

UNIVERSIDAD
DE LA REPUBLICA
URUGUAY

FACULTAD DE INGENIERIA FACULTAD DE CIENCIAS

Implementación computacional de la interacción sólido-fluido para el modelo CAFFA3D.MBRI

Daniel Agustín Freire Caporale

Programa de Posgrado en Ingeniería Física
Facultad de Ingeniería, Facultad Ciencias
Universidad de la República

Montevideo – Uruguay
Octubre de 2018



UNIVERSIDAD
DE LA REPUBLICA
URUGUAY

FACULTAD DE INGENIERIA
FACULTAD DE CIENCIAS

Implementación computacional de la interacción sólido-fluido para el modelo CAFFA3D.MBRI

Daniel Agustín Freire Caporale

Tesis de Doctorado presentada al Programa de Posgrado en Ingeniería Física, Facultad de Ingeniería de la Universidad de la República, como parte de los requisitos necesarios para la obtención del título de Doctor en Ingeniería Física.

Director:
Dr. Ing. Gabriel Usera

Director académico:
Dr. Arturo Martí

Montevideo – Uruguay
Octubre de 2018

Freire Caporale, Daniel Agustín

Implementación computacional de la interacción sólido-fluido para el modelo CAFFA3D.MBRI / Daniel Agustín Freire Caporale. - Montevideo: Universidad de la República, Facultad de Ingeniería, Facultad Ciencias, 2018.

XXXVII, 162 p.: il.; 29, 7cm.

Director:

Gabriel Usera

Director académico:

Arturo Martí

Tesis de Doctorado – Universidad de la República, Programa en Ingeniería Física, 2018.

Referencias bibliográficas: p. 137 – 144.

1. Método Volúmenes Finitos, 2. Condiciones de Borde Inmersas, 3. Librería MPI, 4. Anidamiento de Mallas, 5. Mallas Móviles, 6. Interacción Sólido-Fluido, 7. Dinámica del sólido. I. Usera, Gabriel, . II. Universidad de la República, Programa de Posgrado en Ingeniería Física. III. Título.

INTEGRANTES DEL TRIBUNAL DE DEFENSA DE TESIS

Dr. Gonzalo Abal

Dr. Ing. Gabriel Cazes

Dra. Sylvana Varela

Dr. Ítalo Bove

Dr. Ing Martín Draper

Montevideo – Uruguay
Octubre de 2018

A mi madre y a mi tía.

Agradecimientos

El transcurso de esta tesis se vio acompañado de momentos muy buenos y de los otros, y con él se cierra una etapa de mi vida.

Primero, quiero agradecer a mi familia: gracias por acompañarme. Puedo decir, de primera mano, que son personas extraordinarias.

Vieja: te agradezco profundamente por tu comprensión y paciencia, que lamentablemente no he conseguido heredar y, ojalá, pueda retribuirte. A mi segunda madre, tía Lu: gracias por todo. Todo. Y a mi primo Gustavo: gracias por estar presente, sobre todo en las duras.

Durante estos años he cultivado muy lindas amistades, que sé que conservaré por siempre. Tengo la fortuna de que muchos permanecen cerca de mí. Algunos están buscando la felicidad en otro sitio. Deseo que lo hayan conseguido, o que lo consigan... mi parte más egoísta siempre desea volver a tenerlos cerca. Algunas personas que quiero mucho, tristemente, ya no los tengo físicamente, pero sé que estarían muy felices por este logro, y se los dedico también con mucho cariño. Gracias a todos, por los buenos momentos.

Quiero decir que mi interés por la mecánica de los fluidos despertó hace muchos años, trabajando en un proyecto comandado por Cecilia Cabeza. Luego, tuve la suerte de que ella, junto con Arturo Martí dirigieran mis estudios de maestría. Además, Arturo aceptó ser el Director Académico de mi tesis de doctorado. Le agradezco a Arturo por la confianza puesta en mí. Por otro lado, si bien Cecilia no participó en mi tesis de doctorado, golpeó la puerta de mi oficina muchísimas veces para llevarme palabras de aliento. Muchísimas veces. Esos son los detalles hacen a la persona. Esos recuerdos jamás se borran, como el apoyo que Guillermo me llevó otras tantas veces. Gracias, de corazón.

Recuerdo que mucho antes de empezar la tesis de doctorado, fui a un seminario que dio Gabriel Usera sobre el CAFFA. Ese día despertó mi interés por el enfoque numérico de la mecánica de los fluidos. Por supuesto, tenía mis temores, pero llegado el momento le consulté y no dudó en aceptarme. Segura-

mente depositó en mí mucha más confianza de la que merecía, pero ojalá que no se arrepienta (demasiado) por su elección. Le agradezco también porque, en mis momentos de extrema preocupación, me transmitió tranquilidad y me quitó mucha de la presión que conlleva, casi de manera inherente, un posgrado de esta naturaleza, lo que me permitió seguir disfrutando del trabajo. También estimuló y colaboró, tanto a nivel académico como financiero, para que realizara estancias de trabajo en el exterior. Por todo esto: muchísimas gracias, Gabriel.

No quiero olvidarme de excelentes compañeros que conocí en el IMFIA. Con Martín, Gabriel (Narancio) y Paolo tuvimos intercambios muy enriquecedores sobre el CAFFA, que son parte fundamental de esta tesis. Pero les agradezco aún más por las conversaciones extracurriculares que, afortunadamente, pudimos generar y que aún mantenemos.

También quiero agradecer muchísimo a Sylvana, quien aceptó ser miembro revisor de esta tesis. Desde ese momento, hizo un trabajo muy intenso, leyó el manuscrito y me envió muchas correcciones y sugerencias. Así, pude pulir muchísimo el contenido del manuscrito. Sylvana: muchísimas gracias por esto, por tu ayuda en mi pasaje por la URV (ojalá que se repita) y por haber viajado tantos kilómetros para integrar este tribunal.

Además, Martín, trabajando con reducción horaria para poder atender a la nueva integrante de su familia, logró dar una mirada clínica sobre el manuscrito y me indicó excelentes comentarios que me ayudaron a reformarlo. Martín, espero haber podido contemplar todos ellos en el documento final y te agradezco muchísimo por tu ayuda y disposición.

De la misma manera quiero agradecer a Ítalo, con quien tuvimos intensos y enriquecedores intercambios telefónicos durante un fin de semana previamente a la defensa, revisando correcciones que espero haber logrado incluir en el manuscrito final. Agradezco su disposición, y además por haber acompañado mis pasos desde mis primeros días de trabajo en el Laboratorio de Inestabilidades en Fluidos, hace muchos muchos años. Tuve la suerte de desarrollar numerosos trabajos experimentales en conjunto con él, que es muy meticuloso en su trabajo y de quien aprendí muchísimo.

Quiero agradecer al Ce.Cal. de la Facultad de Ingeniería por permitirme utilizar el *cluster-fing* para correr las simulaciones, así como agradecer a quienes lo mantienen en funcionamiento. En el mismo sentido, quiero agradecer al Instituto de Física de la Facultad de Ciencias y a PEDECIBA por permitirme

usar el *cluster-pedeciba*. En particular, agradecerle a mi compañero y amigo César Voulgaris, por su permanente auxilio técnico. Siempre estuvo dispuesto a ayudarme y, sin su ayuda logística, muchos aspectos técnicos del trabajo de esta tesis hubiesen extremadamente tediosos. De hecho, siempre tengo presente que al comenzar mis estudios de doctorado, desconocía sobre cómo manejar una terminal de Linux y su utilidad, y César dio un «empujón».

Quiero agradecer a la Agencia Nacional de Investigación e Innovación y a la Comisión Académica de Posgrado, por haberme otorgado las becas correspondientes. Sin su financiamiento, hubiese sido imposible realizar el trabajo. También deseo manifestar mi eterno agradecimiento a la Universidad de la República, por la educación que me ha brindado, de excelente calidad y gratuita, a la que sólo se puede acceder en lugares privilegiados de este mundo.

Finalmente, quiero agradecer al prestigioso tribunal por aceptar participar de mi defensa. En particular por su tiempo y dedicación para evaluar el momento cumbre de este largo proceso.

Perhaps some day in the dim future it will be possible to advance the computations faster than the weather advances and at a cost less than the saving to mankind due to the information gained. But that is a dream.

Lewis Fry Richardson

RESUMEN

El modelo numérico CAFFA3D.MBRI se enmarca en el área de mecánica de los fluidos computacional y su aplicabilidad abarca el estudio de flujos tridimensionales viscosos, turbulentos, incompresibles, con transporte de escalares o con superficie libre, entre muchos otros. Es una implementación del Método de Volúmenes Finitos que utiliza mallas curvilíneas y estructuradas por bloques, que permite dividir la tarea realizando el cálculo en paralelo bajo el estándar MPI.

En el presente trabajo se desarrollan nuevas extensiones del código, que permiten su aplicación a situaciones que involucren la interacción entre un cuerpo rígido, de forma arbitraria, y un flujo en el que se encuentra inmerso. La presencia del cuerpo se realiza adaptando implementaciones del Método de Condiciones de Borde Inmersas (IBM) y su movimiento de traslación y rotación se calcula con las ecuaciones de la mecánica clásica, discretizadas bajo un esquema *leapfrog* con sobre-relajación. El cálculo preciso de la fuerza y momento de fuerza de interacción sólido-fluido requiere la utilización de mallas muy finas, que conlleva un elevado costo computacional. Para obtener un cálculo preciso y con un costo computacional moderado, en este trabajo se adapta una implementación previa de la técnica de mallas anidadas para que se muevan de manera solidaria al cuerpo. Esto permite tener en todo momento un refinamiento local de malla en la cercanía del rígido. Además, la técnica completa se implementó para el caso en que intervienen varios rígidos de forma arbitraria.

Se aplicó el código generado a diferentes problemas físicos para su validación y para el análisis de su capacidad. Los resultados para el análisis en dos (tres) dimensiones de la caída, bajo la acción de la gravedad, de un círculo (esfera) inmerso en un fluido newtoniano confinado en un recipiente están en excelente concordancia con referencias previas. Además, se modeló la fuerza de choque entre dos cuerpos para analizar el caso de la caída en dos (tres) dimensiones de dos círculos (esferas). Se obtuvieron excelentes resultados y se logró reproducir el fenómeno de *drafting, kissing and tumbling* (DKT). Para mostrar la capacidad del código frente a problemas de interés tecnológico, se aplicó el modelo al

problema de resuspensión de sedimentos para el caso en dos dimensiones de un sedimento circular que es removido de la pared inferior del dominio por un flujo de Poiseuille entre dos paredes horizontales paralelas.

El método desarrollado permitirá estudiar situaciones en un amplio rango de escalas. Desde escalas biológicas, como la propagación de glóbulos rojos en el torrente sanguíneo, hasta grandes escalas, por ejemplo en la resuspensión de sedimentos en el fondo de un río o el movimiento de un aerogenerador cuando interactúa con un viento durante la generación de energía eólica.

Palabras claves:
Método Volúmenes Finitos, Condiciones de Borde Inmersas, Librería MPI, Anidamiento de Mallas, Mallas Móviles, Interacción Sólido-Fluido, Dinámica del sólido.

ABSTRACT

The so called CAFFA3D.MBRI is a flow solver which scope includes the study of viscous, turbulent, incompressible, or transporting a contaminant flows, to mention some. It is an implementation of the finite volume method and uses curvilinear, block-structured grids, allowing the code parallelization using the MPI library.

In this work we continue with the development of the code, in order to expand its applicability to cases involving the interaction between a rigid body of given shape and the flow in which it is immersed. The body is represented by means of the immersed boundary method and its motion and rotation are obtained by solving the equations from classical mechanics, using an over-relaxed leapfrog time scheme. A very accurate force and moment calculation, as a result of rigid-flow interaction, resulting from the body-flow interaction, requires the use of fine meshes, leading to a great numerical effort. In order to obtain an accurate solution and save numerical effort, in this work we adapted a previous implementation of the nesting technique, which gives the solver the capability of overlapping fine meshes on the volume occupied by the rigid, at every time step of the simulation. These meshes can also move and rotate following the body state, so that we get mesh refinement only in its vicinity, that is, where it is needed. Moreover, the described technique is also extended for cases involving many bodies.

The solver is applied to different physical problems for its validation and to test its real capabilities. Among them, we studied the falling, due to the gravity, of a circle (sphere) immersed in a newtonian fluid in a container, in two (three) dimensions, obtaing results which are excellent agreement with previous works. In the second study, we considered the two (three) dimensional problem concerning two circles (spheres) falling immersed in a newtonian fluid contained in a closed container. For that purpose, we added the calculation for the collision force between the bodies. The problem was solved properly and the typical drafting, kissing and tumbling phenomenon (DKT) was observed. Finally, we apply the solver for simulating a problem concerning the resuspension of sediments, which has great technological interest. It consists on a

two dimensional Poiseuille flow between two horizontal walls, that causes the remotion of a circular body initially at rest over the bottom wall and then advected by the flow.

The new features incorporated to the code made it capable of studying real world applications where the interaction between fluid an rigid bodies is present, in a wide range of scales. From the transport of red blood cells by the bloodstream, or the resuspension of sediments at the bottom of the riverflow, to the motion of wind turbines during the generation of wind power.

Keywords:
Finite Volume Method, Immersed Boundary Method, MPI Library, Nested Grids, Moving Grids, Solid-Fluid Interaction, Solid-body dynamics.

