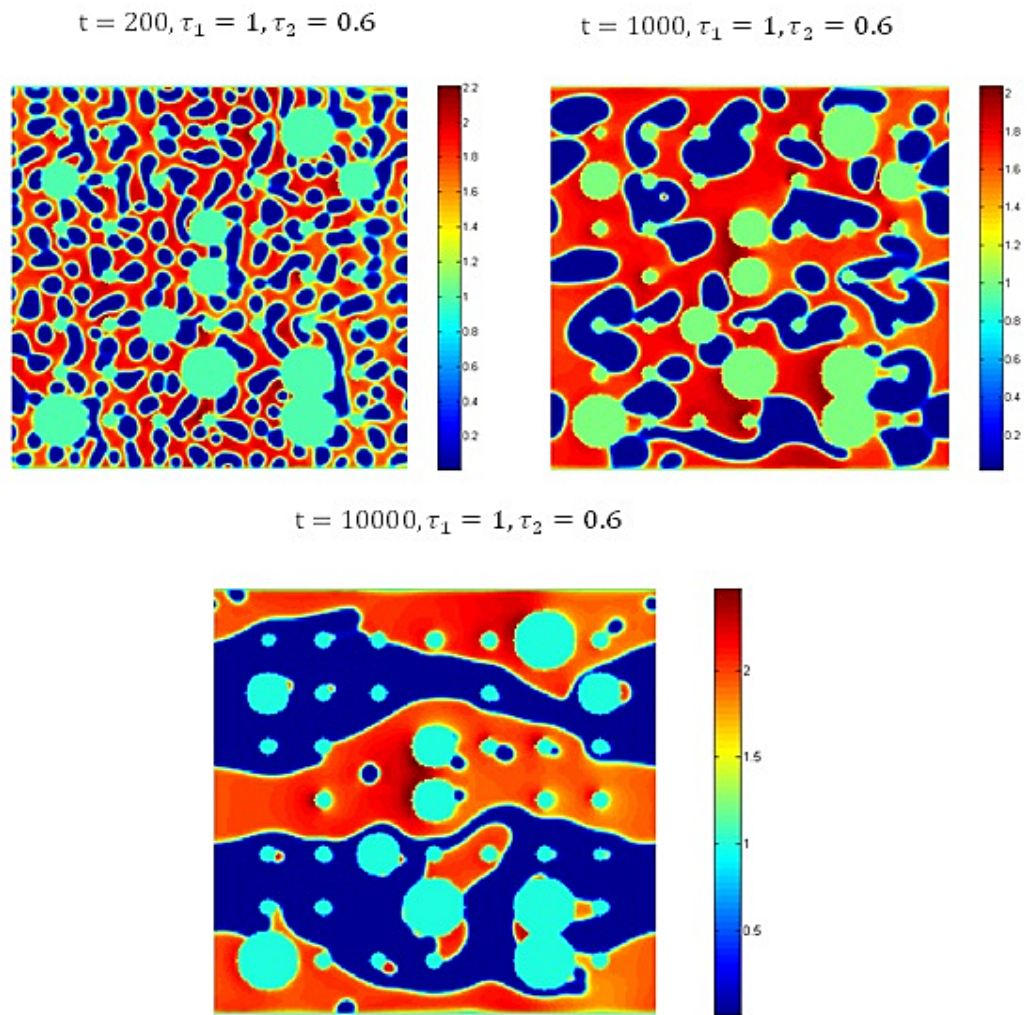


Figura 3.9: Flujo Bifásico desplazándose en un Medio Poroso

## CONCLUSIONES

Del presente trabajo se obtuvieron las siguientes conclusiones:

- El modelo de potencial interpartícula empleado en este trabajo logró reproducir lo que experimentalmente ocurre en la interacción entre dos o más fluidos.
- La ubicación del proceso de propagación antes de la condición *Bouncedback* generó el efecto aproximado de la humectabilidad de la superficie sólida.
- Este algoritmo logró modelar el comportamiento de dos fluidos en un medio poroso, pudiendo realizar la inserción de nuevas variables o propiedades para realizar estudios más específicos.
- El método de Autómata celular (*Lattice Boltzmann*), ahorró enormes gastos computacionales, ya que la máquina utilizada no necesitó tener grandes capacidades de memoria ni de procesador para realizar las corridas con eficiencia.

## RECOMENDACIONES

- Validar el método en medio poroso obtenido del escaneo de muestras de núcleo.
- Generar un modelo que incluya las fuerzas de adhesión con el sólido según el modelo de Martys and Chen, [15].
- Realizar un estudio similar aplicando el método de *Lattice* Boltzmann al modelo de velocidad tridimensional D3Q19.

**BIBLIOGRAFÍA**

- [1] Ilachinski A. *Cellular Automata. A discrete universe*. World Scientific Publishing. USA, 2001.
- [2] Zhou J. *Lattice Boltzmann Methods for Shallow Water Flows*. New York. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- [3] Shan X. and Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. Rev. E*. 47:1815-1820, 1993.
- [4] Succi S. *The Lattice Boltzmann Equation For Complex States of Flowing Matter*. Oxford, 2018.
- [5] van den Bosch, Frank C., Ogiya Go. Dark matter substructure in numerical simulations: a tale of discreteness noise, runaway instabilities, and artificial disruption.
- [6] Hardy J., De Pazzis O. and Pomeau Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions. *Phys. Rev. A* 13 1949, 1976.
- [7] Frisch U., Hasslacher B. and Pomeau Y. Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation. *Phys Rev Lett*. 56, 1505-1508, 1986.
- [8] Timm K., Halim K., Alexander K. , Orest S., Goncalo S., Erlend M. *The Lattice Boltzmann. Principles and Practice*. Springer International Publishing Switzerland, 2017.
- [9] Mohamad A. *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. Springer-Verlag London, 2011.

