

Métodos de Simulación de Fluidos aplicados a Lagunas y Embalses

Ferrero-Losada, Samuel.^{a,*}, López-Orozco, José Antonio.^a, Besada-Portas, Eva.^a, Carazo-Barbero, Gonzalo.^b, Risco-Martín, José Luis.^b

^aDepartamento de Arquitectura de Computadores y Automática, Universidad Complutense de Madrid, Plaza Ciencias, nº1, 28040, Madrid España.

^bDepartamento de Arquitectura de Computadores y Automática, Universidad Complutense de Madrid, C/ Profesor José García Santesmases, nº9, 1, 28040, Madrid España.

To cite this article: Ferrero-Losada, S., López-Orozco, J.A., Besada-Portas, E., Carazo-Barbero, G., Risco-Martín, J. L. 2023. Fluid simulation methods applied to lakes and reservoirs. XLIV Jornadas de Automática, 393-398 <https://doi.org/10.17979/spudc.9788497498609.393>

Resumen

Existe una gran variedad de métodos para simular un fluido incompresible como el agua. Estos se pueden clasificar en diferentes tipos según utilicen partículas, una malla o una combinación de ambos como soporte de la simulación; o según el enfoque en que se aborde la incompresibilidad del fluido (débilmente compresible o realmente incompresible). Con esta variedad de opciones, es necesario comparar los métodos para asegurar la utilización del más adecuado, considerando las ventajas y desventajas de cada uno. Por ello, se analizan de manera general algunos de estos métodos con un escenario específico en mente: un lago con una entrada y una salida de agua en régimen estacionario. El objetivo es discernir cuál de estos métodos es mejor para llevar a cabo dicha simulación, o tiene el menor número de problemas en cuanto a las condiciones de contorno, aplicación de fuerzas externas, o inestabilidades numéricas. Finalmente, se presenta un caso de prueba sencillo empleando la opción considerada más adecuada. Los resultados de este artículo se emplearán en futuros trabajos en el estudio de blooms de cianobacterias en dichos cuerpos acuáticos.

Palabras clave: Hidroinformática, Modelado e identificación de sistemas ambientales, Administración de Recursos Naturales.

Fluid simulation methods applied to lakes and reservoirs.

Abstract

There are various methods to simulate an incompressible fluid such as water. These can be grouped into different types according to their simulation framework (grid-based, particle-based, or mixed) or how they approach the fluid's incompressibility (weakly compressible or truly incompressible). Facing such variety to choose from, a comparison between them becomes a must to ensure the method used in the simulation scenario is adequate, considering their advantages and disadvantages in the different aspects of the simulation. A general analysis of some of these methods will be done with a specific scenario in mind: a stationary lake with one water entrance and one exit. The aim will be to discern which of the studied methods is better suited to carry out this simulation with the minor problems regarding boundary conditions, external forces treatment, or numerical instabilities. Finally, a simple test case for the more adequate method is presented. This work will be ultimately used in the study of lake cyanobacteria blooms.

Keywords: Hydroinformatics, Modeling and identification of environmental systems, Natural Resources management.

1. Introducción

Cuando abordamos un problema de dinámica de fluidos mediante simulación, una de las decisiones más relevantes es la elección del método. Esto se debe a que definirá no solo la forma en que el fluido se representará en el estudio, sino también

las condiciones de contorno a implementar, las magnitudes involucradas en la simulación y el tipo de análisis que se podrán llevar a cabo con los resultados. Debemos tener en cuenta que existen varios tipos de fluidos, con distintas propiedades físicas, que deben ser precisamente plasmadas para emular adecuada-

* Autor para correspondencia: saferr03@ucm.es

mente su comportamiento. Estas propiedades suelen depender de factores internos y ambientales. Por ello, se debe comprender detalladamente dichas propiedades y comportamientos indispensables en la simulación para lograr el nivel de realismo deseado. Además, es importante considerar las posibles situaciones que puedan surgir durante la computación y las limitaciones de ciertos métodos para simular adecuadamente.

Actualmente existen varios programas comerciales, como COMSOL™ (Multiphysics 1998), y de código abierto, como OpenFOAM (Weller et al. 1998), con la capacidad para simular flujos turbulentos. Por lo tanto, uno podría preguntarse si es realmente necesario implementar un simulador propio. La necesidad surge porque la mayoría de estos programas requieren una gran cantidad de parámetros de entrada para funcionar, lo que los hace difíciles de sintonizar. Además, en muchos casos proporcionan resultados más precisos de lo necesario, lo que aumenta el coste computacional y el tiempo de ejecución innecesariamente. En el ámbito de los simuladores numéricos hidrodinámicos de cuerpos acuáticos (p.e. Delft3D, Roelvink and Van Banning 1995), el problema es aún mayor. Estos tienden a incorporar efectos termodinámicos y atmosféricos, lo que hace que un método inicialmente sencillo sea demasiado complicado y dificulte mucho la obtención de información para otros aspectos del problema, como la optimización de rutas y la predicción de comportamientos. Debido a esta situación, se inicia este proceso de análisis con el objetivo de desarrollar un método más fácil de parametrizar y con un menor tiempo de ejecución que los mencionados anteriormente.