Lista de figuras

2.1 Esquema general del proceso iterativo para un paso temporal (adaptado de [7]). 15

3.1 Celda o elemento de volumen usado por el algoritmo *Computer Aided Fluid Flow Analysis* en 3 dimensiones, con implementación *Multi-Block Regions*, versión-*i* (CAFFA3D.MBRI) donde se muestra el centro de celda P y sus seis nodos vecinos: W, E, N, S, T y B (bosquejo adaptado de [7]). 21
3.2 Celda típica de cálculo (a) y uno de los dos triángulos en los que se puede dividir (b) (adaptado de [7]). 22
3.3 Elemento de volumen P con los vecinos E, S, N, B y T, utilizados para una interpolación mejorada. Bosquejo adaptado de [3]. 24

4.1 Ejemplo de una malla que se ajusta a la superficie de un rígido [16] 39
4.2 Situación en la que se debe recurrir a una interpolación para obtener un determinado campo en el punto E. La región sombreada en color gris corresponde al interior del cuerpo rígido. . . 43

5.1 Ejemplo de mallas anidadas. En (a), la malla *background* G_1 se representa en color azul (celdas y sus centros), la malla anidada G_2 se representa en color rojo y, sombreado en color gris se indica la región de solapamiento entre estas. En (b) se señalan la región de solapamiento (sombreado gris) y la clasificación de algunas celdas con colores. En G_1: celdas activas (celeste), celdas inactivas (amarillo) y celdas donantes (naranja). En la malla G_2: celdas activas (azul) y de interpolación (verde). En este ejemplo G_2 no tiene celdas inactivas (es decir, celdas de G_2 que se ubiquen afuera de G_1). 51

5.2 Caso unidimensional de solapamiento de dos mallas. La línea superior (celdas 1 a 8) representa la malla *background* (o de menor jerarquía que la siguiente). La línea inferior (celdas 9 a 16) representa a la malla anidada. Las celdas 4 y 15 son celdas inactivas, las celdas 7 y 11 son de interpolación, y el resto de las celdas son activas. Figura adaptada de Hadzic (2006) [25]. . . . 52

5.3 Esquema en el que una malla curvilínea anidada y adaptativa se mueve de manera salidaria a un cuerpo: (a) instante t; (b) instante $t + dt$. 54

5.4 Ejemplo de combinación de las técnicas de anidamiento y Método de Condiciones de Borde Inmersas (IBM). La malla más fina (mayor jerarquía) se mueve solidaria al cuerpo (cuya frontera se señala en trazo punteado), pero no es adaptativa. 54

7.1 Fronteras de las mallas utilizadas: (a) perspectiva del dominio completo; (b) acercamiento donde se pueden diferencias las tres mallas anidadas y la esfera, con centro en el origen de coordenadas. 70

7.2 Vista desde dos perspectivas diferentes del conjunto de mallas utilizadas: (a) plano vertical; (b) plano horizontal 70

7.3 Ejemplos de bloques que conforman a la malla cilíndrica: (a) uno de los 12 bloques prismáticos que forman el núcleo; (b) uno de los bloques que revisten al núcleo y que le dan la forma cilíndrica a la malla 71

7.4 Bloques que conforman la malla cilíndrica: (a) el bloque del núcleo (rojo) encaja en hueco del bloque que lo reviste (azul); (b) cada celda roja sobre la interfaz entre los bloques comparte exactamente una de sus caras con la celda azul vecina. 72
7.5 Comparación de la convergencia de $F_D^{(num)}$ en función de las mallas utilizadas, para $Re = 0.5$ y $Gds = 0.9$. El máximo nivel de refinamiento de malla para los casos graficados son G_1 (azul), G_2 (rojo), G_3 (celeste) y G_4 (verde), y se grafica además el valor empírico $F_D^{(teo)}$ (amarillo). 75
7.6 *Patch* utilizado para aproximar a la superficie de la esfera para las simulaciones de esta sección 76
7.7 Comparación de la fuerza $F_D^{(num)}$ calculada en simulaciones en que usan *patch* (curva de color azul) con simulaciones en las que se define explícitamente la superficie de la esfera (rojo). 77
7.8 Contornos de la componente de vorticidad ω_y (s^{-1}) en el plano $x = 0$ para el flujo en torno a una esfera definida: (a) de manera analítica (campo de distancias X_{imb}); (b) usando la malla de triángulos (*patch*). 78
7.9 Contornos de vorticidad de ω_y (s^{-1}) en el plano $x = 0$ una vez alcanzada la convergencia del modelo para $Re = 10.0$, $Gds = 0.9$ y dos mallas anidadas, G_2 y G_3. 79
7.10 Contornos de vorticidad para la componente ω_y (s^{-1}) en el plano $x = 0$ para los siguientes factores Gds y máximo nivel de refinamiento de malla: (a) $Gds = 0.5$, G_2; (b) $Gds = 0.9$, G_2 y (c) $Gds = 0.9$, G_3. 81
7.11 Comparación de la convergencia de $F_D^{(num)}$ para $Re = 0.2$, para diferentes factores de *blending* y máximo nivel de refinamiento. Las curvas corresponden a $Gds = 0.9$ y malla G_3 (azul), $Gds = 0.9$ y malla G_4 (rojo), $Gds = 1.0$ y malla G_3 (celeste) y valor del modelo teórico $F_D^{(teo)}$ (verde). 84
7.12 Evolución temporal de F_D empleando 10 (azul), 100 (rojo) y 300 (negro) interaciones externas por paso temporal, y se señala también el valor empírico $F_D^{(teo)}$ (verde). En trazo punteado se señala el instante $t = 0.01s$ (cuando la esfera alcanza la magnitud U_{lid}). 86

7.13 Perfiles de velocidad vertical para $Re = 0.2$, $Gds = 0.9$ y para las alturas 0 mm (grupo de tres curvas (a)), 5 mm (grupo de tres curvas (b)) y 30 mm (grupo de tres curvas (c)) detrás de la esfera (aguas abajo). Los colores corresponden a: rojo, flujo uniforme, esfera fija, 10 iteraciones externas por paso temporal; azul, esfera móvil, fluido inicialmente en reposo, 10 iteraciones externas; verde, esfera móvil, fluido inicialmente en reposo, 100 iteraciones externas 87

8.1 Evolución de la componente vertical de la velocidad de la esfera durante su caída. En color azul se muestran los resultados empíricos y color rojo los obtenidos con el código CAFFA3D.MBRI. 91
8.2 Esquema del caso de estudio de flujo de corte impuesto por paredes móviles ($x = \pm 2.0$ m). 93
8.3 Contorno de vorticidad ω_y y campo de velocidades para la malla B en el instante $t = 28s$ (luego de haber liberado el cilindro). . . 94
8.4 Evolución temporal de la velocidad angular del cilindro para diferentes mallas. Las referencias de colores son: negro continua para malla A, azul para malla B, rojo para malla C y negro a trazos para el valor de referencia. 95
8.5 Esquema del problema de estudio, donde la esfera se ubica entre dos paredes paralelas en $y = \pm 3.2$ m, y se le aplica un momento de fuerza constante en la dirección z, M_z. Figura adaptada de Schwarz *et al.* (2015) [39]. 95
8.6 Diagrama de colores de la velocidad angular adimensioanda Ω_p obtenido con nuestras simulaciones para el instante $t = 0.25$ s y la malla $d_p/h = 40$. 96
8.7 Resultados para la velocidad angular adimensionada de la esfera obtenidos en esta tesis (curvas en color azul) y comparación con los resultados de Schwarz *et al.* (2015) [39] (curvas en color rojo), para los valores $d_P/h = 80$ (línea punteada; solo para el trabajo de Schwarz), $d_P/h = 40$ (trazo a rayas), $d_P/h = 20$ (trazo punto-raya) y $d_P/h = 10$ (trazo continuo). 97
8.8 Contornos de la componente de vorticidad ω_y (s^{-1}) y campos de velocidades sobre en el plano vertical central $y = 0$, para diferentes instantes de tiempo. 100

8.9 Resultados obtenidos en nuestras simulaciones y comparación con citas bibliográficas: (a) evolución temporal de la componente vertical de la velocidad de la partícula durante su caída; (b) evolución de la altura del centro de la partícula. Las referencias de las curvas son: triángulos, Wan y Turek (2006) [36]; círculos, Wu y Shu (2010) [40]; línea continua celeste, Wang (2014) [41]; línea continua negra, nuestras simulaciones. 101

8.10 Componente de vorticidad ω_y (s^{-1}) sobre el plano vertical central $y = 0$, durante la caída (tridimensional) de la esfera inmersa en un fluido, para diferentes instantes de tiempo. 103

8.11 Contornos de nivel del módulo de la velocidad normalizado por el valor de u_{lim} en el instante $t = 1.5s$ y en el plano vertical que pasa por el origen de coordenadas. En (a) se muestran los resultados experimentales obtenidos en Ten Cate *et al.* del año 2001 [42] y en (b) los resultados numéricos documentados en la misma referencia. En (c) se muestran los resultados obtenidos en esta tesis, en el intervalo $x, z = [0.0, +3.0]$ cm. 104

8.12 Resultados obtenidos en nuestras simulaciones y comparación con citas bibliográficas: (a) evolución temporal de la componente vertical de la velocidad de la partícula durante su caída; (b) evolución de la altura del centro de la partícula, adimensionado por el diámetro de la esfera. Las referencias de colores son: azul, resultados numéricos reportados en Ten Cate *et al.* (2001) [42]; rojo, resultados reportados en Khalili *et al.* (2017) [46]; negro, resultados obtenidos con el CAFFA3D.MBRI. 105

9.1 Contornos de vorticidad ω_y (s^{-1}), para diferentes instantes de tiempo. En color fucsia (verde) se señala al disco que se encuentra inicialmente por encima (por debajo). (a) Contornos de vorticidad reportados en Wang *et al.* (2014) [41]. No se especifican valores de los contornos en la referencia. (b-e) Resultados de nuestras simulaciones. 111

9.2 Resultados obtenidos en nuestras simulaciones y comparación con citas bibliográficas: en (a) la evolución de la coordenada z de los centros de los discos durante la caída y en (b) la evolución de las coordenadas x. En línea continua (a trazos) se muestra la posición de la esfera inferior (superior) obtenida en esta tesis. Con círculos (cruces) se grafica la posición del círculo superior (inferior) en función del tiempo documentada en Jafari *et al.* (2011) [47]. 112
9.3 Evolución temporal de la distancia entre las esferas. En trazo continuo se grafican los resultados obtenidos en esta tesis y con cruces se señalan los valores registrados en Jafari *et al.* (2011) [47]. 113
9.4 Esquema del problema físico planteado: (a) bosquejo tridimensional del sistema; (b) configuración inicial. Figuras adaptadas de Dash *et al.* (2014) [52]. 115
9.5 Superficies de iso-vorticidad para $\omega = 5.0s^{-1}$ (mayor transparencia) y $\omega = 15.0s^{-1}$ (mayor opacidad). En color rojo (azul) se representa la superficie de la esfera inicialmente superior (inferior). 117
9.6 Componente de vorticidad ω_y (s^{-1}) en el plano vertical central $y = 0$, para diferentes instantes de tiempo. En color rojo (azul) se representa la superficie de la esfera inicialmente superior (inferior). 118
9.7 Resultados obtenidos en nuestras simulaciones y comparación con citas bibliográficas: (a) evolución temporal de la posición vertical de las esferas (esfera superior en trazo continuo y esfera inferior en trazo punteado); (b) evolución de la distancia entre las superficies de las esferas. Las referencias de colores corresponden a: negro, resultados de la presente tesis; verde, resultados de Glowinski *et al.* (2001) [53]; magenta, Apte *et al.* (2009) [58]; celeste, Sharma y Patankar (2005) [60] (sólo para (a)); rojo, Breugem (2012) [62]; azul, Liao *et al.* (2015) [63] (sólo para (a)). 119

10.1 De izquierda a derecha, esquema del proceso durante el cual la partícula es removida por un flujo incidente (segunda figura), comenzando por rodar sin deslizar sobre la superficie (tercera figura) hasta su resuspensión y alcanzar la altura de equilibrio h_e al final del proceso (figura de la derecha) [1]. U_p representa la velocidad de la partícula y U_f la velocidad del fluido. 123
10.2 Esquema de la velocidad del fluido y las líneas de corriente relativas a la partícula, en un flujo plano de Poiseuille [1]. 124
10.3 Esquema que muestra las fuerzas horizontales que actúan sobre el cilindro durante el movimiento de rodadura sin deslizamiento. 127
10.4 Esquema que representa las diferentes etapas del proceso de levantamiento del sedimento (figura adaptada de Patankar *et al.* (2002) [2]). 128
10.5 Contornos de la componente de vorticidad ω_y y campos de velocidades sobre en el plano vertical central $y = 0$ y en un referencial solidario a la esfera, para diferentes instantes de tiempo. 130
10.6 Evolución temporal de la distancia mínima que separa la superficie del sedimento a la pared inferior del ducto (h_{rel}), adimensionada por el diámetro del mismo, para (a) $Re = 1.0$ (no hay levantamiento del sedimento), (b) $Re = 2.0$, (c) $Re = 2.5$, (d) $Re = 3.0$, (e) $Re = 4.0$ y (f) $Re = 5.0$ 131
10.7 Altura de equilibrio del sedimento en función del Re. Los asteriscos azules corresponden a los resultados reportados en Patankar *et al.* (2001) [1] y los círculos negros a los obtenidos con el CAFFA3D.MBRI. 131

A.1 Esquema del elemento de volumen P con vecino E (adaptado de [3]). 149

Lista de tablas

7.1 Extremos de las mallas G_2, G_3 y G_4 (en mm), cantidad de celdas en cada dirección (el valor mínimo que toma cada coordinada es igual al máximo, pero negativo) y tamaño de celda Δx para cada caso (en mm). 71
7.2 Resultados obtenidos para $Re = 0.5$. Se señalan con cruces a las mallas anidadas utilizadas en cada caso (en todos los casos G_1 es la malla *background*) 75
7.3 Resultados obtenidos para $Re = 10.0$. Se señalan con cruces a las mallas anidadas utilizadas en cada caso (en todos los casos G_1 es la malla *background*). 79
7.4 Resultados obtenidos para $Re = 50.0$. Se señalan con cruces a las mallas anidadas utilizadas en cada caso (en todos los casos G_1 es la malla *background*). 80
7.5 Resultados obtenidos para $Re = 0.2$. Se señalan con cruces a las mallas anidadas utilizadas en cada caso (en todos los casos G_1 es la malla *background*). 83
7.6 Resultados para el caso de esfera móvil para $Gds = 0.9$ en función de la cantidad de iteraciones externas por cada paso temporal 85

Lista de siglas

CAFFA3D.MBRI algoritmo *Computer Aided Fluid Flow Analysis* en 3 dimensiones, con implementación *Multi-Block Regions*, versión-*i* xxi, xxiv, xxv, xxvii, 1, 2, 3, 4, 5, 13, 14, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 26, 28, 29, 30, 33, 34, 41, 43, 44, 48, 50, 52, 53, 55, 56, 57, 59, 60, 62, 63, 67, 72, 76, 77, 78, 81, 84, 87, 90, 91, 92, 94, 97, 98, 99, 103, 104, 105, 108, 110, 114, 116, 117, 120, 121, 124, 131, 133, 151

CDS esquema centrado de diferenciación 28, 29, 33, 34, 74, 149, 150, 153, 154, 157, 158