- [10] Bhatnagar P.L. , Gross E.P., Krook M. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review*. 94 (3): 511-525, 1954.
- [11] Li-Shi L. *Lattice Boltzmann Equation Its Mathematical Essence and Key Properties*. Department of Mathematics and Statistics. Old Dominion University, Norfolk, Virginia. USA, 2019.
- [12] Wolf-Gladrow D. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction*. Springer-Verlag Berlin, 2000.
- [13] McNamara G. R. and Zanetti G. Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata. *Phys. Rev. Lett.* 61, (20):2332-2335, 1988.
- [14] Higuera F. J. and Jimenez J. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *Europhys. Lett.*, 9(7):663-668, 1989.
- [15] Martys N.S., Chen H. Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E*. 53(1) 743, 1996.
- [16] Chen L., Kang Q., Mu Y., He Y.L. and Tao W.Q. A Critical Review of the Pseudo Potential Multiphase Lattice Boltzmann Model: Methods and Applications. *Heat Mass Transfer* 76: 210-236, 2014.
- [17] Chibbaro S. Capillary filling with pseudo-potential binary Lattice-Boltzmann model. *Eur. Phys. J. E.*, 27: 99-106, 2008.
- [18] Jansen F., Harting J. From bijels to Pickering emulsions: A lattice Boltzmann study. *Phys. Rev. E*, 83: 046707, 2011.
- [19] He X. and Luo L.S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E* 56: 6811-6817, 1997.

## APÉNDICE A

### 3.11 Programa para obtener la separación de fases de dos fluidos inmiscibles

```
%-----  
% fluidos-inmiscibles.m CODIGO MATLAB JUAN MAGO MARIA MALAVE  
%-----  
  
Dos fluidos inmiscibles  
4.2.1 Código MATLAB  
ly = 200;  
lx = 200 ;  
G = -1.7; %Amplitud de la fuerza de interacción intermolecular  
omega1 = 1.; % Termino de relajación para fluido 1  
omega2 = 0.7; % Termino de relajación para fluido 2  
maxT = 10000; % Número total de iteraciones  
tPlot =40; % Iteraciones entre salida de imagen  
% D2Q9 LATTICE CONSTANTS  
tNS = [4/9, 1/9,1/9,1/9,1/9, 1/36,1/36,1/36,1/36];  
cxNS = [ 0, 1, 0, -1, 0, 1, -1, -1, 1];  
cyNS = [ 0, 0, 1, 0, -1, 1, 1, -1, -1];  
opp=[1, 4, 5, 2, 3, 8, 9, 6, 7];  
[y,x] = meshgrid(1:ly,1:lx);  
drho = 0.01;  
delta_rho = -drho*(1-2.0*rand(lx));  
  
% INITIAL CONDITION FOR BOTH DISTRIBUTION FUNCTIONS: (T=0) ==> TIn(i) = t(i)  
for i=1:9  
    fIn(i,1:lx,1:ly) = tNS(i).*(1. + delta_rho)  
    gIn(i,1:lx,1:ly) = tNS(i).*(0.8 - delta_rho);  
end  
rho1 = reshape(sum(fIn),lx,ly)  
imagesc(rho1');  
colorbar  
title('Fluid 1 density');  
axis equal off; drawnow  
% MAIN LOOP (TIME CYCLES)  
Gomega1 = G/omega1;  
Gomega2 = G/omega2;  
for cycle = 1:maxT  
    % MACROSCOPIC VARIABLES
```



```

rho1 = sum(fIn);
rho2 = sum(gIn);
jx1 = reshape ( (cxNS * reshape(fIn,9,lx*ly)), 1,lx,ly);
jy1 = reshape ( (cyNS * reshape(fIn,9,lx*ly)), 1,lx,ly);
jx2 = reshape ( (cxNS * reshape(gIn,9,lx*ly)), 1,lx,ly);
jy2 = reshape ( (cyNS * reshape(gIn,9,lx*ly)), 1,lx,ly);
rhoTot_OMEGA = rho1*omega1 + rho2*omega2;
uTotX = (jx1*omega1+jx2*omega2) ./ rhoTot_OMEGA;
uTotY = (jy1*omega1+jy2*omega2) ./ rhoTot_OMEGA;
rhoContrib1x = 0.0;
rhoContrib2x = 0.0;
rhoContrib1y = 0.0;
rhoContrib2y = 0.0;
for i=2:9
    rhoContrib1x = rhoContrib1x + circshift(rho1*tNS(i), [0,cxNS(i),cyNS(i)])*cxNS(i);
    rhoContrib1y = rhoContrib1y + circshift(rho1*tNS(i), [0,cxNS(i),cyNS(i)])*cyNS(i);
    rhoContrib2x = rhoContrib2x + circshift(rho2*tNS(i), [0,cxNS(i),cyNS(i)])*cxNS(i);
    rhoContrib2y = rhoContrib2y + circshift(rho2*tNS(i), [0,cxNS(i),cyNS(i)])*cyNS(i);
end
uTotX1 = uTotX - Gomega1.*rhoContrib2x; %POTENTIAL CONTRIBUTION OF FLUID 2 ON 1
uTotY1 = uTotY - Gomega1.*rhoContrib2y;
uTotX2 = uTotX - Gomega2.*rhoContrib1x; %POTENTIAL CONTRIBUTION OF FLUID 2 ON 1
uTotY2 = uTotY - Gomega2.*rhoContrib1y;

% COLLISION STEP FLUID 1 AND 2
for i=1:9
    cuNS1      = 3*(cxNS(i)*uTotX1+cyNS(i)*uTotY1);
    cuNS2      = 3*(cxNS(i)*uTotX2+cyNS(i)*uTotY2);

    fEq(i,,:) = rho1 .* tNS(i) .* ...
                ( 1 + cuNS1 + 0.5*(cuNS1.*cuNS1) - 1.5*(uTotX1.^2+uTotY1.^2) );

    gEq(i,,:) = rho2 .* tNS(i) .* ...
                ( 1 + cuNS2 + 0.5*(cuNS2.*cuNS2) - 1.5*(uTotX2.^2+uTotY2.^2) );

    fOut(i,,:) = fIn(i,,:) - omega1 .* (fIn(i,,:)-fEq(i,,:));
    gOut(i,,:) = gIn(i,,:) - omega2 .* (gIn(i,,:)-gEq(i,,:));
end

% STREAMING STEP FLUID 1 AND 2

for i=1:9
    gIn(i,,:) = circshift(gOut(i,,:), [0,cxNS(i),cyNS(i)]);
end
% STREAMING STEP FLUID 1 AND 2