Nuestro objetivo es estudiar el comportamiento dinámico de cuerpos de agua semejantes a lagos o embalses, donde el régimen turbulento es predominante, limitándonos a las corrientes estacionarias. Este tipo de movimiento se caracteriza por una variación caótica en la presión y velocidad de flujo, lo que complica significativamente la simulación y restringe los métodos que se pueden utilizar para llevarla a cabo. Cabe destacar que el agua es un fluido incompresible en la mayoría de los casos, lo que debe ser considerado al momento de seleccionar el método apropiado para este estudio. Aunque la elección del método depende del régimen de movimiento, la incompresibilidad sólo establece una condición a mantener durante toda la simulación que modifica principalmente el modelo de ecuaciones a utilizar, introduciendo una relación aún más restrictiva entre presión y velocidad.

El objetivo de obtener la velocidad del flujo estacionario del agua es para utilizarlo como base para determinar el movimiento de las cianobacterias en el cuerpo de agua en trabajos futuros. Las cianobacterias, también conocidas como algas verde-azuladas, son organismos unicelulares capaces de realizar la fotosíntesis, fijar CO₂ y generar O₂. Algunas especies producen cianotoxinas que pueden ser peligrosas para la salud cuando se reproducen en exceso creando afloraciones (llamadas Blooms en inglés). Estas cianobacterias se mueven mediante factores biológicos (con unas vesículas que se hinchan y les proporcionan flotabilidad) y externos (debido a corrientes y viento). Como no siempre son visibles en la superficie, es importante prever la aparición de un bloom en un punto determinado para anticipar posibles riesgos. Por lo tanto, este trabajo implica la elección de un método adecuado para analizar, comparar y simular el flujo de un cuerpo de agua, con el objetivo de obtener

resultados con el menor tiempo y parámetros necesarios aplicables en la predicción del desplazamiento de las cianobacterias.

El esquema que se seguirá es el siguiente: en la sección 2 se presentan las principales opciones disponibles y los candidatos seleccionados en cuanto al tipo de estructura que soporta la simulación, analizando de forma crítica las características positivas y negativas de los métodos mencionados; la sección 3 presenta un ejemplo con el método seleccionado. Por último, se comentan las conclusiones extraídas de este estudio.

2. Modelos de simulación de fluidos

A continuación se describen tres opciones de simulación: el método de Navier-Stokes promediado por Reynolds (RANS, Reynolds 1895) discretizado a través de volúmenes finitos (FVM), el método Lattice-Boltzmann (LBM, Chen and Doolen 1998) y los métodos de Smoothed-Particle Hydrodynamics (SPH, Gingold and Monaghan 1977) incompresibles.

2.1. Navier-Stokes promediado por Reynolds y FMV

El modelo de Navier-Stokes constituye el enfoque más antiguo y común para abordar la simulación de flujos turbulentos. El método RANS somete este modelo a una descomposición de Reynolds: en una componente media (promediada en el tiempo si el flujo de interés es estacionario) y en otra fluctuante. De esta forma, para calcular cantidades de interés tales como el campo de velocidades o presiones (con baja resolución), coeficientes de fuerzas sobre superficies, etc., sería suficiente con estudiar la primera de ellas. Sin embargo, esta descomposición añade un término a las ecuaciones relativo a los estreses que sufre el flujo medio debido a la componente fluctuante, conocido como estrés de Reynolds. Este término no es lineal y requiere un modelado adicional para poder resolver el sistema de manera rápida y computacionalmente eficiente. A raíz de ello, numerosos modelos de turbulencia han sido desarrollados con el objetivo de cubrir distintas casuísticas, clasificándose de acuerdo al número de ecuaciones adicionales requeridas para modelar el efecto de la turbulencia. Además, cada uno añade diferentes limitaciones a las soluciones debido a las aproximaciones y suposiciones en las que se basa para simplificar el término, de manera que para ciertas aplicaciones puede ser necesario emplear modelos más complejos que en otras.