DKT mecanismo de *Drafting, Kissing and Tumbling* 108, 113, 116, 120

EDP ecuaciones en derivadas parciales 12, 13, 15, 16, 17

IBM Método de Condiciones de Borde Inmersas xxii, xxxiv, 3, 4, 5, 39, 40, 41, 42, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 63, 115, 133, 134

MFC Mecánica de los Fluidos Computacional 2, 3, 5, 14, 98

MPI Interfaz de Intercambio de Mensajes 2, 4

MVF Método de Volúmenes Finitos 2, 3, 4, 5, 10, 19, 20, 33, 115

SIMPLE *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations* 33, 34, 35, 160, 162

UDS esquema *upwind* de diferenciación 28, 29, 74, 147, 148, 150, 153, 154

Tabla de contenidos

Lista de figuras xxi

Lista de tablas xxix

Lista de símbolos xxix

Lista de siglas xxxi

1 Introducción 1

1.1 Motivación y objetivos 1

1.2 Estructura del manuscrito 5

I Modelo base y conceptos previos 7

2 Conceptos generales sobre resolución numérica 9

2.1 Métodos de resolución numérica 10

2.2 Ecuaciones discretizadas y estrategias de resolución 12

2.3 Técnica de sobre-relajación 15

2.4 Aproximación de corrección diferida 16

3 Método de Volúmenes Finitos 19

3.1 Ecuaciones de la Mecánica de los Fluidos 20

3.2 Discretización del dominio 21

3.3 Interpolación de datos 24

3.4 Aproximación para las integrales de superficie y de volumen . . 26

3.4.1 Aproximación de integrales de superficie 26

3.4.2 Integrales de volumen 26

3.5 Tratamiento de la derivada temporal 27

3.6 Aproximación de flujos convectivos 28

3.6.1 Consideraciones sobre término convectivo para mallas móviles . . . 29
3.7 Aproximación de flujos difusivos . . . 30
3.8 Ecuación de continuidad y tratamiento del campo de presiones . 33

II Desarrollo del producto 37

4 Método de Condiciones de Borde Inmersas 39
4.1 Formulación del IBM . . . 40
4.2 Implementación del IBM . . . 41

5 Técnica de anidamiento 47
5.1 Características de la técnica . . . 48
5.2 Esquema del método . . . 49
5.2.1 Clasificación de celdas según su función dentro de la técnica de anidamiento . . . 50
5.2.2 Técnica de anidamiento en el CAFFA . . . 52
5.3 Anidamiento y IBM . . . 53

6 Modelado de la dinámica del cuerpo rígido 57
6.1 Ecuaciones cardinales . . . 57
6.2 Discretización de la primera ecuación cardinal . . . 59
6.3 Discretización de la segunda ecuación cardinal . . . 60
6.4 Acoplamiento de las ecuaciones cardinales al CAFFA . . . 62

III Validación del código y aplicaciones 65

7 Evaluación del cálculo de la fuerza de interacción sólido-fluido 67
7.1 Ecuaciones empíricas del problema . . . 67
7.2 Dominio computacional . . . 69
7.3 Simulaciones con esfera fija y flujo uniforme aguas arriba . . . 73
7.3.1 Simulaciones con $Re = 0.5$ . . . 74
7.3.2 Simulaciones con $Re = 10.0$ . . . 78
7.3.3 Simulaciones con $Re = 50.0$ . . . 80
7.4 Respuesta del modelo ante problemas con igual movimiento relativo sólido-fluido . . . 82

7.4.1 Esfera fija, flujo uniforme aguas arriba 83
7.4.2 Esfera móvil, fluido inicialmente en reposo 84

8 Desempeño de la modelación de las ecuaciones cardinales 89
8.1 Análisis de la implementación computacional para la primera ecuación cardinal 89
8.2 Análisis de la implementación computacional para la segunda ecuación cardinal 91
8.3 Modelado de la caída de un cuerpo rígido en un fluido viscoso . 98
8.3.1 Evaluación de resultados 2D 98
8.4 Evaluación de resultados 3D 102

9 Simulación de la interacción entre dos cuerpos rígidos en sedimento 107
9.1 Fuerza de interacción entre las partículas en sedimento 108
9.2 Simulación 2D de la caída de dos discos 109
9.3 Simulación 3D de la caída de dos esferas 114

10 Resuspensión de partículas en un ducto 121
10.1 Motivación y descripción del problema 121
10.2 Modelado numérico bidimensional de la resuspensión de una partícula circular por un flujo de Poiseuille 125
10.3 Resultados y análisis 129

11 Conclusiones y trabajo futuro 133

Referencias bibliográficas 137

Anexos 145
Anexo A Esquemas de diferenciación *upwind* y centrado 147
A.1 Esquema *upwind* 147
A.2 Esquema centrado 148
A.3 *Blending* de los esquemas *upwind* y centrado 150
Anexo B Esquema de Euler para la derivada temporal 151
B.1 Estabilidad del esquema de Euler 151
B.2 Esquema de Euler explícito (forward Euler) 153
B.3 Esquema de Euler implícito (backward Euler) 154
Anexo C Aproximación para flujos difusivos 157

Anexo D Método SIMPLE 159

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación y objetivos

El movimiento de fluidos, ya sea en el área fundamental o en aplicaciones tecnológicas, se modela usando las ecuaciones de Navier-Stokes. Estas constituyen un sistema de ecuaciones no lineales en derivadas parciales. Debido a la no linealidad de las ecuaciones no es posible, salvo en casos excepcionales, resolverlas en forma analítica. Se debe acudir entonces a métodos computacionales que permitan su resolución numérica. La constante interacción entre los métodos numéricos y la experimentación es la que permite una aproximación satisfactoria a la solución de problemas.

El desarrollo de paquetes comerciales es constante, y busca principalmente la flexibilidad para adaptarse a la mayor cantidad de problemas posible, de manera de favorecer el crecimiento del número de usuarios. Sin embargo, esto resulta en un cierto sesgo hacia la implementación de determinados esquemas frente a otros que pueden ser de interés para una investigación particular. Además, el código fuente de paquetes comerciales es de acceso restringido, lo que limita o impide la posibilidad de realizar modificaciones o incluso de conocer en profundidad su programación y, por lo tanto, su aplicabilidad.

Contar con un código propio permite realizarle modificaciones y conocer en profundidad cada uno de los esquemas que utiliza y su aplicabilidad. Por estas razones, a inicios del año 2000 el Dr. Ing. Gabriel Usera comenzó a desarrollar el código abierto CAFFA3D.MBRI, y creó el grupo de Mecánica de los Fluidos Computacional, donde se trabaja en el constante desarrollo y expansión de las capacidades del paquete.

El CAFFA3D.MBRI se aplica a la simulación numérica de flujos viscosos o turbulentos, tridimensionales y con transporte de escalares, utilizando mallas curvilíneas estructuradas por bloques. Además, el modelo sigue el Método de Volúmenes Finitos (MVF), que ha ganado popularidad entre la comunidad de Mecánica de los Fluidos Computacional (MFC) durante las últimas dos décadas.

El MVF consiste en discretizar la formulación integral de las correspondientes leyes de conservación. El método aprovecha al máximo las características de una malla arbitraria, que se compone de un número arbitrario de celdas o volúmenes de control, sobre los que se expresan dichas leyes de conservación. Así, este esquema promueve la conservación de las cantidades básicas, como el momento o la masa, en el nivel discreto.

Además, el CAFFA3D.MBRI hace uso del recurso computacional de un cluster multiprocesador mediante una implementación basada en la Interfaz de Intercambio de Mensajes (MPI) [1].

Cuando se piensa en problemas en la naturaleza e ingeniería de interés para su estudio, abundan situaciones que involucran flujos de dos fases, donde partículas o cuerpos rígidos de forma y tamaño arbitrarios inmersos en el fluido experimentan un movimiento sujeto a la interacción con este. Ejemplos de estas situaciones abarcan fenómenos como el transporte de sedimentos en ríos, la fluidización para la suspensión de partículas, cámaras de combustión de combustible a base de carbón, el trasporte de glóbulos rojos por el flujo sanguíneo e interacción entre ellos, o la interacción entre viento y aerogeneradores para la producción de energía eólica. Sin embargo, previamente al desarrollo de esta tesis, el CAFFA3D.MBRI era capaz de contemplar situaciones que involucran la interacción entre fluidos y cuerpos rígidos únicamente bajo la condición de que el cuerpo se encuentre en una posición fija o con un movimiento impuesto por el usuario.

En este trabajo se amplía la capacidad del código, de manera de que considere la dinámica del rígido también sujeta a su interacción con el fluido en el que se encuentra inmerso. Dicho objetivo conlleva una gran cantidad de detalles que deben ser contemplados. Para modelar el movimiento del cuerpo rígido se debe comenzar por calcular con buena precisión la fuerza y el momento que el fluido ejerce sobre este, para finalizar con un esquema que resuelva su movimiento (traslación y rotación) a través de la discretización de las ecuaciones que describen la dinámica del rígido (ecuaciones cardinales).

[1] De sus siglas en inglés *Message Passing Interface*.

El punto de partida para llevar a cabo esta tarea consiste en imponer la presencia del rígido inmerso en el fluido. Históricamente, la forma convencional de hacerlo consistía en usar mallas adaptativas, es decir, que se ajustan a la superficie del cuerpo. La desventaja de este tipo de técnicas es el elevado costo computacional que ocasiona generar, en cada instante de tiempo (debido a que el cuerpo se encuentra en movimiento), una malla con la adecuada resolución local, que además se adapte a forma del cuerpo y que conste de la menor cantidad de celdas posible.

Como alternativa, en el trabajo de Peskin (1982) [4] se introdujo el IBM[1] para estudiar el flujo sanguíneo en el sistema cardiovascular. Básicamente, Peskin propuso incorporar un término forzante adicional a la ecuación original de conservación del momento del MVF para forzar los valores de las velocidades sobre las paredes del dominio. Poco a poco esta técnica fue ganando adeptos, y en la actualidad es ampliamente usada en comunidad de MFC. En particular, es la técnica que se implementa en el CAFFA3D.MBRI y que utilizamos en este trabajo.

Una vez implementado el IBM, es necesario elegir adecuadamente una malla de cálculo que sea lo suficientemente fina, principalmente en las cercanías del cuerpo rígido, para calcular con la precisión deseada la fuerza de interacción con el fluido. Cuando el cuerpo se mueve en una considerable porción del dominio computacional, puede ser necesario refinar la malla de cálculo completa. Esto implica discretizar el dominio en un gran número de celdas y, por lo tanto, la necesidad de contar con un gran volumen de recursos computacionales.

En general, el rígido ocupa una pequeña fracción del dominio físico del problema, por lo que el flujo sufre grande variaciones solo en las inmediaciones del cuerpo. Esto significa que no es necesario resolver las ecuaciones con gran detalle en zonas lejanas al cuerpo. Si se calcula la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes con gran precisión solo en las inmediaciones del cuerpo, se reduce considerablemente el costo computacional del método, sin comprometer la calidad de la solución numérica. Con este objetivo se introduce la técnica de anidamiento o *nesting*, implementada en el CAFFA3D.MBRI.

La técnica de anidamiento consiste en cubrir el dominio computacional por una determinada cantidad de mallas que se solapan entre sí de manera arbitraria. La estrategia es utilizar una malla gruesa (malla *background*), de resolución regular pero suficiente para calcular correctamente el flujo lejos de

[1] De sus siglas en inglés *Immersed Boundary Method*.

los cuerpos rígidos, para cubrir el dominio computacional completo. Luego, con una o varias mallas refinadas, se cubren las regiones que requieran de mayor resolución. A través de interpolaciones entre las soluciones obtenidas en ambas mallas, estas se acoplan y se obtiene una única solución numérica sobre el dominio completo.

Las implementaciones de IBM y *nesting* en el CAFFA3D.MBRI existentes previamente a esta tesis debieron ser adaptadas para trabajar de manera conjunta, y a la vez ser acopladas con la resolución de la dinámica del rígido. Las implementaciones previas hacían que el CAFFA3D.MBRI fuera capaz de resolver el flujo en torno a un cuerpo rígido cuyo movimiento fuera prescrito. Así mismo, faltaba articular la técnica de *nesting*, para que las mallas anidadas se movieran correctamente.

En este trabajo se modifica la implementación previa de la técnica de anidamiento, adaptándola al caso de mallas móviles (tanto traslación como rotación), que se mueven de manera solidaria a los rígidos inmersos. Por otro lado, para que el IBM y la técnica de anidamiento, trabajando en conjunto, arrojen valores correctos de la fuerza de interacción sólido-fluido y del momento de fuerza correspondiente a dicha interacción, fue necesario introducir correcciones sobre el IBM. Una vez adaptados los módulos mencionados y corregidos los cálculos correspondientes, se implementó completamente la resolución de las ecuaciones cardinales para el cuerpo rígido, que rigen su movimiento de traslación y rotación. Este cálculo se expandió al caso de la presencia de varios cuerpos inmersos en un determinado flujo. Además, para este último caso se agregaron términos correspondientes a la interacción entre cuerpos sólidos, en caso de colisionar.

Por lo tanto, el código generado refiere a un modelo computacional que, si bien aún tiene diversos puntos a ser perfeccionados, amplía significativamente el horizonte de problemas que se pueden atacar con el CAFFA3D.MBRI.

Con las modificaciones realizadas sobre el CAFFA3D.MBRI, se expanden sus capacidades, y sus características son:

- lenguaje de programación *Fortran 90*
- implementación de MVF
- programación en paralelo con implementación MPI
- representación de cuerpos rígidos (uno o más) con IBM
- refinamiento local de mallas con anidamiento

- mallas móviles que se pueden mover (trasladar y rotar) solidarios a los cuerpos
- resolución de las ecuaciones cardinales de movimiento de cuerpos rígidos (traslación y rotación), contemplando fuerzas de interacción sólido-fluido y sólido-sólido

Los hitos de esta tesis corresponden al diseño del último ítem listado, y a la expansión y adaptación del modelo previo para resolver conjuntamente el penúltimo ítem y el cálculo de las fuerzas de interacción involucradas, y de los momentos de fuerza.

Hasta el momento de escribir este documento no surgen de las búsquedas realizadas que existan paquetes de códigos con las mismas características. El código generado no solo amplía el espectro de áreas en las que puede ser aplicado el CAFFA3D.MBRI sino que conlleva la generación de recursos humanos especializados en el área de la MFC.