```

```
for i=1:9
    fIn(i, :, :) = circshift(fOut(i, :, :), [0, cxNS(i), cyNS(i)]);
end

% VISUALIZATION

if(mod(cycle,tPlot)==0)
    pause(0);
    rho1 = reshape(rho1,lx,ly);
    imagesc(rho1'); colorbar
    title('Fluid 1 density');
    axis equal off; drawnow
end
end
```

## APÉNDICE B

### 3.12 Programa para visualizar el desplazamiento de dos fluidos en un medio poroso

```
%-----  
% fluidos-poroso.m CODIGO MATLAB JUAN MAGO MARIA MALAVE  
%-----  
  
omega=1.0; density=1.0; t1=4/9; t2=1/9; t3=1/36; c_squ=1/3; nx=50;ny=50;F= repmat(density/9,[nx ny 9]);  
FEQ=F; msize=nx*ny; CI=[0:msize:msize*7];  
BOUND=rand(nx,ny)>0.7; %extremely porous random domain  
ON=find(BOUND); %matrix offset of each Occupied Node  
TO_REFLECT=[ON+CI(1) ON+CI(2) ON+CI(3) ON+CI(4) ...  
            ON+CI(5) ON+CI(6) ON+CI(7) ON+CI(8)];  
REFLECTED= [ON+CI(5) ON+CI(6) ON+CI(7) ON+CI(8) ...  
            ON+CI(1) ON+CI(2) ON+CI(3) ON+CI(4)];  
avu=1; prevavu=1; ts=0; deltaU=1e-7; numactivenodes=sum(sum(1-BOUND));  
while (ts<4000 && 1e-10<abs((prevavu-avu)/avu)) | ts<100  
    % Propagate  
    F(:, :, 4)=F([2:nx 1],[ny 1:ny-1],4);F(:, :, 3)=F(:, [ny 1:ny-1],3);  
    F(:, :, 2)=F([nx 1:nx-1],[ny 1:ny-1],2);F(:, :, 5)=F([2:nx 1], :, 5);  
    F(:, :, 1)=F([nx 1:nx-1], :, 1);F(:, :, 6)=F([2:nx 1],[2:ny 1],6);  
    F(:, :, 7)=F(:, [2:ny 1],7); F(:, :, 8)=F([nx 1:nx-1],[2:ny 1],8);  
    BOUNCEDBACK=F(TO_REFLECT); %Densities bouncing back at next timestep  
    DENSITY=sum(F,3);  
    UX=(sum(F(:, :, [1 2 8]),3)-sum(F(:, :, [4 5 6]),3))./DENSITY;  
    UY=(sum(F(:, :, [2 3 4]),3)-sum(F(:, :, [6 7 8]),3))./DENSITY;  
    UX(1,1:ny)=UX(1,1:ny)+deltaU; %Increase inlet pressure  
    UX(ON)=0; UY(ON)=0; DENSITY(ON)=0;  
    U_SQU=UX.^2+UY.^2; U_C2=UX+UY; U_C4=-UX+UY; U_C6=-U_C2; U_C8=-U_C4;  
    % Calculate equilibrium distribution: stationary  
    FEQ(:, :, 9)=t1*DENSITY.*(1-U_SQU/(2*c_squ));  
    % nearest-neighbours  
    FEQ(:, :, 1)=t2*DENSITY.*(1+UX/c_squ+0.5*(UX/c_squ).^2-U_SQU/(2*c_squ));  
    FEQ(:, :, 3)=t2*DENSITY.*(1+UY/c_squ+0.5*(UY/c_squ).^2-U_SQU/(2*c_squ));  
    FEQ(:, :, 5)=t2*DENSITY.*(1-UX/c_squ+0.5*(UX/c_squ).^2-U_SQU/(2*c_squ));  
    FEQ(:, :, 7)=t2*DENSITY.*(1-UY/c_squ+0.5*(UY/c_squ).^2-U_SQU/(2*c_squ));  
    % next-nearest neighbours  
    FEQ(:, :, 2)=t3*DENSITY.*(1+U_C2/c_squ+0.5*(U_C2/c_squ).^2-U_SQU/(2*c_squ));  
    FEQ(:, :, 4)=t3*DENSITY.*(1+U_C4/c_squ+0.5*(U_C4/c_squ).^2-U_SQU/(2*c_squ));  
    FEQ(:, :, 6)=t3*DENSITY.*(1+U_C6/c_squ+0.5*(U_C6/c_squ).^2-U_SQU/(2*c_squ));
```

```
FEQ(:, :, 8) = t3 * DENSITY .* (1 + U_C8 / c_squ + 0.5 * (U_C8 / c_squ) .^ 2 - U_SQU / (2 * c_squ));
F = omega * FEQ + (1 - omega) * F;
F(REFLECTED) = BOUNCEDBACK;
prevavu = avu; avu = sum(sum(UX)) / numactivenodes; ts = ts + 1;
end
figure; colormap(gray(2)); image(2-BOUND'); hold on;
quiver(2:nx, 1:ny, UX(2:nx, :)', UY(2:nx, :)' );
title(['Flow field after ', num2str(ts), '\deltat']); xlabel('x'); ylabel('y');
Flow through random grid of cells
```