Si bien RANS solo hace referencia al tratamiento que se le da a las ecuaciones de Navier-Stokes para construir un modelo dinámico del fluido, este método siempre se apoya en mallas de puntos, elementos o volúmenes para llevar a cabo la simulación en el espacio discreto. De todas estas opciones la más frecuentemente utilizada en dinámica de fluidos es la discretización en Volúmenes Finitos (FVM) (Kolditz, 2002), que consiste en transformar las ecuaciones diferenciales (en términos de volúmenes infinitesimales) en relaciones algebraicas discretas que actúan sobre volúmenes finitos (o celdas). Para esto, primero, es necesario discretizar el espacio en elementos no superpuestos, sobre los que se integrarán las ecuaciones diferenciales para realizar la transformación. De esta forma, algunos términos de las ecuaciones, como, por ejemplo, las velocidades, se convierten en flujos a través de las paredes de los elementos de volumen (de modo que la velocidad saliente de un elemento es

la que entra en el contiguo). Mientras que otros, como la densidad, se evalúan en el centroide de cada volumen. Este esquema facilita en gran medida la implementación de condiciones de contorno sencillas de una manera no invasiva, ya que se puede alterar directamente el comportamiento de las fronteras entre elementos. Todas estas cualidades hacen que la discretización por volúmenes finitos funcione muy bien a la hora de simular movimientos de fluidos en una malla, ya que la conservación de transferencia de masa, calor o flujo está asegurada por su propia naturaleza. Por otro lado, el uso de este tipo de mallas cuenta con desventajas a la hora de implementar condiciones de contorno más avanzadas. En casos con geometrías complicadas, contornos o fronteras móviles, y/o superficies libres, la creación de una malla adecuada se convierte en un proceso difícil y costoso en cuanto a tiempo y recursos se refiere.

Dado que este método es el más comúnmente utilizado existe una gran variedad de ejemplos de uso. Además, debido al gran número de modelos de turbulencia desarrollados, sobre los que se sigue trabajando y mejorando continuamente, las publicaciones tienden a hacer referencia a los modelos empleados. Entre los principales se encuentran el modelo $K-\epsilon$ (Jones and Launder, 1972), de dos ecuaciones y el más común; el $K-\omega$ (Wilcox, 2008), similar al anterior pero empleando un parámetro distinto para la disipación de las turbulencias; y el Menter's Shear Stress Transport o SST (Menter, 1994), que emplea $K-\epsilon$ en las zonas alejadas de los contornos y $K-\omega$ cerca de ellos.

2.2. Método de Lattice-Boltzmann

El método de Lattice-Boltzmann trata el fluido como una malla de densidades sobre la que se simulan partículas ficticias sometidas a procesos de difusión y colisión alternativamente. Estos pasos ejecutados de forma recurrente hacen evolucionar las densidades de cada nodo de la malla. Estas densidades tienen distintas componentes dependiendo del tipo de malla que se emplee, pues, a diferencia de lo que sucede en el método anterior, son las conexiones entre nodos las que propagan la evolución, en lugar de las caras de cada celda. De manera que el número de conexiones entre una partícula y sus vecinas influye en gran manera en el desarrollo de la simulación, ya que regula directamente la cantidad y el tipo de colisiones posibles en cada nodo, a la vez que puede favorecer un tipo de comportamiento difusivo frente a otros. Dada su importancia, existen diversos estudios acerca de los efectos de distintas mallas sobre la simulación (Espinoza-Andaluz et al., 2019).

El proceso de difusión en este método consiste en el movimiento instantáneo de las partículas a través de las conexiones de la malla, de forma que a cada paso de tiempo el desplazamiento de cada partícula es fijo, determinado por la longitud de la conexión recorrida. Por otro lado, las colisiones de las partículas en los nodos se rigen por el modelo Bhatnagar-Gross-Krook (BGK, Bhatnagar et al. 1954), que define la relajación vía colisiones a un estado de equilibrio en densidad para cada una de las conexiones de la malla, teniendo en cuenta la densidad en los nodos conectados. Este proceso está regulado por un parámetro temporal, que directamente determina (o está determinado por) la viscosidad cinemática del fluido simulado.

Con este esquema, se evita tener que lidiar con ecuaciones complicadas como Navier-Stokes, optando por emplear modelos microscópicos y ecuaciones cinemáticas más sencillas que

aglutinen la física de los procesos que se dan en la micro y meoesescalas, de manera que los comportamientos promedio macroscópicos obedezcan las ecuaciones deseadas. Además, este método evita también el tener que seguir a cada partícula por separado, como ocurre en las simulaciones de dinámica molecular. Por lo tanto, con una mezcla de mallas y partículas (ficticias) se consigue eliminar desventajas propias de métodos que emplean solo uno de estos elementos.