A modo de ilustrar el impacto del código generado, se aplica al fenómeno de resedimentación en dos dimensiones. En este fenómeno, partículas adheridas a una determinada superficie son removidas por un flujo. Durante este proceso se remueven partículas de una superficie, lo cual puede favorecer un determinado fin, como ser remover la acumulación de polvo en paneles solares, o ser contraproducentes, como cuando se remueven contaminantes en hospitales. Con el CAFFA3D.MBRI ampliado a raíz de este trabajo, resolvemos la situación particular en dos dimensiones de resedimentación de una partícula circular. Los resultados se comparan muy favorablemente con referencias previas sobre la temática.

1.2. Estructura del manuscrito

El trabajo se divide en tres partes bien diferenciadas. En cada una se agrupan capítulos que apuntan a diferentes objetivos.

En la Parte I se presentan conceptos generales sobre métodos numéricos en el área de la MFC y se detalla el MVF.

En la Parte II se desarrollan los módulos amalgamados en esta tesis, para que trabajen en sinergia hacia el producto final. Allí se describe el método de IBM en el Cap. 4, la técnica de anidamiento en el Cap. 5, y los esquemas de discretización de las ecuaciones cardinales, que rigen al movimiento del rígido,

en el Cap. 6.

La validación del código frente a diferentes situaciones, que involucran la caída de una y dos esferas en dos y tres dimensiones, así como la aplicación del código al problema de resedimentación en dos dimensiones se muestra en la Parte III.

Finalmente, en el Cap. 11 se revisan las conclusiones del trabajo y se detallan varias de las líneas de investigación propuestas a futuro.

Parte I

Modelo base y conceptos previos

Capítulo 2

Conceptos generales sobre resolución numérica

Cuando se acude a métodos numéricos para encontrar soluciones aproximadas de una determinada ecuación matemática, se debe tener en consideración diversos aspectos que caracterizan a dichos métodos. Por ejemplo, las propiedades de las soluciones obtenidas y del esquema que se utiliza para la discretización tanto temporal como espacial.

El primer paso en la implementación de un método numérico consiste en el modelado matemático apropiado del proceso físico que se está investigando o, cuando se usa un paquete de programación, elegir el modelo que mejor se adapta al problema concreto en estudio [5]. Si el esquema numérico no es el adecuado, puede que no se obtengan resultados de utilidad real o que los resultados no modelen correctamente el fenómeno físico.

Para resolver numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales o integrales que modelan a un determinado proceso físico, habitualmente expresadas en un dominio espacio-temporal continuo, este se debe aproximar de manera apropiada por un problema discreto, donde las variables desconocidas (incógnitas del sistema) sean representadas por una cantidad finita de valores. Este proceso se denomina «discretización» e involucra básicamente dos tareas: discretizar el dominio del problema y discretizar las ecuaciones del sistema correspondiente.

En la discretización espacial se aproxima el dominio (continuo) del problema original por un número finito de subdominios (nodos de cálculo), en los cuales se determinan los valores de las cantidades desconocidas (solución

discreta).

Por otro lado, el conjunto de relaciones que se resuelve para calcular la solución en los nodos de cálculo se obtiene mediante la discretización de las ecuaciones del sistema. Dichas relaciones consisten en una aproximación discreta del sistema (continuo) original. A diferencia de la solución analítica, la solución numérica conduce a un conjunto discreto de valores, asociados a los nodos de cálculo del dominio discretizado.

Las tres aproximaciones más usadas o más importantes en este contexto son:

- Método de diferencias finitas (MDF)
- Método de volúmenes finitos (MVF)
- Método de elementos finitos (MEF)

Aparte de los antes mencionados, existen otros métodos, como ser métodos espectrales, pero que se aplican en situaciones muy particulares.

En la actualidad, se utilizan principalmente el MVF y el MEF. Mientras que el MEF es usado de manera predominante en el área de mecánica estructural, el MVF domina en el área de mecánica de los fluidos. En esta tesis utilizamos una implementación del MVF, el cual detallamos en el Cap. 3.

Como resultado de la discretización del dominio del problema y del sistema de ecuaciones que lo gobiernan, se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas, el cual debe resolverse. La cantidad de nodos de cálculo y de la cantidad de magnitudes físicas involucradas en el problema original determinan la cantidad de incógnitas del sistema algebraico a resolver en cada paso temporal.

La cantidad de incógnitas usualmente es del orden de millones, por lo tanto, las características de los algoritmos utilizados para resolver el sistema, así como la capacidad de los recursos computacionales con los que se cuenta, pasan a ser aspectos determinantes.

En las siguientes secciones desarrollamos varios conceptos que hemos mencionado aquí y componen el modelo numérico en que se basa la presente tesis.

2.1. Métodos de resolución numérica

A pesar que no es posible obtener un análisis completo de todas las propiedades de un determinado método numérico, existe consenso acerca de algunas propiedades que se deben satisfacer [6].

Decimos que un método es *consistente* cuando la diferencia entre la solución discretizada y la solución exacta (error de truncamiento) tiende a cero en todo el dominio, a medida que la discretización (espacial y temporal) tiende a cero. La rapidez con que el error de truncamiento tiende a cero cuando el paso temporal y el paso espacial o de malla (caracterizado por la distancia entre nodos de cálculo) tienden a cero determina el orden del esquema temporal y espacial respectivamente.

La segunda propiedad fundamental de los métodos numéricos es su *estabilidad*. Para que un determinado método numérico sea estable, los errores que se generan durante el curso de la resolución numérica, no deben magnificarse. Existen métodos como el de von Neumann para su análisis [6].

Otra propiedad fundamental es la *convergencia* del método numérico. Para contar con esta propiedad, la solución numérica debe coincidir con la solución exacta del sistema original cuando el paso de malla tienda a cero. En general esta propiedad es difícil de comprobar y en su lugar se busca que el esquema presente *independencia de malla*. Esto consiste en resolver el problema con el mismo esquema numérico pero con diferentes mallas, de refinamiento sucesivo, hasta alcanzar soluciones prácticamente iguales.

Otro aspecto a atender es que el esquema preserve las propiedades de *conservación* de las magnitudes involucradas. En caso contrario puede existir la presencia de fuentes o sumideros en los resultados de la simulación numérica. En ocasiones, los problemas de conservación pueden manifestarse en mallas suficientemente gruesas (es decir, cuando aumentamos el paso de malla). Sin embargo, determinar el refinamiento de malla necesario para reducir el error por debajo de los valores deseados es un ejercicio complejo y es conveniente trabajar con esquemas numéricos conservativos.

Además de la conservación, un esquema numérico debe mantener a las magnitudes *acotadas* dentro de los límites esperados. Por ejemplo, la energía cinética no puede tomar valores negativos, o una determinada concentración debe mantenerse entre 0 y 1. Aunque esto solo se puede garantizar en esquemas de primer orden [6, 5], el problema se manifiesta cuando la malla no es lo suficientemente fina, ya sea en el dominio completo o en alguna parte. Por lo tanto, este es un indicador de la elección correcta de la malla.

Existe una cuestión que no es numérica por sí sola, sino que involucra también a la formulación del problema físico. Esta se conoce como *factibilidad* del modelo y consiste en obtener soluciones físicamente realistas. Si un mode-

lo no es factible, se pueden obtener soluciones numéricas no-físicas o incluso divergentes.

Finalmente, mencionamos la propiedad de *precisión* de un esquema numérico. Un esquema más preciso es aquél que minimiza las errores que comete. Aparte de los errores que pueden ser introducidos en el transcurso de la resolución numérica (ocasionados por su propia naturaleza de conducir a una solución aproximada de la solución real), en las etapas previas, como ser durante su programación y establecimiento de condiciones de contorno, se pueden introducir diversos errores sistemáticos. Entre estos errores se encuentran los de *modelado*, *discretización* y *iteración* [6].

2.2. Ecuaciones discretizadas y estrategias de resolución

Al final del proceso de discretización de las ecuaciones físicas y del dominio físico se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas, que son lineales o no-lineales, dependiendo de la naturaleza de las ecuaciones en derivadas parciales (EDP) de las que se parte.

En el caso no-lineal, las ecuaciones discretizadas deben ser resueltas por una técnica iterativa, que obtiene una solución aproximada a partir de las ecuaciones linealizadas, y luego la perfecciona, repitiendo el proceso de manera iterativa hasta alcanzar la convergencia. Por lo tanto, también en este caso se debe resolver un sistema de ecuaciones algebraicas (lineales) en cada paso del proceso iterativo.

El sistema de ecuaciones algebraicas que se obtiene de la discretización de las EDP que rigen la dinámica de un determinado campo ϕ, se escribe de forma matricial como:

$$A\phi = Q, \tag{2.1}$$

donde A es una matriz de tamaño $K \times K$, donde K es el número de puntos o nodos de discretización el dominio (malla de cálculo) y con coeficientes constantes. El vector Q, cuya dimensión es K, contiene los denominados términos *fuente*.

La matriz A, cuyos coeficientes surgen del proceso de discretización, tiene la mayor parte de sus elementos nulos (matríz *sparse*). Todos los elementos no nulos se ubican en un pequeño número de diagonales bien definidas (la cantidad

de diagonales no nulas depende del esquema de discretización), propiedad de la que se toma ventaja para la resolución de la ecuación matricial [6].

Los diferentes métodos que se utilizan para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas se pueden clasificar *directos* e *iterativos*.

Los métodos directos resuelven el sistema algebraico en un solo paso. Los más utilizados son el de eliminación de Gauss, descomposición LU (que es una variante del primero), y el algoritmo de matriz tridiagonal (TDMA), que aprovechan las situaciones en que la mayor parte de los elementos de A son nulos [6], como es el caso del CAFFA3D.MBRI.

Sin embargo, no siempre es posible resolver las EDP discretizadas usando métodos directos. Para resolver ecuaciones no-lineales es necesario recurrir a métodos iterativos. Igualmente pueden ser utilizados para resolver sistemas lineales, en particular cuando tienen un gran número de variables.

En los métodos iterativos primero se obtiene una solución de un sistema lineal aproximado y luego se usa la ecuación no-lineal que se desea resolver para perfeccionar la solución. Este proceso conforma una iteración, y se repite hasta alcanzar la convergencia con el margen de tolerancia deseado.

Si cada iteración es poco costosa (en cuanto a los requerimiento computacionales que implica) y el número de iteraciones es pequeño, la resolución iterativa puede ser beneficiosa frente a un método directo. Este es precisamente el caso en la mayoría de los problemas que se enmarcan en la mecánica de los fluidos computacional.

Entre las implementaciones más frecuentes de este tipo de métodos están los métodos de Stone, SIP (*Strongly Implicit Procedure*), ADI (*Alternating Direction Implicit*), CGS (*Conjugate Gradient Squared*), CGSTAB (CGS *stabilized*), etc. [6]

Existe una dificultad adicional a la no-linealidad de las ecuaciones, inherente de la mayoría de los problemas de la mecánica de los fluidos y de transferencia de calor, que refiere al acoplamiento de las ecuaciones algebraicas que conforman el sistema a resolver.

Las dos estrategias utilizadas para resolver estas situaciones son el método *simultáneo* y el método *secuencial*. En el método simultáneo se calculan todas las variables involucradas simultáneamente. Por otro lado, en el método secuencial se resuelve cada ecuación para su variable dominante (con mayor impacto sobre la ecuación) y tratando a las demás variables como conocidas. Cuando las ecuaciones son lineales y levemente acopladas, el método simultáneo es la

mejor opción. En ocasiones ambos métodos pueden ser combinados.

En el método secuencial, luego de calcular todas las variables se debe iterar sobre el sistema de ecuaciones, sustituyendo cada variable por el valor hallado, y recalcular la variable dominante. El proceso se repite hasta alcanzar la convergencia, en la que las soluciones actualizadas difieren de la anterior en menos de cierta tolerancia previamente establecida.

El modelo CAFFA3D.MBRI en el que se basa esta tesis, precisamente recurre a métodos secuenciales. Se resuelve cada ecuación como función de una sola variable (variable dominante), que tiene la forma de la Ec. 2.1, con lo que se obtiene el valor de dicha magnitud en todo el dominio de manera aproximada. Esto se hace con un método iterativo y a las iteraciones realizadas se les llama iteraciones *internas* (*inner iterations*).

Una vez que resolvimos todas las ecuaciones del sistema, tendremos los valores actualizados de todas las variables que deseamos hallar, pero, debido al acoplamiento del sistema, las ecuaciones que resolvimos se verán modificadas (ya que sus coeficientes han cambiado). Por lo tanto, el nuevo paso es actualizar todas las ecuaciones y volverlas a resolver de manera iterativa. Las interaciones que hacemos al actualizar sucesivamente las ecuaciones se denominan iteraciones *externas* (*outer iterations*), y se deben distinguir de las iteraciones internas, que son empleadas para resolver cada ecuación ya actualizada.

En la MFC las ecuaciones involucradas son:

- ecuación de balance mecánico (ecuación de Navier-Stokes), con la velocidad como variable dominante
- la ecuación de balance de masa, que tiene a la presión como variable dominante
- ecuación de transporte de escalares (si aplica), donde el correspondiente escalar es la variable dominante

En la Fig. 2.1 se esquematiza la estrategia de resolución del CAFFA3D.MBRI.

Cada ecuación se resuelve realizando la cantidad de iteraciones internas predefinidas (o hasta que alcancen cierto umbral de convergencia, también predefinido). Las variables que no sean dominantes en la ecuación a resolver se sustituyen por su último valor calculado.

Cuando se hayan resuelto todas las ecuaciones se habrá completado una iteración externa y se vuelve a iniciar el ciclo, hasta realizar la cantidad de iteraciones externas predefinidas o alcanzar el nivel de convergencia deseado. En

ese momento se tendrá la solución completa del sistema para el paso temporal actual y se podrá avanzar al siguiente.

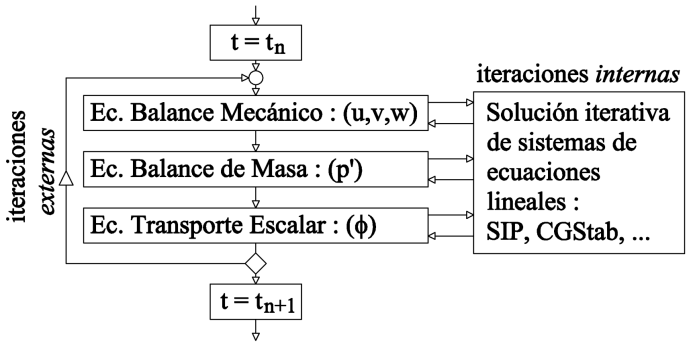


Figura 2.1: Esquema general del proceso iterativo para un paso temporal (adaptado de [7]).