## APÉNDICE C

### 3.13 Programa para definir los obstáculos en el medio poroso, variables y funciones de distribución

```
%-----  
% obstaculos.m CODIGO MATLAB JUAN MAGO MARIA MALAVE  
%-----  
  
clear  
clf  
  
% GENERAL FLOW CONSTANTS  
  
ly = 200;  
lx = 200;  
  
G = -1.7; % Amplitud de la fuerza intermolecular  
omega1 = 1.00; %Parámetro de Relajación para fluido 1  
omega2 = 1.00; %Parámetro de Relajación para fluido 2  
maxT = 10000; % Número total de iteraciones  
tPlot = 10; % Iteraciones entre sucesivas salidas gráficas  
% D2Q9 CONSTANES LATTICE  
tNS = [4/9, 1/9,1/9,1/9,1/9, 1/36,1/36,1/36,1/36];  
cxNS = [ 0, 1, 0, -1, 0, 1, -1, -1, 1];  
cyNS = [ 0, 0, 1, 0, -1, 1, 1, -1, -1];  
opp=[1, 4, 5, 2, 3, 8, 9, 6, 7];  
[y,x] = meshgrid(1:ly,1:lx);  
  
% Definición de obstáculos. Estos forman la parte sólida del medio poroso  
paredy(1:1:ly) = 1;  
paredx(39800:1:ly*ly) = 1;  
Regionparedy = find(paredy);  
Regionparedx = find(paredx);  
obst = (x-25).^2 + (y-25).^2 <= 3.^2;  
bbRegion = find(obst);  
obst1 = (x-175).^2 + (y-125).^2 <= 3.^2;  
bbRegion1 = find(obst1);  
obst2 = (x-50).^2 + (y-25).^2 <= 4.^2;  
bbRegion2 = find(obst2);  
obst3 = (x-75).^2 + (y-25).^2 <= 4.^2;  
bbRegion3 = find(obst3);
```

```
obst4 = (x-100).^2 + (y-25).^2 <= 4.^2;
bbRegion4 = find(obst4);
obst5 = (x-150).^2 + (y-25).^2 <= 14.^2;
bbRegion5 = find(obst5);
obst6 = (x-175).^2 + (y-25).^2 <= 4.^2;
bbRegion6 = find(obst6);
obst7 = (x-25).^2 + (y-175).^2 <= 14.^2;
bbRegion7 = find(obst7);
obst8 = (x-50).^2 + (y-175).^2 <= 4.^2;
bbRegion8 = find(obst8);
obst9 = (x-75).^2 + (y-175).^2 <= 4.^2;
bbRegion9 = find(obst9);
obst10 = (x-100).^2 + (y-175).^2 <= 4.^2;
bbRegion10 = find(obst10);
obst11 = (x-150).^2 + (y-175).^2 <= 14.^2;
bbRegion11 = find(obst11);
obst12 = (x-175).^2 + (y-175).^2 <= 4.^2;
bbRegion12 = find(obst12);
obst13 = (x-100).^2 + (y-100).^2 <= 10.^2;
bbRegion13 = find(obst13);
obst14 = (x-175).^2 + (y-100).^2 <= 4.^2;
bbRegion14 = find(obst14);
obst15 = (x-150).^2 + (y-100).^2 <= 4.^2;
bbRegion15 = find(obst15);
obst16 = (x-50).^2 + (y-100).^2 <= 4.^2;
bbRegion16 = find(obst16);
obst17 = (x-150).^2 + (y-150).^2 <= 14.^2;
bbRegion17 = find(obst17);
obst18 = (x-25).^2 + (y-125).^2 <= 4.^2;
bbRegion18= find(obst18);
obst19 = (x-100).^2 + (y-150).^2 <= 14.^2;
bbRegion19= find(obst19);
obst20 = (x-125).^2 + (y-50).^2 <= 4.^2;
bbRegion20= find(obst20);
obst21 = (x-25).^2 + (y-75).^2 <= 4.^2;
bbRegion21= find(obst21);
obst22 = (x-75).^2 + (y-50).^2 <= 4.^2;
bbRegion22= find(obst22);
obst23 = (x-175).^2 + (y-50).^2 <= 10.^2;
bbRegion23= find(obst23);
obst24 = (x-125).^2 + (y-25).^2 <= 4.^2;
bbRegion24= find(obst24);
obst25 = (x-50).^2 + (y-75).^2 <= 4.^2;
bbRegion25= find(obst25);
```

```

obst26 = (x-100).^2 + (y-75).^2 <= 10.^2;
bbRegion26= find(obst26);
obst27 = (x-125).^2 + (y-75).^2 <= 4.^2;
bbRegion27= find(obst27);
obst28 = (x-150).^2 + (y-75).^2 <= 4.^2;
bbRegion28= find(obst28);
obst29 = (x-175).^2 + (y-75).^2 <= 4.^2;
bbRegion29= find(obst29);
obst30 = (x-50).^2 + (y-125).^2 <= 4.^2;
bbRegion30= find(obst30);
obst31 = (x-75).^2 + (y-125).^2 <= 10.^2;
bbRegion31= find(obst31);
obst32 = (x-100).^2 + (y-125).^2 <= 4.^2;
bbRegion32= find(obst32);
obst33 = (x-125).^2 + (y-125).^2 <= 4.^2;
bbRegion33= find(obst33);
obst34 = (x-150).^2 + (y-125).^2 <= 4.^2;
bbRegion34= find(obst34);

obst35 = (x-25).^2 + (y-125).^2 <= 4.^2;
bbRegion35= find(obst35);
obst36 = (x-25).^2 + (y-150).^2 <= 4.^2;
bbRegion36= find(obst36);
obst37 = (x-50).^2 + (y-150).^2 <= 4.^2;
bbRegion37= find(obst37);
obst38 = (x-175).^2 + (y-150).^2 <= 4.^2;
bbRegion38= find(obst38);
obst39 = (x-25).^2 + (y-50).^2 <= 10.^2;
bbRegion39= find(obst39);
obst40 = (x-50).^2 + (y-50).^2 <= 4.^2;
bbRegion40= find(obst40);
obst41 = (x-150).^2 + (y-50).^2 <= 4.^2;
bbRegion41= find(obst40);
drho = 0.01;
delta_rho = -drho*(1-2.0*rand(lx));
%CONDICIONES INICIALES PARA LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN: (T=0) ==> TIn(i) = t(i)
for i=1:9
    fIn(i,1:lx,1:ly) = tNS(i).*(1 + delta_rho)
    gIn(i,1:lx,1:ly) = tNS(i).*(0.8 - delta_rho);
end
rho1 = reshape(sum(fIn),lx,ly)
imagesc(rho1');
colorbar
title('Fluid 1 density');