Entre las principales ventajas de este método se encuentra una gran facilidad para implementar geometrías complejas (tales como medios porosos), debido a la estructura de nodos y conexiones sobre las cuales se pueden imponer condiciones directamente. En cuanto a las fronteras multifase, este método permite realizar simulaciones con gran resolución, en escenarios donde intervienen burbujas (gas en medio líquido) o gotículas (líquido en medio gaseoso), por ejemplo. Por otro lado, en lo que se refiere al rendimiento, desde sus inicios su diseño ha estado enfocado para ser ejecutado de manera lo más rápida posible en arquitecturas paralelas.

El método de Lattice-Boltzmann está en constante desarrollo desde su creación. A lo largo del tiempo se ha ido puliendo y mejorando para afianzarse como una técnica prometedora en el ámbito de la simulación de dinámica de fluidos. En el pasado se han presentado gran variedad de modelos con LBM para diferentes tipos de flujos y escenarios (p. ej. Amati et al. 1997 y Flekkøy and Herrmann 1993). Sin embargo, aún no están completamente testados y verificados. En el caso de los modelos multifase, este método destaca a la hora de tratar problemas isotérmicos. Aún con ello, el desarrollo de modelos térmicos más fiables es una de las principales vías de estudio, ya que abriría el camino para simular problemas con transferencias de calor además de los fenómenos de superficie. (Chen and Doolen, 1998)

2.3. Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

SPH es un método inicialmente desarrollado para problemas de astrofísica (Gingold and Monaghan, 1977), aunque actualmente su uso abarca muchos más campos de investigación. En el ámbito de la simulación de fluidos ha ido ganando importancia en los últimos años, presentándose como una alternativa útil a los métodos convencionales. A diferencia de estos, SPH no necesita discretizar el espacio con una malla para calcular derivadas espaciales. En su lugar, estas se obtienen por diferenciación analítica de fórmulas de interpolación, de manera que cualquier función puede ser expresada en términos de su valor en puntos desordenados del espacio, representados por las partículas. En este caso, éstas no son elementos puntuales, sino que interactúan entre sí a través de lo que se denomina función núcleo (*kernel function*), cuyo radio de efecto viene dado por un parámetro típicamente representado por h . Estas funciones deben estar normalizadas a la unidad y tender a la delta de Dirac cuando h tiende a 0. Con ellas se puede obtener el valor de cualquier magnitud física para una partícula dada. Basta con sumar los valores de dicha magnitud en las partículas, A_j , pesadas con la función núcleo, $W(\vec{r}_{ij}^*)$, y su masa, m_j (1). Generalmente, suelen usarse como funciones núcleo la función gaussiana o un spline cúbico (o incluso de quinto orden).

$$A(\vec{r}_i) = \sum_j m_j A_j(\vec{r}_j) W(\vec{r}_{ij}^*) \quad (1)$$

El hecho de que este método no emplee mallas le confiere una serie de ventajas respecto al resto, comenzando por la simplificación en la implementación, al no tener que generar la malla. Además, el coste computacional por número de partículas es significativamente menor que el coste para un sistema con celdas; siempre y cuando el parámetro de interés esté relacionado directamente con la densidad del fluido. Esto se debe a que al emplear partículas, la resolución espacial está directamente relacionada con la densidad de fluido. Sin embargo, en los casos en los que basta con una malla uniforme, los métodos de celdas tienen una eficiencia mayor, ya que harán falta muchas partículas para llenar volúmenes en los que no es necesaria tanta resolución. Por otro lado, en lo relativo a los escenarios preferidos para este método, SPH se presenta como una solución ideal para tratar problemas dominados por dinámicas complejas en las fronteras, tales como flujos con superficies libres o fronteras móviles, situaciones en las que la elasticidad de la malla juega en contra del interés del usuario. Sin embargo, cabe destacar que se ha llegado a afirmar que “la implementación de condiciones de contorno es ciertamente uno de los puntos técnicos más difíciles del método SPH” (Shadloo et al., 2016), debido a que las partículas en la vecindad de las fronteras cambian con el tiempo.

Este método es relativamente nuevo en el campo de la dinámica de fluidos y aún existen ciertas cuestiones que es necesario pulir (p. ej.: paso de tiempo muy pequeño, inestabilidades numéricas,...). Sin embargo existen numerosas líneas de trabajo y publicaciones recientes que tratan de incrementar la eficiencia, precisión y áreas de aplicación de esta metodología, p. ej. Mintu et al. 2021, Shi et al. 2019.