Para mitigar cambios bruscos en los valores de una determinada variable cuando se completa una iteración externa (lo que dificulta la convergencia del esquema completo), se utilizan técnicas como la de sobre-relajación (*over relaxation*), que describimos en la Sec. 2.3.

Finalmente, si las ecuaciones algebraicas que surgen de la discretización espacial de las ecuaciones del problema involucran a una gran cantidad de puntos del dominio (esto está sujeto al orden del esquema que se haya elegido), el costo computacional para su resolución puede ser excesivo o imposible de solventar. En consecuencia se suele trabajar con esquemas que involucran solo a los vecinos más cercanos a cada nodo de la malla. Sin embargo, esto puede complicar la convergencia del esquema numérico, ya que los puntos del dominio que están alejados entre sí serán independientes en cada ecuación del sistema, a diferencia de lo que sucede en el caso físico de estudio. Una alternativa para resolver este tipo de problemas es la *corrección diferida*, que describimos en la Sec. 2.4.

2.3. Técnica de sobre-relajación

En esta sección presentamos la técnica de sobre-relajación [8], que se utiliza para mitigar cambios bruscos de la solución en el desarrollo de esquemas secuenciales.

Partimos de la ecuación algebraica que resulta de la discretización de las EDP para una variable genérica ϕ, en un punto P de la malla y al comienzo de

la n-ésima iteración externa:

$$A_P \phi_P^n + \sum_l A_l \phi_l^n = Q_P, \tag{2.2}$$

donde el subíndice l recorre los nodos de cálculo vecinos de P (los nodos involucrados dependerán del esquema de discretización), Q_P contiene los términos que no dependen explícitamente de ϕ^n. Los coeficientes A_l y el término fuente Q_P pueden depender también de la solución obtenida en la iteración externa anterior (ϕ^{n-1}), según el esquema de discretización utilizado. Esta ecuación es lineal y el sistema de ecuaciones para el dominio completo de la solución es resuelto usualmente de manera iterativa (iteraciones internas).

Si durante las primeras iteraciones externas permitimos que la solución sufra los cambios que la Ec. 2.2 requiere, se pueden generar inestabilidades. Por ejemplo, si ϕ corresponde a la fuerza que el fluido ejerce sobre un rígido, trasladado al comenzar cada paso temporal de simulación, durante las primeras iteraciones externas dicha fuerza puede experimentar grandes variaciones. Estas pueden ser mitigadas si se restringe la variación de ϕ^n a sólo una fracción α_ϕ de lo que implica la Ec. 2.2, de la siguiente manera:

$$\phi^n = \phi^{n-1} + \alpha_\phi \left(\phi^{new} - \phi^{n-1} \right), \tag{2.3}$$

donde ϕ^{new} es el resultado de la Ec. 2.2 y el factor de sobre-relajación satisface $0 < \alpha_\phi < 1$.

Una vez alcanzada la convergencia de las iteraciones externas, se obtiene $\phi^{new} \approx \phi^{n-1}$. Por lo tanto, el método conduce a la solución ϕ^n buscada, evitando grandes variaciones de esta durante el proceso iterativo.

2.4. Aproximación de corrección diferida

Hemos visto que, como resultado de discretizar las EDP del problema físico, obtenemos un sistema de ecuaciones lineales algebraicas de la forma [6] de la Ec. 2.2. La cantidad de vecinos de P que intervienen en esta ecuación depende del orden del esquema de discretización utilizado. Esquemas de mayor orden requieren mayor cantidad de puntos en la malla de cálculo y, por lo tanto, aumenta el costo computacional para su resolución. Por otro lado, al considerar menos vecinos, se disminuye el costo computacional pero el esquema será de

menor orden.

Una opción intermedia entre estas dos situaciones consiste en que l recorra únicamente a los vecinos más cercanos a P en la Ec. 2.2, y el resto de los nodos vecinos evaluarlos en la iteración externa previa para que contribuyan como término fuente (Q_P). Sin embargo, estos términos que tratamos de forma explícita pueden ser cruciales y así conducir a que la iteración diverja. Para prevenir la divergencia se puede aplicar una fuerte sobre-relajación de los cambios entre una iteración y la siguiente (como vimos en la Sec. 2.3), resultando en una convergencia lenta.

Una alternativa es la corrección diferida, que consiste en utilizar ambas discretizaciones de las EDP del problema original, de mayor orden y de menor orden.

Dado un término de la ecuación original F_e, llamamos F_e^H a una aproximación por un esquema de mayor orden y F_e^L a una aproximación de menor orden. Entonces, el método consiste en usar la siguiente expresión como discretización de F_e [9]:

$$F_e = F_e^L + \left(F_e^H - F_e^L\right)^{old}, \tag{2.4}$$

donde la etiqueta *old* indica que ese término es calculado explícitamente a partir de los campos obtenidos en la iteración externa anterior.

Cuando se alcanza la convergencia, F_e^L y $\left(F_e^L\right)^{old}$ coinciden, y la aproximación de F_e resulta ser la correspondiente al esquema de mayor orden. Este es el fundamento de la técnica que, como vemos, permite tener una solución de gran precisión, involucrando pocos vecinos y, por lo tanto, manteniendo un bajo costo computacional.

La corrección diferida es usada cuando se necesitan aproximaciones de mayor orden para tratar situaciones de no-ortogonalidad de la malla de cálculo, o para evitar efectos no deseados, como ser oscilaciones espúrias en las soluciones (como ser las que se mencionan en la Sec. 3.7).

Existe otra opción, que es agregar un factor de mezcla de esquemas o *blending* γ (o *Gds*[1]), con $0 \leq \gamma \leq 1$, multiplicando al término explícito de la Ec. 2.4, para generar así una mezcla entre un esquema puramente de menor orden (para $\gamma = 0$) y uno puramente de mayor orden (para $\gamma = 1$), de la siguiente manera:

$$F_e = F_e^L + \gamma \left(F_e^H - F_e^L\right)^{old}, \tag{2.5}$$

[1]De sus siglas en inglés *Gamma Differencing Scheme*.

cuya expresión se reduce a la Ec. 2.4 cuando $\gamma = 1$.

Este método se suele usar para evitar oscilaciones que resultan de usar métodos de mayor orden en mallas que no son lo suficientemente finas. Por ejemplo, para computar el flujo en torno a un cuerpo es deseable usar una malla suficientemente fina cerca del cuerpo y una más gruesa lejos de él, donde el flujo prácticamente no se ve alterado y no se requiere de gran precisión. Sin embargo, un esquema de mayor orden puede generar oscilaciones en la región de malla gruesa, estropeando la solución completa.

Como las variables varían lentamente en la región de la malla gruesa (lejanas al cuerpo), podemos reducir el orden de la aproximación allí sin afectar la solución en la región de la malla fina. Esto se puede lograr usando un factor de *blending* sólo en la región de la malla gruesa.

Capítulo 3

Método de Volúmenes Finitos

Como mencionamos en el capítulo anterior, el método predilecto para la resolución numérica de problemas en el área de mecánica de los fluidos es el Método de Volúmenes Finitos (MVF) [5]. Para calcular un determinado campo ϕ, el MVF parte de la forma integral de su ecuación de conservación:

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{S} \rho \phi \left(\vec{v} \cdot \hat{n} \right) dS = \int_{S} \Gamma \left(\nabla \phi \right) \cdot \hat{n} dS + \int_{\Omega} q_{\phi} d\Omega, \tag{3.1}$$

donde Ω es cualquier porción del dominio físico donde se busca resolver la ecuación, S es la superficie exterior que delimita a Ω, q_{ϕ} es una fuente o sumidero y Γ es el coeficiente de difusión.

En particular, el dominio total del problema físico se subdivide en un número finito de pequeños volúmenes de control o celdas, que son cada uno de los volúmenes Ω donde se aplica la Ec. 3.1.

Estas celdas cubren completamente al dominio total sin solaparse entre sí y conforman la malla de discretización del dominio. Los centros de cada celda son los que ya mencionamos como puntos o nodos de cálculo.

El siguiente paso del MVF es discretizar los diferentes términos de la Ec. 3.1, es decir, aproximar cada término por un conjunto de ecuaciones algebraicas (como vimos en la Sec. 2.2) que, tras su resolución, obtenemos una solución aproximada del problema original en los nodos de cálculo.

El CAFFA3D.MBRI es precisamente una implementación del MVF, y los detalles sobre las discretizaciones seguidas se describen a lo largo de este capítulo.

3.1. Ecuaciones de la Mecánica de los Fluidos

El modelo matemático fundamental que rige la mecánica de los fluidos consiste en dos ecuaciones. La ecuación de balance de masa y la de balance de cantidad de movimiento, también conocida como ecuación de Navier-Stokes.

Consideremos una porción de volumen Ω del dominio, delimitada por la superficie S. Si el fluido es incompresible, la ecuación de balance de masa se puede escribir como:

$$\int_S (\vec{u} \cdot \hat{n}_s)\, dS = 0, \tag{3.2}$$

siendo $\hat{n}_s$ un versor normal y saliente a la superficie S en cada punto. El vector $\vec{u}$ la velocidad del fluido en cada punto, que expresamos en coordenadas cartesianas como $\vec{u} = u_1\hat{e}_1 + u_2\hat{e}_2 + u_3\hat{e}_3$, donde $\{\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3\}$ conforma una base del espacio tridimensional en esas coordenadas.

Por otro lado, la ecuación de balance de momento para un fluido Newtoniano, con la aproximación de Boussinesq [10] para los efectos de flotación debidos a pequeñas variaciones de densidad dadas por la temperatura, para u_1 se puede escribir como:

$$\begin{aligned}\int_\Omega \rho \frac{\partial u_1}{\partial t} d\Omega + \int_S \rho u_1 \vec{u} \cdot \hat{n}_s dS = \int_\Omega \rho\beta\,(T - T_{ref})\,\vec{g} \cdot \hat{e}_1 d\Omega \\ + \int_S -p\,(\hat{n}_s \cdot \hat{e}_1)\, dS + \int_S (2\mu D \cdot \hat{n}_s) \cdot \hat{e_1} dS,\end{aligned} \tag{3.3}$$

donde ρ y μ son la densidad y la viscosidad dinámica del fluido respectivamente, D es el tensor simétrico de deformación, β es su coeficiente de expansión térmica, T es el campo de temperatura, T_{ref} es una temperatura de referencia y $\vec{g}$ es la aceleración gravitatoria.

El último término de la ecuación es el término viscoso del balance mecánico y es el que agrega la fuerza debida a la fricción viscosa.

Estas dos ecuaciones conforman el modelo matemático que rige la dinámica de un fluido. Pueden existir ecuaciones adicionales, que se acoplan a estas ecuaciones y que modelan la evolución o transporte de un determinado campo adicional, como ser un determinado flujo de calor o el transporte de un contaminante.

El objetivo de las siguientes secciones es describir la implementación del MVF que sigue el CAFFA3D.MBRI. Tanto para la discretización del dominio co-

mo para aproximar las Ecs. 3.2 y 3.3 por un sistema de ecuaciones algebraicas.

3.2. Discretización del dominio

La aproximación abordada por el CAFFA3D.MBRI es definir una malla que se adapte a la geometría del dominio del problema, la que se divide por completo en celdas de seis caras, y se definen los puntos o nodos de cálculo como los centroides de dichas celdas.

En la Fig. 3.1 se muestra una celda de cálculo típica. Cada nodo P tiene seis nodos vecinos: W (dirección Oeste), E (dirección Este), N (dirección Norte), S (dirección Sur), T (dirección Arriba), B (dirección Abajo). Se usa letra imprenta mayúscula para señalar a los nodos, según la dirección en la que se encuentre respecto a P (la notación se hereda del idioma inglés).

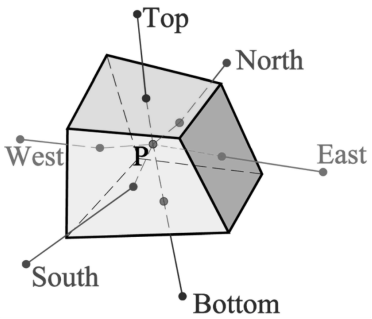


Figura 3.1: Celda o elemento de volumen usado por el CAFFA3D.MBRI donde se muestra el centro de celda P y sus seis nodos vecinos: W, E, N, S, T y B (bosquejo adaptado de [7]).

El centroide de cada cara se denota con letras minúsculas $c = w, e, n, s, t, b$, que se corresponden con la dirección en la que se encuentra con respecto al nodo central P.

Las caras de las celdas no son necesariamente planas. En el caso particular en que todas sus celdas son prismas rectangulares, la malla se denomina cartesiana.

En el caso del modelo CAFFA3D.MBRI, el dominio es cubierto por bloques de mallas *estructuradas*, es decir, cada celda interna que compone a estas mallas (se excluyen a las que conforman las fronteras) tiene el mismo número de celdas vecinas (esta propiedad de la malla también se conoce como conectividad regular). La principal ventaja de usar mallas estructuradas es que la matriz correspondiente al sistema de ecuaciones discretizadas (Ec. 2.1) es más simple.

Por lo tanto, cada celda de cálculo tiene exactamente seis celdas vecinas (dos celdas vecinas comparten una de sus seis caras). Además, las celdas no se superponen y no dejan ningún espacio entre ellas sin cubrir.

En particular, en los esquemas implementados en el CAFFA3D.MBRI el campo en cada nodo solo depende de su valor en las seis celdas vecinas (T, B, W, E, N y S), por lo que la matriz del sistema lineal es heptadiagonal (ya que también se incluye el valor de los campos en el nodo P).

Como consecuencia de que las caras de cada hexaedro no son necesariamente planas, sus propiedades se computan a partir de su composición de dos triángulos. Consideremos la cara $ABCD$ de la celda de la Fig. 3.2(a). Esta se puede considerar compuesta por los triángulos ABC (de la Fig. 3.2(b)) y el triángulo ACD.



Figura 3.2: Celda típica de cálculo (a) y uno de los dos triángulos en los que se puede dividir (b) (adaptado de [7]).

Si definimos al vector $\vec{S}_{ABC}$ en la Fig. 3.2(b) como el vector normal a ABC en su baricentro c_{ABC}, y con norma igual al área del triángulo, se obtiene: $\vec{S}_{ABC} = \frac{1}{2}\left(\overrightarrow{AB} \times \overrightarrow{AC}\right)$ y $c_{ABC} = \frac{1}{3}\left(\overrightarrow{OA} + \overrightarrow{OB} + \overrightarrow{OC}\right)$.