```

```

axis equal off; drawnow
% MAIN LOOP (TIME CYCLES)
Gomega1 = G/omega1;
Gomega2 = G/omega2;

for cycle = 1:maxT
    % VARIABLES MACROSCÓPICAS: rho1, rho2 densidad del fluido1 y fluido2
    %calculado según la fórmula 3.5. jx1,jx2,jy1,jy2 son los momentos %calculados según la fórmula 2.2
    rho1 = sum(fIn);
    rho2 = sum(gIn);
    jx1 = reshape ( (cxNS * reshape(fIn,9,lx*ly)), 1,lx,ly);
    jy1 = reshape ( (cyNS * reshape(fIn,9,lx*ly)), 1,lx,ly);
    jx2 = reshape ( (cxNS * reshape(gIn,9,lx*ly)), 1,lx,ly);
    jy2 = reshape ( (cyNS * reshape(gIn,9,lx*ly)), 1,lx,ly);
    %Densidad General utilizando la fórmula 3.8
    rhoTot_OMEGA = rho1*omega1 + rho2*omega2;
    %Velocidad utilizando la fórmula 3.7.
    uTotX = (jx1*omega1+jx2*omega2) ./ rhoTot_OMEGA;
    uTotY = (jy1*omega1+jy2*omega2) ./ rhoTot_OMEGA;
    uTotX = uTotX + 1e-3;
    %Cálculo de la Fuerza de Interacción entre fluidos
    %  $F(x,t) = -G_C \rho(x,t) \rho_i(x,t) \rho_j(x,t) c_i$ 
    rhoContrib1x = 0.0;
    rhoContrib2x = 0.0;
    rhoContrib1y = 0.0;
    rhoContrib2y = 0.0;
    for i=2:9
        rhoContrib1x = rhoContrib1x + circshift(rho1*tNS(i), [0,cxNS(i),cyNS(i)])*cxNS(i);
        rhoContrib1y = rhoContrib1y + circshift(rho1*tNS(i), [0,cxNS(i),cyNS(i)])*cyNS(i);
        rhoContrib2x = rhoContrib2x + circshift(rho2*tNS(i), [0,cxNS(i),cyNS(i)])*cxNS(i);
        rhoContrib2y = rhoContrib2y + circshift(rho2*tNS(i), [0,cxNS(i),cyNS(i)])*cyNS(i);
    end

    %Cálculo de la velocidad macroscópica ecuación 3.6
    uTotX1 = uTotX - G.*rhoContrib2x; %POTENTIAL CONTRIBUTION OF FLUID 2 ON 1
    uTotY1 = uTotY - G.*rhoContrib2y;

    uTotX2 = uTotX - G.*rhoContrib1x; %POTENTIAL CONTRIBUTION OF FLUID 2 ON 1
    uTotY2 = uTotY - G.*rhoContrib1y;
    %Cálculo de funciones de equilibrio ecuación 3.4
    % COLLISION STEP FLUID 1 AND 2
    for i=1:9
        cuNS1 = 3*(cxNS(i)*uTotX1+cyNS(i)*uTotY1);
        cuNS2 = 3*(cxNS(i)*uTotX2+cyNS(i)*uTotY2);
    end