2.4. Análisis Comparativo

En la Tabla 1 se sintetizan las características señaladas en los métodos anteriores, indicando positivas con un +, y negativas con un -. A continuación se discutirá cada uno de estos métodos teniendo en cuenta estas ventajas y desventajas, desde el punto de vista de la simulación de la dinámica de un cuerpo de agua natural.

Como se puede ver en la tabla 1, las tres opciones presentadas tienen buenas cualidades para llevar a cabo la simulación deseada. Sin embargo, hay que recordar que ésta se sitúa en el contexto del análisis dinámico de embalses y lagunas, y que es un paso inicial en el desarrollo de un modelo de cuerpo de agua lenticular que permita al resto de modelos involucrados en el proyecto realizar predicciones relacionadas con la aparición de *blooms* de cianobacterias. Por tanto, de cara a la elección de una metodología de simulación, se dará más importancia a unos aspectos que a otros de acuerdo a los objetivos futuros para dicho modelo dentro del proyecto.

En lo que respecta a la simulación de un lago, una de las problemáticas que pueden surgir es la geometría de la cuenca y la implementación de entradas y salidas de caudal. Dado que en nuestro caso se trabaja con distintos embalses y lagunas, con perfiles batimétricos dispares, será de gran importancia garantizar que las condiciones de contorno no resultan un problema a la hora de implementarse, y, en la medida de lo posible, que sean fáciles de implementar y cambiar entre configuraciones. Por ello, LBM y SPH se presentan, a priori, como mejores candidatas para la tarea, ya que tienden a ser más versátiles en

cuanto a la geometría del escenario que los métodos más clásicos. Por otro lado, de cara a trabajos futuros, es de interés la capacidad del candidato de realizar simulaciones multifase, ya que la estratificación de temperaturas en este tipo de cuerpos de agua es de gran importancia a la hora de estudiar la posición de las cianobacterias. Analizando las capacidades de LBM y SPH en este aspecto, se llega a la conclusión de que, si bien LBM es un sistema válido para este tipo de escenarios, cuenta con ciertas carencias en el apartado del modelado termodinámico; en el caso de SPH, el hecho de que la interfase quede determinada de manera orgánica por la naturaleza de la simulación, y que la estratificación esté estrechamente relacionada con la densidad hacen que este sea la opción elegida para ser desarrollada en la siguiente sección.

3. Caso de uso

Este ejemplo sencillo muestra, como prueba de concepto, lo que se pretende conseguir finalmente con esta línea de trabajo. Se emulará el efecto del viento sobre las corrientes de un cuerpo de agua con geometría simple utilizando un método SPH.

3.1. Modelo matemático

El conjunto de ecuaciones que se emplean a la hora de realizar el ejemplo en cuestión está inspirado por el trabajo de Rouzbahani and Hejranfar 2017, donde se emplea el método desarrollado por Chorin (Chorin, 1967) para imponer la condición de incompresibilidad en combinación con la versión lagrangiana adimensional de la ecuación de Navier-Stokes (ecuación 2). Las distintas magnitudes se han dividido por unas cantidades de referencia para hacerlas adimensionales (3).

$$\frac{D\vec{V}}{Dt} = -\vec{\nabla}p + \frac{1}{Re}\nabla^2\vec{V} + \frac{1}{Fr^2}\vec{f} \quad (2)$$

$$t = \frac{t^*}{L_{ref}/V_{ref}}, \quad x_i = \frac{x_i^*}{L_{ref}}, \quad V_i = \frac{V_i^*}{V_{ref}} \quad (3)$$

$$p = \frac{p^*}{\rho V_{ref}^2}, \quad \vec{f} = \frac{\vec{f}^*}{g_{ref}}$$

El método de Chorin introduce una compresibilidad artificial a través de la ecuación de continuidad, a la que se le añade un término de variación de densidad para luego sustituirla por una presión a través de la relación (4), en la que β usualmente tiene un valor entre 1 y 10. Dando la expresión (5). Nótese que esta expresión usa un tiempo artificial, τ , en lugar del real, t .

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0, \quad \bar{\rho} = \beta^2 \cdot p \quad (4)$$

$$\frac{1}{\beta^2} \frac{\partial p}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (5)$$

Pasando esta expresión a forma lagrangiana se obtiene (6).

$$\frac{Dp}{D\tau} = (\vec{V} \cdot \nabla)p - \beta^2 \nabla \cdot \vec{V} \quad (6)$$

En el trabajo de Rouzbahani and Hejranfar se propone un esquema de paso de tiempo dual implícito, con el cual es posible realizar simulaciones temporalmente precisas. Este esquema añade una derivada parcial de la velocidad respecto al tiempo artificial en el primer miembro de la ecuación (2). De manera

Tabla 1: Comparación de las ventajas (+) y desventajas (-) de RANS-FVM, LBM y SPH.