Luego, definimos el vector normal a la cara $ABCD$ a partir de las dos superficies triangulares que la componen:

$$\overrightarrow{S}_{ABCD} = \overrightarrow{S}_{ABC} + \overrightarrow{S}_{ACD} \tag{3.4}$$

y el baricentro se calcula utilizando la magnitud de estos vectores:

$$\vec{c}_{ABCD} \cdot \left|\overrightarrow{S}_{ABCD}\right| = \vec{c}_{ABC} \cdot \left|\overrightarrow{S}_{ABC}\right| + \vec{c}_{ACD} \cdot \left|\overrightarrow{S}_{ACD}\right| \tag{3.5}$$

Por último, el volumen $\Delta\Omega$ de la celda se calcula a partir del teorema de

la divergencia de Gauss, de la siguiente manera:

$$\Delta\Omega = \int_{\Omega} d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (x\hat{e}_1)\, d\Omega = \int_{S} x\,(\hat{e}_1 \cdot \hat{n}_s)\, dS \approx \sum_{k} c_x^k S_x^k, \tag{3.6}$$

donde el índice k recorre las seis caras de la celda, $k = w, e, n, s, t, b$, c_x^k es la coordenada x del baricentro de la cara k, y $S_x^k = (\hat{e}_1 \cdot \hat{n}_{s^k}) \cdot S^k$, siendo S^k el área de dicha cara y $\hat{n}_{s^k}$ su versor normal y saliente en su baricentro c^k.

Para concluir la caracterización del tipo de mallas que utiliza el CAFFA3D.MBRI, señalamos que estas son *colocadas* (*collocated grids*). Este tipo de mallas, en contraposición con las mallas *decaladas* (*staggered grids*), todos los campos son calculados en los nodos de cálculo, es decir, en los centroides de las celdas.

En el caso de mallas decaladas, las variables escalares (presión, densidad, entalpía total, etc.) son almacenadas en los centroides de los volúmenes de control, mientras que la velocidad o el momento son calculadas en los centros de cara de dichas celdas. Estas mallas presentan la notable ventaja de no requerir interpolaciones para calcular las velocidades en los centros de cara, necesarias para el cálculo de flujos en las paredes de las celdas. Sin embargo, esta discretización puede presentar dificultades cuando trabaja con mallas no-cartesianas.

El uso de mallas colocadas perdió popularidad durante un largo tiempo porque presentaba dificultades con el acoplamiento presión-velocidad al trabajar con flujos incompresibles, como ser la ocurrencia de oscilaciones en el campo de presiones. Sin embargo, cuando en los años 80 se desarrollaron algoritmos que resolvían dicho acoplamiento (como el del Anexo D), la popularidad de las mallas colocadas comenzó a aumentar.

De esta manera hemos descrito la estrategia de discretización del dominio implementada en el modelo CAFFA3D.MBRI, que consiste en cubrir el dominio por bloques de mallas colocadas y estructuradas por bloque (el CAFFA3D.MBRI contempla, mediante interpolaciones, situaciones donde celdas ubicadas sobre fronteras compartidas por bloques contiguos no tengan igual cantidad de vecinos).

3.3. Interpolación de datos

En el proceso de discretización de las Ecs. 3.2 y 3.3 se deben interpolar los valores calculados de los campos, correspondientes a los nodos de la malla, a los centros de cara de las celdas. En particular, esto es crucial para el cálculo de flujos a través de dichas caras.

Existen diversos esquemas de interpolación, como ser la interpolación lineal [6] para mallas cartesianas, o su versión modificada, de interpolación lineal para mallas complejas propuesto por Lilek *et al.* (1997) [11]. Si bien esta última técnica contempla en buena aproximación la posible no-ortogonalidad de las mallas, es necesario recurrir a técnicas más precisas.

El esquema que describimos a continuación y que es utilizado en la actual implementación CAFFA3D.MBRI y fue desarrollado por Usera *et al.* (2008) [3]. El método se llama Método Mejorado de Interpolación ya que resulta ser una mejor aproximación que las antes mencionadas para la solución del problema de interpolación, principalmente en mallas con importante componente de no-ortogonalidad.

El método se basa en expansiones en series de Taylor finitas (FTSE[1]) [12] para calcular el valor interpolado de ϕ_e utilizando, además de P y E (como hacen los esquemas centrados), a los nodos S, N, B y T, como se muestra en la Fig. 3.3.

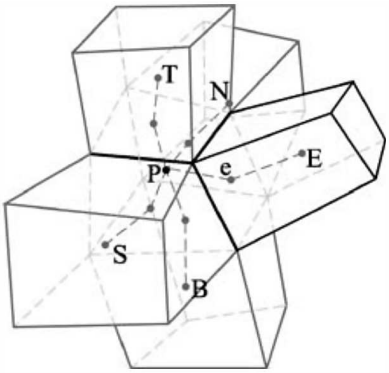


Figura 3.3: Elemento de volumen P con los vecinos E, S, N, B y T, utilizados para una interpolación mejorada. Bosquejo adaptado de [3].

Comenzamos escribiendo la serie de Taylor a primer orden, para el campo

[1]Del inglés *Finite Taylor Series Expansion*.

ϕ en torno al punto e, evaluado en un punto genérico A:

$$\phi_A - \phi_e \approx \overrightarrow{eA} \cdot (\nabla\phi)_e \tag{3.7}$$

Los valores geométricos en la Ec. 3.7 son conocidos, al igual que los valores de ϕ en los nodos. Combinando esta ecuación para los seis nodos ($A = P, E, S, N, B, T$), podremos eliminar la variable desconocida $(\nabla\phi)_e$ y así pasar a calcular ϕ_e.

Si aplicamos la Ec. 3.7 para los nodos P y E, obtenemos:

$$\begin{cases} \phi_P - \phi_e &= \overrightarrow{eP} \cdot (\nabla\phi)_e \\ \phi_E - \phi_e &= \overrightarrow{eE} \cdot (\nabla\phi)_e \end{cases} \tag{3.8}$$

Si restamos estas ecuaciones, y repetimos el razonamiento con los nodos S y N, y B y T, llegamos a:

$$\begin{cases} \phi_P - \phi_E = & \overrightarrow{EP} \cdot (\nabla\phi)_e \\ \phi_S - \phi_N = & \overrightarrow{NS} \cdot (\nabla\phi)_e \\ \phi_B - \phi_T = & \overrightarrow{TB} \cdot (\nabla\phi)_e \end{cases} = \begin{bmatrix} \overrightarrow{EP} \\ \overrightarrow{NS} \\ \overrightarrow{TB} \end{bmatrix} \cdot (\nabla\phi)_e \tag{3.9}$$

Denotando con $\partial_i\phi_e$ a la derivada en la dirección $i = x, y, z$ de ϕ evaluada en el centro de cara e, la Ec. 3.9 consiste en la siguiente ecuación algebraica:

$$\begin{bmatrix} x_P - x_E & y_P - y_E & z_P - z_E \\ x_S - x_N & y_S - y_N & z_S - z_N \\ x_B - x_T & y_B - y_T & z_B - z_T \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \partial_x\phi_e \\ \partial_y\phi_e \\ \partial_z\phi_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_P - \phi_E \\ \phi_S - \phi_N \\ \phi_B - \phi_T \end{bmatrix} \tag{3.10}$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones algebraicas se obtiene el gradiente interpolado $(\nabla\phi)_e$ mediante el método FTSE [3].

Finalmente, sustituyendo $(\nabla\phi)_e$ en una de las Ecs. 3.9, obtenemos el valor del campo interpolado al centro de cara ϕ_e buscado:

$$\begin{aligned} \phi_e &= \phi_P - (x_P - x_e)\,\partial_x\phi_e - (y_P - y_e)\,\partial_y\phi_e - (z_P - z_e)\,\partial_z\phi_e \\ &= \phi_P - \overrightarrow{eP} \cdot (\nabla\phi)_e \end{aligned} \tag{3.11}$$

3.4. Aproximación para las integrales de superficie y de volumen

En esta sección se presenta la aproximaciones que se hacen para las integrales de volumen y de superficie que participan en la Ec. 3.3 en el CAFFA3D.MBRI y se muestra cómo son aplicadas al término de flotación y al de presión.

3.4.1. Aproximación de integrales de superficie

Llamemos f a la componente del vector de flujo de un determinado campo en la dirección normal a una superficie S. Por ejemplo, el flujo convectivo de un campo ϕ a través de la superficie S se tiene $f = \rho\phi\,(\vec{v} \cdot \hat{n}_s)$, mientras que su flujo difusivo es $f = \Gamma\,(\nabla\phi) \cdot \hat{n}_s$, siendo ρ la densidad del fluido y Γ el coeficiente de difusividad.

El flujo neto a través de la superficie de una celda es igual a la suma del flujo a través de sus seis caras S_k, con $k = \{w, e, n, s, t, b\}$:

$$\int_S f dS = \sum_k \int_{S_k} f dS \tag{3.12}$$

Para calcular las integrales de la Ec. 3.12, se debe conocer el integrando f sobre toda la superficie S_k. Como sólo se conocen los valores de ϕ en los centros de celda, una aproximación debe ser introducida. La aproximación más simple es la regla del punto medio, donde la integral es aproximada por el producto del integrando evaluado en el centro de la cara (calculado con el método mejorado de interpolación) y el área de la cara. Por ejemplo, el flujo a través de la cara e es:

$$\int_{S_e} f dS = \overline{f}_e S_e \approx f_e S_e, \tag{3.13}$$

donde f_e es el valor de f interpolado al centro de cara, que lo consideramos como una estimación del valor promedio del campo sobre dicha cara ($\overline{f}_e \approx f_e$).

3.4.2. Integrales de volumen

El esquema más simple para aproximar integrales de volumen en una celda consiste en reemplazar la integral de volumen por el producto del valor medio del integrando en dicha celda y el volumen de la celda, y aproximar dicho promedio por el valor del integrando en el centro de la celda [6]. Por lo tanto,

la integral de volumen de un campo q en la celda con centro P y volumen $\Delta\Omega$ se aproxima por:

$$\int_{\Delta\Omega} q d\Omega = \overline{q}\Delta\Omega \approx q_P \Delta\Omega, \tag{3.14}$$

donde q_P es el valor que toma q en el centro de la celda P (cuyo valor es conocido, por usar mallas colocadas) y $\overline{q}$ es el valor promedio de q en la celda (aproximamos $\overline{q} \approx q_P$).

En la ecuación de balance mecánico existen dos términos que aproximaremos con este método. Estos son el término correspondiente a la fuerza de flotación:

$$\int_{\Delta\Omega} \rho\beta \left(T - T_{ref}\right) \vec{g} \cdot \hat{e}_1 d\Omega \approx \rho\beta \left(T_P - T_{ref}\right) \left(\vec{g} \cdot \hat{e}_1\right) \Delta\Omega, \tag{3.15}$$

que contribuye a la ecuación de balance mecánico discretizada como término fuente, y la contribución de la presión, cuyo término se convierte en una integral de volumen al utilizar el teorema de Gauss, de la siguiente manera:

$$\int_S -p\hat{n}_s \cdot \hat{e}_1 dS = \int_{\Delta\Omega} -\nabla \cdot \left(p\hat{e}_1\right) d\Omega = \int_{\Delta\Omega} -\left(\frac{\partial p}{\partial x_1}\right) d\Omega \approx -\left(\frac{\partial p}{\partial x_1}\right)_P \Delta\Omega. \tag{3.16}$$

El último término es tratado de manera explícita, es decir, contribuye al término fuente de la ecuación de balance mecánico.

3.5. Tratamiento de la derivada temporal

Los métodos de Euler explícito (*forward* Euler) e implícito (*backward* Euler) son los más simples para discretizar una derivada temporal. En cuanto a las condiciones de convergencia de estos métodos, el esquema *backward* Euler es el menos restrictivo (estas cuestiones se tratan en el Anexo B).

De esta manera, el primer término de la ecuación de balance mecánico (Ec. 3.3) se discretiza bajo un esquema de Euler implícito, y luego la integral de volumen se calcula por el método visto en la Sec. 3.4.2. Para la celda de volumen $\Delta\Omega$ y centro P, se obtiene:

$$\int_{\Delta\Omega} \rho \frac{\partial u_1}{\partial t} d\Omega \approx \frac{\rho}{\Delta t} \left(u_{1,P} - u_{1,P}^{old}\right) \Delta\Omega, \tag{3.17}$$

donde la etiqueta *old* señala valores del paso temporal anterior y contribuye al

término fuente de la ecuación algebraica final.

3.6. Aproximación de flujos convectivos

El flujo convectivo de un campo escalar ϕ a través de la cara S_e responde a la ecuación:

$$F_e^c = \int_{S_e} \rho\phi \left(\vec{u} \cdot \hat{n}_s\right) dS \tag{3.18}$$

Consecuentemente, F_e^c depende de los valores de las variables dependientes en las caras de celda (cara e, en este caso), afectando fuertemente tanto la estabilidad del algoritmo numérico, así como su precisión.

El esquema implementado en el modelo CAFFA3D.MBRI es un *blending* entre los esquemas:

- esquema *upwind* de diferenciación (UDS)[1], que es de primer orden y copia el valor del campo aguas arriba
- esquema centrado de diferenciación (CDS)[2], que es la interpolación de segundo orden más sencilla

La descripción de ambos esquemas y del *blending* entre ellos se detallan en el Anexo A.

Para aplicar estos esquemas a F_e^c, comenzamos por aproximar el flujo de masa a través de la cara e de la celda centrada en P con el valor del campo interpolado al centro de dicha cara ϕ_e:

$$\dot{m}_e = \int_{S_e} \rho \left(\vec{u} \cdot \hat{n}_s\right) dS \approx \rho_e \left(\vec{u}_e \cdot \hat{n}_{s_e}\right) S_e, \tag{3.19}$$

lo que permite reescribir la Ec. 3.18 como:

$$F_e^c \approx \dot{m}_e \phi_e \tag{3.20}$$

Discretizando esta expresión con un *blending* UDS-CDS, se obtiene:

$$\begin{aligned} F_e^c \approx & max\left(\dot{m}_e, 0\right)\phi_P + min\left(\dot{m}_e, 0\right)\phi_E \\ & + \gamma_{CDS}\left\{\dot{m}_e\phi_e - max\left(\dot{m}_e, 0\right)\phi_P - min\left(\dot{m}_e, 0\right)\phi_E\right\}^{old}, \end{aligned} \tag{3.21}$$

[1] De sus siglas en inglés *Upwind Differencing Scheme*.
[2] De sus siglas en inglés *Central Differencing Scheme*.

donde el primer término UDS a la derecha de la Ec. 3.21 es tratado de manera implícita en el sistema de ecuaciones algebraicas final, mientras que el término con la etiqueta *old* indica que los valores son calculados con la solución obtenida al finalizar la iteración externa previa y consiste en una corrección diferida explícita (aproximación explícita de mayor orden, CDS), que contribuye al término fuente de dicho sistema (ya que su valor es conocido).