```



```

fEq(i, :, :) = rho1 .* tNS(i) .* ...
              ( 1 + cuNS1 + 0.5*(cuNS1.*cuNS1) - 1.5*(uTotX1.^2+uTotY1.^2) );

gEq(i, :, :) = rho2 .* tNS(i) .* ...
              ( 1 + cuNS2 + 0.5*(cuNS2.*cuNS2) - 1.5*(uTotX2.^2+uTotY2.^2) );

%Cálculo del término de colisión ecuación 3.2
fOut(i, :, :) = fIn(i, :, :) - omega1 .* (fIn(i, :, :)-fEq(i, :, :));
gOut(i, :, :) = gIn(i, :, :) - omega2 .* (gIn(i, :, :)-gEq(i, :, :));
end

% MICROSCOPIC BOUNDARY CONDITIONS
for i=1:9
% Bounce back región
fOut(i, bbRegion) = fIn(opp(i), bbRegion);
fOut(i, bbRegion1) = fIn(opp(i), bbRegion1);
fOut(i, bbRegion2) = fIn(opp(i), bbRegion2);
fOut(i, bbRegion3) = fIn(opp(i), bbRegion3);
fOut(i, bbRegion4) = fIn(opp(i), bbRegion4);
fOut(i, bbRegion5) = fIn(opp(i), bbRegion5);
fOut(i, bbRegion6) = fIn(opp(i), bbRegion6);
fOut(i, bbRegion7) = fIn(opp(i), bbRegion7);
fOut(i, bbRegion8) = fIn(opp(i), bbRegion8);
fOut(i, bbRegion9) = fIn(opp(i), bbRegion9);
fOut(i, bbRegion10) = fIn(opp(i), bbRegion10);
fOut(i, bbRegion11) = fIn(opp(i), bbRegion11);
fOut(i, bbRegion12) = fIn(opp(i), bbRegion12);
fOut(i, bbRegion13) = fIn(opp(i), bbRegion13);
fOut(i, bbRegion14) = fIn(opp(i), bbRegion14);
fOut(i, bbRegion15) = fIn(opp(i), bbRegion15);
fOut(i, bbRegion16) = fIn(opp(i), bbRegion16);
fOut(i, bbRegion17) = fIn(opp(i), bbRegion17);
fOut(i, bbRegion18) = fIn(opp(i), bbRegion18);
fOut(i, bbRegion19) = fIn(opp(i), bbRegion19);
fOut(i, bbRegion20) = fIn(opp(i), bbRegion20);
fOut(i, bbRegion21) = fIn(opp(i), bbRegion21);
fOut(i, bbRegion22) = fIn(opp(i), bbRegion22);
fOut(i, bbRegion23) = fIn(opp(i), bbRegion23);
fOut(i, bbRegion24) = fIn(opp(i), bbRegion24);
fOut(i, bbRegion25) = fIn(opp(i), bbRegion25);
fOut(i, bbRegion26) = fIn(opp(i), bbRegion26);