RANS-FVM	Lattice-Boltzmann	SPH
+ El más común. + Versátil (modelos de turbulencias). + Fácil cond. contorno sencillas. + Conservación de masa, \mathbf{v} y calor. + Simulaciones estables. - Coste mayor (métrica $\propto \rho$). - Elección de modelo de adecuado. - Estrés de Reynolds. - Geometrías complejas.	+ Algoritmo sencillo (2 pasos). + Variedad de mallas. + Geometrías complejas (estáticas). + Diseño eficiente para arq. paralelas. + Multi-fase fácil (isotérmicos) + Meso- y micro-escalas. - Mayor influencia de la malla. - Modelos requieren más tests. - Sin modelo térmico consistente.	+ Sin malla (simple y paralelizable). + Conservación de m. + Fronteras complejas, dinámicas. + Coste menor (métrica relacionada con ρ). + Interfases por construcción. + Resolución espacial \propto dens. de partículas. - Relativamente nuevo en el campo. - Peor en casos con geometría simple. - Implementar cond. de contorno.

que la expresión de las velocidades queda como:

$$\frac{D\vec{V}}{D\tau} + \frac{D\vec{V}}{Dt} = (\vec{V} \cdot \vec{\nabla})\vec{V} - \vec{\nabla}p + \frac{1}{Re}\nabla^2\vec{V} + \frac{1}{Fr^2}\vec{f} \quad (7)$$

Sin embargo, dado que el estudio dinámico de los afloramientos se realiza a lo largo de varios días, nosotros nos centraremos en la parte estacionaria, que permite obtener las corrientes principales que afectan a dicha dinámica. Por ello, basta escoger un paso de tiempo real suficientemente grande para despreciar la derivada respecto a t de la expresión anterior.

Una vez establecido el modelo dinámico, vemos cómo implementar la metodología SPH. Partiendo de que las magnitudes que intervienen en las expresiones anteriores pueden expresarse por (1), y que a la notación actual se traduce como (8), donde ΔV_j es el volumen de cada partícula dentro del radio de influencia de la función W , se obtienen los gradientes por (9), y las divergencias de manera similar, cambiando la última multiplicación por un producto escalar.

$$A_i \approx \sum_j \Delta V_j (A_i - A_j) W(r_{ij}) \quad (8)$$

$$\nabla A_i \approx \sum_j \Delta V_j (A_i \mp A_j) \nabla W(r_{ij}) \quad (9)$$

En cuanto a la función núcleo, se ha empleado el siguiente spline cúbico para dos dimensiones:

$$W(r_{ij}, h) = \frac{15}{7\pi h^2} \begin{cases} \frac{2}{3} - \left(\frac{r_{ij}}{h}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{r_{ij}}{h}\right)^3 & 0 \leq r_{ij} < h \\ \frac{1}{6}\left(2 - \frac{r_{ij}}{h}\right)^3 & h \leq r_{ij} < 2h \\ 0 & r_{ij} \leq 2h \end{cases} \quad (10)$$

Finalmente, con todos estos elementos, y dando el mismo valor de $\nabla\vec{V}$ para todas las partículas, se obtienen las siguientes ecuaciones de evolución para la presión y la velocidad:

$$\frac{Dp_i}{D\tau} = \vec{v}_i \cdot \nabla V \sum_j (p_i + p_j) \vec{\nabla} W(\vec{r}_{ij}) - \beta^2 (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \vec{\nabla} W(\vec{r}_{ij}) \quad (11)$$

$$\frac{D\vec{V}_i}{D\tau} = \nabla V \vec{V}_i \sum_j (\vec{v}_i + \vec{v}_j)^T \vec{\nabla} W(\vec{r}_{ij}) - \nabla V \sum_j \left(p_i + p_j + R(|p_i| + |p_j|) \frac{W(r_{ij})}{W(\vec{r}_{ij})} \right) \vec{\nabla} W(\vec{r}_{ij}) + \quad (12)$$

$$\frac{8\nabla V}{Re} \sum_j \frac{\vec{\nabla} W(r_{ij}) \cdot \vec{r}_{ij}}{\|r_{ij}\|^2} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) + \frac{1}{Fr^2} \vec{f}$$

Estas ecuaciones tienen ciertas diferencias con el trabajo de referencia. Esto se debe a que se han detectado errores en ciertos términos y que han sido subsanados a partir de la consulta en (Lee et al. 2008 y Shao and Lo 2003). Además, también se ha añadido una fuerza de repulsión por presiones en la ecuación 12 para evitar algunos problemas debidos a la función núcleo que hemos escogido (ver Monaghan 2000). La intensidad de esta fuerza se regula a través del parámetro R .