Análogamente, la discretización del término convectivo de la Ec. 3.3

$$F_e^{c,u_1} = \int_S \rho u_1 \vec{u} \cdot \hat{n}_s dS \tag{3.22}$$

con el *blending* UDS-CDS resulta:

$$\begin{aligned} F_e^{c,u_1} \approx & max\left(\dot{m}_e, 0\right) u_{1,P} + min\left(\dot{m}_e, 0\right) u_{1,E} \\ & + \gamma_{CDS} \left\{\dot{m}_e u_{1,e} - max\left(\dot{m}_e, 0\right) u_{1,P} - min\left(\dot{m}_e, 0\right) u_{1,E}\right\}^{old}. \end{aligned} \tag{3.23}$$

A partir de la última ecuación se obtiene la contribución de los flujos convectivos al sistema de ecuaciones algebraicas para u_1:

$$F_e^{c,u_1} = A_P^{c,u_1,e} u_p + A_E^{c,u_1,e} u_E - Q_P^{c,u_1,e}, \tag{3.24}$$

donde el término explícito de la Ec. 3.23 (término con etiqueta *old*) contribuyen al término fuente ($-Q_P^{c,u_1,e}$).

3.6.1. Consideraciones sobre término convectivo para mallas móviles

Hasta aquí, el modelo CAFFA3D.MBRI trata a todas las variables desde un referencial absoluto fijo, es decir, todos los nodos de la malla se consideran en reposo. Sin embargo, es deseable que su tratamiento sea válido también para mallas móviles, por ejemplo, para permitir que se mueva de manera solidaria a un cuerpo rígido inmerso en un flujo.

En esas situaciones se debe tener especial cuidado con el tratamiento del término que involucra a la derivada temporal en la ecuación para el momento. El teorema de transporte de Reynolds [10] para la primera componente de la velocidad del fluido, sobre un volumen Ω del dominio físico con superficie

exterior S, conduce a:

$$\frac{d_A}{dt}\int_\Omega \rho u_{1,A} d\Omega = \frac{\partial}{\partial t}\left(\int_\Omega \rho u_{1,A} d\Omega\right) + \int_S \rho u_{1,A}\left(\vec{u}_A \cdot \hat{n}\right) dS, \tag{3.25}$$

donde A indica valores calculados en un referencial absoluto, en reposo, respecto del que se calculan las magnitudes y sus derivadas.

La derivada material debe dar el mismo resultado cuando se calcula en un referencial fijo o en un referencial móvil. Por lo tanto, si consideramos un referencial móvil R, que se mueve con velocidad absoluta $\vec{v}_T$, y calculamos la misma derivada de la Ec. 3.25, se cumple:

$$\frac{d_A}{dt}\int_\Omega \rho u_{1,A} d\Omega = \frac{d_R}{dt}\int_\Omega \rho u_{1,A} d\Omega, \tag{3.26}$$

donde el subíndice R indica que las derivadas son tomadas respecto al referencial móvil.

Aplicando nuevamente el teorema de transporte de Reynolds, se obtiene:

$$\frac{d_R}{dt}\int_\Omega \rho u_{1,A} d\Omega = \frac{\partial}{\partial t}\left(\int_\Omega \rho u_{1,A} d\Omega\right) + \int_S \rho u_{1,A}\left(\vec{u}_R \cdot \hat{n}\right) dS, \tag{3.27}$$

donde $\vec{u}_R$ es la velocidad del fluido medida en el referencial R, por lo tanto se cumple $\vec{u}_R = \vec{u}_A - \vec{v}_T$.

En el modelo CAFFA3D.MBRI, el término convectivo de la Ec. 3.22 se escribe como:

$$F_e^{c,u_1} = \int_S \rho u_1 \left(\vec{u} - \vec{v}_T\right) \cdot \hat{n}_s dS, \tag{3.28}$$

lo que garantiza que, incluso cuando la malla de cálculo tiene determinada velocidad, la solución corresponda al campo de velocidades absolutas.

La implementación actual contempla además el caso en que la malla móvil tenga una determinada rotación. Esto se hace sumando a $\vec{v}_T$ el término $\left(\vec{\Omega}_T \times \vec{r}_P\right)$, donde $\vec{\Omega}_T$ es la velocidad angular de rotación de la malla y $\vec{r}_P$ es el vector posición de cada celda P de la malla respecto al punto de giro.

3.7. Aproximación de flujos difusivos

Consideraremos a continuación la discretización del término difusivo de la Ec. 3.3 para la primera coordenada cartesiana a través de la cara e:

$$F_e^{d,u_1} = \int_{S_e} (2\mu D \cdot \hat{n_s}) \cdot \hat{e_1} dS, \tag{3.29}$$

donde D es el tensor simétrico de tasa de deformación, dado por:

$$D = \frac{1}{2}\left[\nabla\vec{u} + (\nabla\vec{u})^T\right], \tag{3.30}$$

cuyas componentes en las coordenadas cartesianas (x_1, x_2, x_3) son:

$$\nabla\vec{u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1, & u_2, & u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial y} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_3} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} \tag{3.31}$$

Para la Ec. 3.29, debemos calcular la componente del tensor según $\hat{e_1}$:

$$(\nabla\vec{u}) \cdot \hat{e_1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \end{pmatrix} \tag{3.32}$$

$$(\nabla\vec{u})^T \cdot \hat{e_1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \end{pmatrix} \tag{3.33}$$

Por lo tanto, la Ec. 3.29 resulta:

$$F_e^{d,u_1} = \int_{S_e} \mu\,(\nabla u_1) \cdot \hat{n_s} dS + \int_{S_e} \mu \frac{\partial}{\partial x_1} (u_j \hat{e_j}) \cdot \hat{n_s} dS, \tag{3.34}$$

donde hemos usado la notación de Einstein, de sumatoria sobre los índices que se repiten, para simplificar.

Si ρ y μ son constantes, la suma de la segunda integral a la derecha de la Ec. 3.34 sobre todas las caras de la celda da cero, debido a la ecuación de continuidad (Ec. 3.2). En caso contrario, ρ y μ igualmente varían suavemente (excepto para el caso de ondas de choque, con número de Mach mayor que 1) y dicha suma será igualmente mucho menor que la integral del primer término a la derecha de la Ec. 3.34 [6]. Por esta razón, este término se trata explícitamente:

$$\int_{S_e} \mu \frac{\partial}{\partial x_1} (u_j \hat{e_j}) \cdot \hat{n_s} dS \approx \mu_e S_e \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial x_1}\right)_e^{old} \cdot \hat{n}_{s_e}, \tag{3.35}$$

donde la etiqueta *old* indica valores obtenidos al final de la iteración externa anterior. La derivada a la derecha de la última ecuación se calcula a partir de las derivadas (calculadas al final de la iteración externa anterior) en los centros de celda vecinos.

El cálculo del primer término a la derecha de la Ec. 3.34 requiere de ciertas consideraciones y los detalles de este tratamiento se muestran en el Anexo C. Aquí aplicamos el resultado final, que es la Ec. C.7:

$$\int_{S_e} \mu \left(\nabla u_1\right) \cdot \hat{n}_s dS \approx \mu_e S_e \frac{\left(u_1^E - u_1^P\right)}{\left|\overrightarrow{PE}\right|} + \mu_e S_e \left(\nabla u_1\right)_e^{old} \cdot \hat{n}_{s_e} - \mu_e S_e \left(\nabla u_1\right)_e^{old} \cdot \frac{\overrightarrow{PE}}{\left|\overrightarrow{PE}\right|} \tag{3.36}$$

El primer término a la derecha es una aproximación implícita de primer orden del flujo difusivo y los otros dos términos explícitos componen una corrección diferida para el caso de mallas complejas.

Si combinamos el segundo término a la derecha de la Ec. 3.36 con el cálculo (también explícito) de la Ec. 3.35, identificamos:

$$\mu_e S_e \left(\nabla u_1\right)_e^{old} \cdot \hat{n}_{s_e} + \mu_e S_e \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial x_1}\right)_e^{old} \cdot \hat{n}_{s_e} = \left\{2\mu_e S_e \left(D_e \cdot \hat{n}_{s_e}\right)\right\}^{old} \cdot \hat{e}_1 \tag{3.37}$$

Sustituyendo estos resultados en la Ec. 3.34, se obtiene [3]:

$$F_e^{d,u_1} = \mu_e S_e \frac{\left(u_1^E - u_1^P\right)}{\left|\overrightarrow{PE}\right|} + \left\{2\mu_e S_e \left(D_e \cdot \hat{n}_{s_e}\right)\right\}^{old} \cdot \hat{e}_1 - \mu_e S_e \left(\nabla u_1\right)_e^{old} \cdot \frac{\overrightarrow{PE}}{\left|\overrightarrow{PE}\right|}, \tag{3.38}$$

El primer término a la derecha de esta ecuación corresponden a una aproximación implícita del gradiente de u_1 en e por diferencias centrales. Los otros dos términos son una corrección explícita de mayor orden (corrección diferida), que utiliza la expresión completa del tensor simétrico de deformación interpolado al centro de cara (D_e). Por lo tanto, los dos últimos términos contribuyen al sistema de ecuaciones algebraicas como término fuente ($-Q_P^{d,u_1,e}$), y el primer término contribuye de forma implícita:

$$F_e^{d,u_1} = A_P^{d,u_1,e} u_p + A_E^{d,u_1,e} u_E - Q_P^{d,u_1,e} \tag{3.39}$$

El esquema de interpolación puede ser el lineal estándar (CDS) o el esquema mejorado de interpolación.

En la Ec. 3.38, el primer término a la derecha es quien hace la contribución a la matriz de coeficientes (aproximación implícita). Podemos decir que representa la mejor aproximación del flujo difusivo que podemos realizar para que sea incluida en la matriz de coeficientes. El segundo y tercer término a la derecha de dicha ecuación contribuyen al término fuente, siendo aproximaciones explícitas. En particular, el término $2\mu_e S_e \left(D_e \cdot \hat{n}_{s_e}\right)$ corresponde al cálculo exacto del flujo pero para los valores de los campos correspondientes a la iteración externa anterior y el tercer término es una aproximación explícita que se cancela con el primer término (la aproximación implícita) cuando se haya alcanzado la convergencia.

3.8. Ecuación de continuidad y tratamiento del campo de presiones

El cálculo del campo de presiones le da consistencia al MVF, en el sentido que asegura que el sistema completo de ecuaciones (balance mecánico y continuidad) se resuelva simultáneamente.

El método implementado en el CAFFA3D.MBRI es el mostrado en Caretto *et al.* (1972) [13]. En este, al comenzar la iteración externa m-ésima se calcula una primera aproximación del campo de velocidades ($\vec{u}^*$) a partir de la ecuación de balance mecánico, pero considerando al gradiente de presiones como término fuente, usando los valores obtenidos en la iteración externa anterior (p^{m-1}). Estas velocidades se sustituyen en la ecuación de continuidad (Ec. 3.2) y, resolviendo el sistema de ecuaciones algebraico al que se llega, se obtiene una corrección para el campo de presiones (p') para la iteración externa presente ($p^m = p^{m-1} + p'$). El método *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations* (SIMPLE) realiza ciertas aproximaciones para calcular una corrección en el campo de velocidades ($\vec{u}'$) a partir de p' [6, 8], para obtener $\vec{u}^m = \vec{u}^* + \vec{u}'$. Los detalles de estos cálculos se describen en el Anexo D y aquí nos remitiremos a los resultados que allí se presentan.

Consideremos la expresión de la ecuación de continuidad en función de estas cantidades:

$$\sum_c \dot{m}_c = 0, \tag{3.40}$$

donde $\dot{m}_c$ es el flujo de masa a través de la cara c y la sumatoria se realiza sobre todas las caras de la celda. El término correspondiente a la cara e se puede escribir como:

$$\dot{m}_e = \dot{m}_e^* + \dot{m}_e', \tag{3.41}$$

donde $\dot{m}_e^*$ corresponde al flujo sin corregir y $\dot{m}_e'$ es la corrección.

Como el CAFFA3D.MBRI trabaja con mallas colocadas, todos los campos son calculados en los centros de celda. Aquí, $\dot{m}_e^*$ es aproximado con una interpolación CDS como:

$$\dot{m}_e^* = \overline{(\rho_e \vec{u}_e^*)} \cdot \hat{n_{s_e}} S_e, \tag{3.42}$$

donde la barra superior indica que el término se calculó mediante interpolación.

El método SIMPLE relaciona la corrección de la velocidad con la de la presión, como se explica en el Anexo D. Como $\dot{m}_e' = (\rho \vec{u}')_e \cdot \hat{n_{s_e}} S_e$, la corrección del flujo másico se calcula a partir de la corrección de la presión con la Ec. D.14 de dicho anexo, pero evaluándola aquí en el centro de cada e, de la siguiente manera:

$$\dot{m}_e' = \overline{\left(\frac{\rho \Delta \Omega}{A_P^u}\right)}_e (\nabla p')_e \cdot \hat{n_{s_e}} S_e, \tag{3.43}$$

donde el gradiente debe ser aproximado por diferencias centradas, con el campo p' en los centros de las celdas vecinas.

Consideraciones sobre conservación de la energía por parte del esquema y la posible presencia de oscilaciones espurias en el campo de presiones (causadas por el uso de mallas colocadas), requieren de una corrección adicional. La corrección consiste en agregar un término adicional (expresado entre paréntesis rectos) a la expresión del flujo másico corregido a través de la cara e, obteniendo [14, 11, 6]:

$$\begin{aligned} \dot{m}_e = {} & \overline{(\rho_e \vec{u}_e^*)} \cdot \hat{n_{s_e}} S_e \\ & - \overline{\left(\frac{\rho \Delta \Omega}{A_P^u}\right)}_e \left[(\nabla p^{m-1})_e - \overline{(\nabla p^{m-1})_e} \right] \cdot \hat{n_{s_e}} S_e + \overline{\left(\frac{\rho \Delta \Omega}{A_P^u}\right)}_e (\nabla p')_e \cdot \hat{n_{s_e}} S_e, \end{aligned} \tag{3.44}$$

donde $(\nabla p^{m-1})_e$ es el gradiente calculado en el centro de cara por un esquema centrado (como ser el de la Ec. C.3 del Anexo C) y $\overline{(\nabla p^{m-1})_e}$ es el gradiente interpolado a partir de su valor en los centros de celda. La corrección introducida actúa como un filtro que se activa cuando la presión oscila rápidamente.