```

```

fOut(i,bbRegion27) = fIn(opp(i),bbRegion27);
fOut(i,bbRegion28) = fIn(opp(i),bbRegion28);
fOut(i,bbRegion29) = fIn(opp(i),bbRegion29);
fOut(i,bbRegion30) = fIn(opp(i),bbRegion30);
fOut(i,bbRegion31) = fIn(opp(i),bbRegion31);
fOut(i,bbRegion32) = fIn(opp(i),bbRegion32);
fOut(i,bbRegion33) = fIn(opp(i),bbRegion33);
fOut(i,bbRegion34) = fIn(opp(i),bbRegion34);
fOut(i,bbRegion35) = fIn(opp(i),bbRegion35);
fOut(i,bbRegion36) = fIn(opp(i),bbRegion35);
fOut(i,bbRegion37) = fIn(opp(i),bbRegion37);
fOut(i,bbRegion38) = fIn(opp(i),bbRegion38);
fOut(i,bbRegion39) = fIn(opp(i),bbRegion39);
fOut(i,bbRegion40) = fIn(opp(i),bbRegion40);
fOut(i,bbRegion41) = fIn(opp(i),bbRegion41);
fOut(i,Regionparedy) = fIn(opp(i),Regionparedy);
fOut(i,Regionparedx) = fIn(opp(i),Regionparedx);

end

% STREAMING STEP FLUID 1 AND 2
for i=1:9
    gIn(i,,:) = circshift(gOut(i,,:), [0,cxNS(i),cyNS(i)]);
end

% STREAMING STEP FLUID 1 AND 2
for i=1:9
    fIn(i,,:) = circshift(fOut(i,,:), [0,cxNS(i),cyNS(i)]);
end

for i=1:9
% Bounce back región
gOut(i,bbRegion) = gIn(opp(i),bbRegion);
gOut(i,bbRegion1) = gIn(opp(i),bbRegion1);
gOut(i,bbRegion2) = gIn(opp(i),bbRegion2);
gOut(i,bbRegion3) = gIn(opp(i),bbRegion3);
gOut(i,bbRegion4) = gIn(opp(i),bbRegion4);
gOut(i,bbRegion5) = gIn(opp(i),bbRegion5);
gOut(i,bbRegion6) = gIn(opp(i),bbRegion6);
gOut(i,bbRegion7) = gIn(opp(i),bbRegion7);
gOut(i,bbRegion8) = gIn(opp(i),bbRegion8);
gOut(i,bbRegion9) = gIn(opp(i),bbRegion9);
gOut(i,bbRegion10) = gIn(opp(i),bbRegion10);
gOut(i,bbRegion11) = gIn(opp(i),bbRegion11);

```

```

gOut(i,bbRegion12) = gIn(opp(i),bbRegion12);
gOut(i,bbRegion13) = gIn(opp(i),bbRegion13);
gOut(i,bbRegion14) = gIn(opp(i),bbRegion14);
gOut(i,bbRegion15) = gIn(opp(i),bbRegion15);
gOut(i,bbRegion16) = gIn(opp(i),bbRegion16);
gOut(i,bbRegion17) = gIn(opp(i),bbRegion17);
gOut(i,bbRegion18) = gIn(opp(i),bbRegion18);
gOut(i,bbRegion19) = gIn(opp(i),bbRegion19);
gOut(i,bbRegion20) = gIn(opp(i),bbRegion20);
gOut(i,bbRegion21) = gIn(opp(i),bbRegion21);
gOut(i,bbRegion22) = gIn(opp(i),bbRegion22);
gOut(i,bbRegion23) = gIn(opp(i),bbRegion23);
gOut(i,bbRegion24) = gIn(opp(i),bbRegion24);
gOut(i,bbRegion25) = gIn(opp(i),bbRegion25);
gOut(i,bbRegion26) = gIn(opp(i),bbRegion26);
gOut(i,bbRegion27) = gIn(opp(i),bbRegion27);
gOut(i,bbRegion28) = gIn(opp(i),bbRegion28);
gOut(i,bbRegion29) = gIn(opp(i),bbRegion29);
gOut(i,bbRegion30) = gIn(opp(i),bbRegion30);
gOut(i,bbRegion31) = gIn(opp(i),bbRegion31);
gOut(i,bbRegion32) = gIn(opp(i),bbRegion32);
gOut(i,bbRegion33) = gIn(opp(i),bbRegion33);
gOut(i,bbRegion34) = gIn(opp(i),bbRegion34);
gOut(i,bbRegion35) = gIn(opp(i),bbRegion35);
gOut(i,bbRegion36) = gIn(opp(i),bbRegion35);
gOut(i,bbRegion37) = gIn(opp(i),bbRegion37);
gOut(i,bbRegion38) = gIn(opp(i),bbRegion38);
gOut(i,bbRegion39) = gIn(opp(i),bbRegion39);
gOut(i,bbRegion40) = gIn(opp(i),bbRegion40);
gOut(i,bbRegion41) = gIn(opp(i),bbRegion41);
gOut(i,Regionparedy) = gIn(opp(i),Regionparedy);
gOut(i,Regionparedx) = gIn(opp(i),Regionparedx);
end

% VISUALIZACION
if(mod(cycle,tPlot)==0)
    pause(0);
    rho1 = reshape(rho1,lx,ly);
    imagesc(rho1'); colorbar
    title('Fluid 1 density');
    axis equal off; drawnow
end
end

```

## METADATOS

### Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 1/6

Título	<b>SIMULACIÓN DEL FLUJO MULTIFÁSICO EN MEDIO POROSO UTILIZANDO LA TÉCNICA DE AUTÓMATA CELULAR</b>
Subtítulo	<b>Método de Lattice Boltzmann</b>

#### Autor(es)

Apellidos y Nombres	Código CVLAC / e-mail	
<b>JUAN FRANCISCO MAGO MARCANO</b>	CVLAC	<b>16.703.720 (Cédula)</b>
	e-mail	<b>magojuanf@gmail.com</b>
	e-mail	
	CVLAC	
	e-mail	
	e-mail	
	CVLAC	
	e-mail	
	e-mail	

Palabras o frases claves:

<b>Autómata Celular, Fluido, Medio Poroso.</b>

## Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 2/6

### Líneas y sublíneas de investigación:

Área	Sub área
<b>CIENCIAS</b>	<b>MATEMÁTICA</b>

### Resumen (abstract):

Se utilizó el modelo bidimensional de velocidad D2Q9 para crear un autómata celular aplicando el método de Lattice Boltzmann a dos fluidos inmiscibles, agua y aceite y simular el proceso de separación de fases de ambos fluidos. Con la introducción de un medio poroso, se pudo simular la evolución de fluidos monofásicos en este medio y observar su comportamiento con el paso del tiempo. Básicamente la dinámica se basa en los procesos de colisión y propagación entre partículas. Se obtuvo una generalización de este algoritmo para flujos multifásico con múltiples componentes. Parte de estas simulaciones, constituyen un punto de partida para el análisis de las emulsiones, sobre todo en las emulsiones que se forman en los pozos de petróleo y afectan la producción.

## Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 3/6

### Contribuidores:

Apellidos y Nombres	ROL / Código CVLAC / e-mail	
<b>MARÍA MALAVE</b>	ROL	C <input type="checkbox"/> A <input type="checkbox"/> S <input checked="" type="checkbox"/> T <input type="checkbox"/> U <input type="checkbox"/> JU <input type="checkbox"/>
	CVLAC	<b>16313110</b>
	e-mail	<b>Dayenu25@gmail.com</b>
	e-mail	
<b>NEY LUIGGI</b>	ROL	C <input type="checkbox"/> A <input type="checkbox"/> S <input type="checkbox"/> T <input type="checkbox"/> U <input type="checkbox"/> JU <input checked="" type="checkbox"/>
	CVLAC	<b>4029742</b>
	e-mail	<b>nnlggi51@gmail.com</b>
	e-mail	
<b>JULIO MARÍN</b>	ROL	C <input type="checkbox"/> A <input type="checkbox"/> S <input type="checkbox"/> T <input type="checkbox"/> U <input type="checkbox"/> JU <input checked="" type="checkbox"/>
	CVLAC	<b>9427575</b>
	e-mail	<b>jjmarinv@gmail.com</b>
	e-mail	

Fecha de discusión y aprobación:

Año	Mes	Día
2021	12	9

Lenguaje: SPA \_\_\_\_\_

## Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 4/6

### Archivo(s):

Nombre de archivo	Tipo MIME
<b>Tesis_JM.doc</b>	<b>Application/word</b>

Alcance:

Espacial: \_\_\_\_\_ (Opcional)

Temporal: \_\_\_\_\_ (Opcional)

**Título o Grado asociado con el trabajo:**

**MAGISTER SCIENTIARUM EN MATEMÁTICAS**

---

**Nivel Asociado con el Trabajo: Magister(a)**

---

**Área de Estudio: MAESTRÍA EN MATEMÁTICAS**

---

**Institución(es) que garantiza(n) el Título o grado:** Universidad de Oriente

---

---

---

# Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 5/6



UNIVERSIDAD DE ORIENTE  
CONSEJO UNIVERSITARIO  
RECTORADO

CU N° 0975

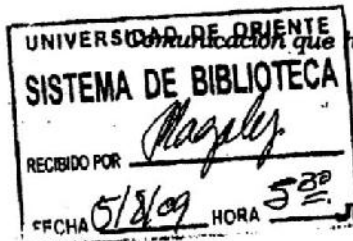
Cumaná, 04 AGO 2009

Ciudadano  
**Prof. JESÚS MARTÍNEZ YÉPEZ**  
Vicerrector Académico  
Universidad de Oriente  
Su Despacho

Estimado Profesor Martínez:

Cumplo en notificarle que el Consejo Universitario, en Reunión Ordinaria celebrada en Centro de Convenciones de Cantaura, los días 28 y 29 de julio de 2009, conoció el punto de agenda **"SOLICITUD DE AUTORIZACIÓN PARA PUBLICAR TODA LA PRODUCCIÓN INTELECTUAL DE LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE EN EL REPOSITORIO INSTITUCIONAL DE LA UDO, SEGÚN VRAC N° 696/2009"**.

Leído el oficio SIBI - 139/2009 de fecha 09-07-2009, suscrita por el Dr. Abul K. Bashirullah, Director de Bibliotecas, este Cuerpo Colegiado decidió, por unanimidad, autorizar la publicación de toda la producción intelectual de la Universidad de Oriente en el Repositorio en cuestión.



Comunicación que hago a usted a los fines consiguientes.

Cordialmente,

JUAN A. BOLAÑOS CUNDELO  
Secretario



C.C: Rectora, Vicerrectora Administrativa, Decanos de los Núcleos, Coordinador General de Administración, Director de Personal, Dirección de Finanzas, Dirección de Presupuesto, Contraloría Interna, Consultoría Jurídica, Director de Bibliotecas, Dirección de Publicaciones, Dirección de Computación, Coordinación de Teleinformática, Coordinación General de Postgrado.

JABC/YGC/marija



## Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso- 6/6

Artículo 41 del REGLAMENTO DE TRABAJO DE PREGRADO (vigente a partir del II Semestre 2009, según comunicación CU-034-2009) : “los Trabajos de Grado son de la exclusiva propiedad de la Universidad de Oriente, y sólo podrán ser utilizados para otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, quien deberá participarlo previamente al Consejo Universitario para su autorización”.



---

**JUAN MAGO**  
**AUTOR**



**FIRMA DEL ASESOR**

---

**PROF: MARÍA MALAVE**  
**ASESOR**