Al ejecutar la simulación se espera que, a medida que los parámetros evolucionan, ciertos términos de variación de presión y velocidad se hagan nulos, o casi nulos, alcanzado así el estado pseudo-estacionario, al quedar solo los términos con el operador $(\nabla \cdot \vec{V})$ para regir el movimiento incompresible.

En lo que se refiere a las condiciones de contorno, las fronteras sólidas del escenario estarán definidas por capas de partículas fijas (para imponer $\vec{V} = 0$) y su presión vendrá determinada por las de la capa interior, que está en contacto con el fluido. Las presiones de esta capa se replicarán en el resto de la pared en dirección perpendicular a la superficie interior, de manera que se garantice la condición de presión constante en esa dirección (ver Lee et al. 2008, Figura 1).

3.2. Simulación y Resultados

Sin pérdida de generalidad se puede realizar la simulación de fluidos en 2D, lo que permite observar más fácilmente el comportamiento del método escogido y reducir su tiempo de cómputo. El escenario a simular consta de una caja cuadrada de lado unidad que contiene 40x40 partículas equiespaciadas. La pared superior emulará un flujo de viento constante (V_{pared}) sobre la superficie del agua en el sentido positivo del eje X. Inicialmente el campo de presiones será constante en todo el espacio (incluidas las paredes) con un valor de p_0 . En la Tabla 2 se muestran todos los parámetros empleados.

Tabla 2: Parámetros de la simulación.

L_{ref}	V_{ref}	g_{ref}	δ	$d\tau$	β
2	1	9.8	1/40	0.001	3
Fr	V_{pared}	p_0	h	Re	R
0.226	0.5	0.8	$2,5\delta$	400	$3 \cdot 10^{-5}$

En la Figura 1 se puede observar el campo de velocidades resultante de correr la simulación durante más de una hora. Con este simple ejemplo se puede observar que se obtiene un flujo

rotatorio que puede hacer sumergirse y emerger a las posibles cianobacterias (sin tener en cuenta otros factores). Además, la aparición del vórtice central indica claramente el correcto funcionamiento de la dinámica del fluido.

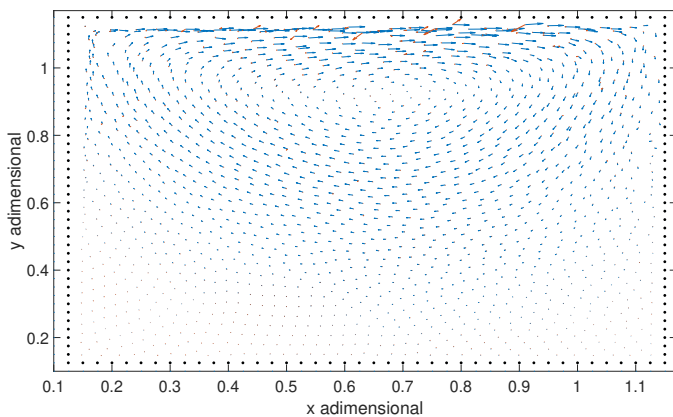


Figura 1: Campo de velocidades. Azul: vel. adimensionales. Naranja: variación.

Sin embargo, los resultados muestran también algunos fallos que presenta el modelo. Las flechas naranjas ($D\vec{V}/D\tau$) de la figura anterior indican que el sistema aún no ha convergido al estado pseudo-estacionario ya que las variaciones de velocidad son demasiado grandes. Lo mismo ocurre con la presión, la cual mantiene niveles razonables tendiendo a la estratificación, pero sin conseguir alcanzar el pseudo-equilibrio esperado.

4. Conclusiones y trabajo futuro

El análisis realizado señala que el modelo SPH puede ser adecuado para modelar corrientes turbulentas en lagos y embalses en apoyo al estudio del movimiento de cianobacterias. Se ha creado un modelo básico y simplificado de una situación real que ha demostrado un buen comportamiento. Sin embargo, existen elementos en el modelo o en su implementación que necesitan revisión a fin de corregir y prevenir eventos que impiden la convergencia del sistema a un estado de fluido incompresible.

Además de la revisión de este ejemplo, la línea de investigación avanza gradualmente hacia un modelo más complejo y realista, introduciendo la tercera dimensión, entradas y salidas de agua, geometrías más complejas, vientos variables, etc. Todo ello con el fin de obtener un modelo sencillo pero completo de la dinámica general de un embalse y poder combinarlo con el ciclo biológico de las cianobacterias.

Agradecimientos

Este trabajo está siendo realizado gracias al apoyo de los proyectos IA-GES-BLOOM-CM (Y2020/TCS-6420) del programa de Proyectos Sinérgicos de la Comunidad Autónoma de Madrid (CAM); SMART-BLOOMS (TED2021-130123B-I00) de los programas MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y European Union NextGenerationEU/PRTR; y el Programa Investigo de la CAM cofinanciado por el Fondo Social Europeo a través del Programa Operativo de Empleo Juvenil.

Referencias

Amati, G., Succi, S., Benzi, R., 1997. Turbulent channel flow simulations using a coarse-grained extension of the lattice boltzmann method. *Fluid Dynamics*

Research 19 (5), 289–302.

DOI: 10.1016/S0169-5983(96)00026-3

Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., Krook, M., May 1954. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.* 94, 511–525.

DOI: 10.1103/PhysRev.94.511

Chen, S., Doolen, G. D., 1998. Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 30 (1), 329–364.

DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.329

Chorin, A. J., 1967. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics* 2 (1), 12–26.

DOI: 10.1016/0021-9991(67)90037-X

Espinoza-Andaluz, M., Moyón, A., Andersson, M., 2019. A comparative study between d2q9 and d2q5 lattice boltzmann scheme for mass transport phenomena in porous media. *Computers Mathematics with Applications* 78 (9), 2886–2896.

DOI: 10.1016/j.camwa.2019.02.012

Flekkøy, E., Herrmann, H., 1993. Lattice boltzmann models for complex fluids. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 199 (1), 1–11.

DOI: 10.1016/0378-4371(93)90091-H

Gingold, R. A., Monaghan, J. J., 12 1977. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 181 (3), 375–389.

DOI: 10.1093/mnras/181.3.375

Jones, W., Launder, B., 1972. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (2), 301–314.

DOI: 10.1016/0017-9310(72)90076-2

Kolditz, O., 2002. *Finite Volume Method*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, pp. 173–190.

DOI: 10.1007/978-3-662-04761-3_8

Lee, E. S., Moulinec, C., Xu, R., Violeau, D., Laurence, D., Stansby, P., sep 2008. Comparisons of weakly compressible and truly incompressible algorithms for the sph mesh free particle method 227 (18), 8417–8436.

DOI: 10.1016/j.jcp.2008.06.005

Menter, F. R., 1994. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal* 32 (8), 1598–1605.

DOI: 10.2514/3.12149

Mintu, S., Molyneux, D., Colbourne, B., 2021. Full-scale sph simulations of ship-wave impact generated sea spray. *Ocean Engineering* 241, 110077.

DOI: 10.1016/j.oceaneng.2021.110077

Monaghan, J., 2000. Sph without a tensile instability. *Journal of Computational Physics* 159 (2), 290–311.

DOI: 10.1006/jcph.2000.6439

Multiphysics, C., 1998. *Introduction to comsol multiphysics®*. COMSOL Multiphysics, Burlington, MA, accessed Feb 9, 2018.

Reynolds, O., 1895. Iv. on the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. (A.)* 186, 123–164.

DOI: 10.1098/rsta.1895.0004

Roelvink, J. A., Van Banning, G. K. F. M., 1995. Design and development of delft3d and application to coastal morphodynamics. *Oceanographic Literature Review* 42 (11), 925.

Rouzbahani, F., Hejranfar, K., 2017. A truly incompressible smoothed particle hydrodynamics based on artificial compressibility method. *Computer Physics Communications* 210, 10–28.

DOI: 10.1016/j.cpc.2016.09.008

Shadloo, M., Oger, G., Le Touzé, D., 2016. Smoothed particle hydrodynamics method for fluid flows, towards industrial applications: Motivations, current state, and challenges. *Computers Fluids* 136, 11–34.

DOI: 10.1016/j.compfluid.2016.05.029

Shao, S., Lo, E. Y., 2003. Incompressible sph method for simulating newtonian and non-newtonian flows with a free surface. *Advances in Water Resources* 26 (7), 787–800.

DOI: 10.1016/S0309-1708(03)00030-7

Shi, H., Si, P., Dong, P., Yu, X., 2019. A two-phase sph model for massive sediment motion in free surface flows. *Advances in water resources* 129, 80–98.

Weller, H. G., Tabor, G., Jasak, H., Fureby, C., 11 1998. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computer in Physics* 12 (6), 620–631.

DOI: 10.1063/1.168744

Wilcox, D. C., 2008. Formulation of the k-w turbulence model revisited. *AIAA Journal* 46 (11), 2823–2838.

DOI: 10.2514/1.36541