Cuando la presión varía suavemente, el gradiente de presión y el gradiente de presión interpolado darán valores similares y el filtro tenderá a cero.

En la Ec. 3.44 se ha simplificado la notación de A_P^u respecto al Anexo D. Esta representa la suma de cada componente del gradiente $(\delta/\delta x_i)$ multiplicado por $\overline{(\rho\Delta\Omega/A_P^{u_i})}_e$ (con $i = 1, 2, 3$).

Finalmente, cuando se sustituye la Ec. 3.44 en la Ec. 3.40, se obtiene una ecuación algebraica para la corrección p' de la forma:

$$A_P^p \cdot p'_P + A_W^p \cdot p'_W + A_E^p \cdot p'_E + \cdots + A_T^p \cdot p'_T = Q_P^p \tag{3.45}$$

Resolviendo esta ecuación, se obtiene la corrección para la presión en los centros de celda, con los que se calcula la corrección en la velocidad:

$$\begin{aligned} p^m &= p^{m-1} + p' \\ \vec{u}^m &= \vec{u}^* + \vec{u}' \end{aligned} \tag{3.46}$$

De esta manera, el método SIMPLE cierra y amalgama el esquema numérico completo. Las velocidades y presiones corregidas en la Ec. 3.46 intervienen de manera explícita en la próxima iteración externa, repitiendo el proceso hasta alcanzar la convergencia deseada, es decir, hasta reducir la diferencia entre soluciones sucesivas (residuos) por debajo de cierto valor de tolerancia deseado. En caso de no lograr dicha reducción de residuos, se pasará al siguiente paso temporal cuando se haya completado una determinada cantidad de iteraciones externas, predefinida por el usuario.

Parte II

Desarrollo del producto

Capítulo 4

Método de Condiciones de Borde Inmersas

El IBM [1] fue desarrollado por Peskin en 1982 [4] para simular la dinámica de fluidos presente en las válvulas del corazón, trabajando sobre una malla cartesiana, que no conforma la geometría del corazón. Hasta ese momento, la forma convencional de abordar el problema era usar mallas que se ajustan a la superficie del cuerpo, como se ejemplifica en la Fig. 4.1. Construir una malla con la adecuada resolución local de la forma del cuerpo y, a la vez, con la menor cantidad posible de celdas, resulta en general una tarea de alto costo computacional. En particular, se vuelve evidente la necesidad de un método alternativo cuando el cuerpo inmerso en el fluido a su vez se mueve. Esto requiere la generación de nuevas mallas en cada paso de tiempo de la simulación [15].

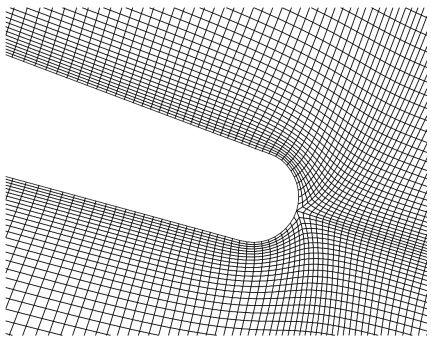


Figura 4.1: Ejemplo de una malla que se ajusta a la superficie de un rígido [16]

Surge así el método de Peskin, en el que la idea básica es imponer el efecto del borde inmerso sobre el flujo, sin modificar la malla de cálculo.

[1] Del inglés *Immersed Boundary Method*.

En este capítulo describimos la implementación del IBM, que existía previamente a esta tesis. Dicha implementación debió ser modificada para poder trabajar en conjunto con la técnica de anidamiento, que se describe en el Cap. 5, y es por ese motivo que este capítulo fue incluido dentro de la Parte II (desarrollo del producto). Como se tratará en la Sec. 5.3, al superponer mallas de cálculo en regiones ocupadas por un cuerpo rígido, el cálculo de la fuerza de su interacción con el fluido, así como del correspondiente momento de fuerza, dan valores incorrectos. Concretamente, luego de diversos análisis se lograron detectar los orígenes del problema mencionado y se implementaron modificaciones que restringen el cálculo de dichas magnitudes solo a la malla adecuada, lo que resolvió la situación de manera efectiva.

4.1. Formulación del IBM

En el trabajo de Peskin se propone forzar la velocidad del rígido en su borde mediante la incorporación de un término forzante adicional a la ecuación original para el momento [16]:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{1}{Re}\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_i} + f_i, \tag{4.1}$$

donde:

$$f_i = \begin{cases} 0 \text{ , en } \Omega_{fluido} \\ F_i \text{ , en } D \text{ o } \partial D \end{cases},$$

y con las condiciones:

$$u_i = {U_{imb}}^{(i)}, \text{ en } \partial D \tag{4.2}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \text{ en } \Omega_{fluido} + D \tag{4.3}$$

donde Ω_{fluido} es la región del dominio exterior al rígido, ∂D es la superficie borde del cuerpo y D los puntos interiores, U_{imb} es la velocidad del cuerpo y u_i es la componente $i = 1, 2, 3$ de la velocidad en el punto en cuestión. Esta modificación, de incluir un forzante en la ecuación del momento, que represente la fuerza de interacción sólido-fluido, en general se incluye como un término fuente en las ecuaciones algebraicas que discretizan a dicha ecuación.

La implementación se puede hacer de dos maneras diferentes, dependiendo de en qué etapa de generación del sistema algebraico de ecuaciones es introduci-

do el forzante f_i, lo que conduce a una dicotomía en los métodos de condiciones de borde inmersas. Por un lado, en la aproximación de forzante *continuo* el forzante f_i es incorporado a la ecuación de momento antes de ser discretizada. En contraposición, la aproximación de forzante *discreto* incorpora la acción del forzante después de que las ecuaciones fueron discretizadas. En el trabajo original de Peskin se sigue la aproximación de forzante continuo, mientras que en esta tesis se utiliza la aproximación de forzante discreto, como se detalla en la Sec. 4.2.

El principal desafío de la aproximación de forzante continuo es representar de manera fidedigna el forzante en la interface sólido-fluido. Una de las estrategias es considerar dicha superficie como elástica, teniendo además el desafío de restringir el efecto de la fuerza a la delgada pared, considerando funciones del tipo delta de Dirac, que se suelen aproximar por gaussianas. Estos métodos suelen tener severas restricciones para alcanzar la convergencia [17, 18], en particular para cuerpos de paredes rígidas, aunque son muy atractivos cuando se trata de sólidos con paredes elásticas.

En la aproximación de forzante discreto, el forzante es incorporado directamente a la ecuación ya discretizada, por lo que su discretización está íntimamente conectada a los detalles de la discretización de las ecuaciones, lo que hace que su implementación no sea sencilla. A pesar de ello, esta aproximación permite tener una representación precisa del borde del sólido, lo que es sumamente importante cuando se trabaja a altos números de Reynolds, además de que no introduce restricciones adicionales para la convergencia.

4.2. Implementación del IBM

Para desarrollar la forma en que se implementó el IBM en el CAFFA3D.MBRI, partimos de la segunda ley de Newton aplicada sobre un cuerpo de densidad ρ, que ocupa un volumen D, con superficie exterior ∂D, inmerso en un fluido:

$$\int_D \rho \vec{a}\, dV = \int_D \left(\vec{F}_{cuerpo} + \vec{F}_{imb} \right) dV + \oint_{\partial D} \vec{f}\, dS, \tag{4.4}$$

donde $\vec{f}$ abarca a todas las fuerzas de superficie, por unidad de superficie, que actúan sobre la superficie del cuerpo, como ser la presión y la fuerza viscosa, $\vec{F}_{cuerpo}$ representa a las fuerzas de cuerpo, por unidad de volumen, ejercidas

sobre el fluido ocupado encerrado en ∂D, y $\overrightarrow{F}_{imb}$ es la fuerza, también por unidad de volumen, que experimenta el cuerpo por moverse con una velocidad $\overrightarrow{U}_{imb}$ diferente a la que se movería el fluido encerrado en ∂D si no existiera dicha superficie.

Antes de incorporar la IBM, partimos de la siguiente ecuación algebraica para la componente u_i de la velocidad:

$$A_P u_{i,P} + \sum_{K=B,T,S,N,W,E} A_K u_{i,K} = Su, \tag{4.5}$$

donde el término fuente Su contempla a la integral de volumen en la Ec.4.4. Sin embargo, en este punto Su no incluye el término $\int_D \overrightarrow{F}_{imb} dV$, sino que la Ec. 4.5 discretiza a la ecuación:

$$\int_D \rho \overrightarrow{a}\, dV = \int_D \overrightarrow{F}_{cuerpo} dV + \oint_{\partial D} \overrightarrow{f}\, dS, \tag{4.6}$$

lo que es correcto sólo para las celdas externas al cuerpo. La estrategia que usamos para incorporar la fuerza de cuerpo debido a las condiciones de borde inmersas en las celdas interiores a ∂D es analizar la ecuación algebraica que se debe verificar en esos puntos.

Si bien *a priori* desconocemos el valor de $\int_D \overrightarrow{F}_{imb} dV$, sabemos que en los puntos interiores a ∂D la ecuación algebraica que se debe verificar es:

$$A_P U^{i,P}_{imb} + \sum_{K=B,T,S,N,W,E} A_K U^{i,K}_{imb} = Su^*, \tag{4.7}$$

donde $U^{i,P}_{imb}$ es la componente i de la velocidad del punto P del rígido, que conocemos, o que determinamos a partir de las ecuaciones cardinales discretizadas (que se trata en el Cap. 6).

La estrategia que usamos entonces es sustituir el término fuente Su de la Ec. 4.5 por Su^*, definido a partir de la Ec. 4.7. Por lo tanto, la ecuación algebraica que resolvemos en todo el dominio es la Ec. 4.5, con los mismos coeficientes (A_K, con $K = P, B, T, S, N, W, E$), excepto en las celdas interiores a ∂D, donde en cambio se resuelve:

$$A_P u^{(i)}_P + \sum_{K=B,T,S,N,W,E} A_K u^{(i)}_K = Su^*, \tag{4.8}$$

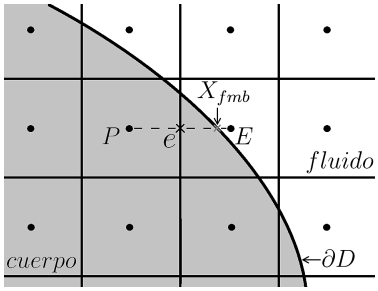


Figura 4.2: Situación en la que se debe recurrir a una interpolación para obtener un determinado campo en el punto E. La región sombreada en color gris corresponde al interior del cuerpo rígido.

cuya solución ya ha sido impuesta ($u_P^{(i)} = U_{imb}^{i,P}$), debido a nuestra elección del término fuente Su^*. Como en esta estrategia se ha modificado el término fuente, incorporando la acción del forzante que impone la presencia del cuerpo inmerso en el fluido a la ecuación para el balance de momento mecánico ya discretizada, esta implementación es una aproximación de forzante discreto.

En esta instancia se tiene un método para determinar la velocidad para las celdas externas e internas al cuerpo, es decir, cuyas fronteras se encuentran completamente contenidas en uno de los dos sectores. Pasamos ahora a describir el tratamiento para aquellas celdas que son atravesadas por la frontera del rígido ∂D. Para esto, en el CAFFA3D.MBRI se sigue la estrategia de interpolación propuesta por Liao *et al.* (2010) [19], en la que se hace uso de las denominadas celdas *de frontera inmersa* (*ghost cells*) [20, 21], que se definen como celdas que se encuentran dentro del rígido, pero que tienen al menos un vecino afuera del mismo, como es el caso de P en la Fig. 4.2.

Se busca determinar el campo de velocidades en el punto E de la Fig. 4.2, que es el centro de una celda atravesada por el borde del rígido. La celda con centro P es interior al cuerpo y P es el punto interior al cuerpo más cercano a E.

El primer paso es buscar el punto de intersección de la recta que une a P y E con el borde del cuerpo (X_{fmb}). La velocidad en ese punto $U_{imb}\left(X_{fmb}\right)$, la determinamos a partir del movimiento del rígido, dado que pertenece al mismo.

El segundo paso es calcular el gradiente de velocidades en el punto X_{fmb}. Este gradiente se aproxima por el gradiente en el punto E, es decir: $\nabla U\left(X_{fmb}\right) \approx \nabla U\left(E\right)$. Esta hipótesis es razonable para bajos números de Reynolds. Cuando se tratan problemas a altos Re se deben utilizar mallas suficientemente finas en

las cercanías al cuerpo rígido, para modelar con más precisión el flujo dentro de la capa límite (cuyo espesor escala como $Re^{-1/2}$ [10]).

Así, si $\left|\overrightarrow{X_{fmb}E}\right|$ es la distancia entre X_{fmb} y E, la velocidad en E la calculamos mediante la siguiente expresión:

$$U_E \approx U_{imb}\left(X_{fmb}\right) + \nabla U\left(E\right) \cdot \overrightarrow{X_{fmb}E}, \tag{4.9}$$

que se extiende para las tres componentes de la velocidad. El cálculo de $\nabla U\left(E\right)$ se hace con el teorema de la divergencia de Gauss y se utilizan los valores de U en los centros de cara (calculados con la interpolación mejorada FTSE) y de las áreas de las caras de la celda [3]. Para la componente según $\hat{e}_1$ de $\nabla U\left(E\right)$ se calcula:

$$\nabla U\left(E\right) \cdot \hat{e}_1 \approx \frac{\int_\Omega \nabla \cdot \left(U\hat{e}_1\right) d\Omega}{\Delta\Omega} = \frac{\int_S U\hat{e}_1 \cdot \hat{n}_s dS}{\Delta\Omega} \approx \frac{\sum_c U(c) S_c^1}{\Delta\Omega}, \tag{4.10}$$

donde c recorre los centros de cara de la celda y $S_c^1 = \hat{e}_1 \cdot \hat{n}_s S_c$, con S_c el área de la cara c y $\hat{n}_s$ el vector normal y saliente a dicha cara en c.

En el CAFFA3D.MBRI, al momento de resolver el sistema de ecuaciones algebraicas para el momento, primero se calcula el campo X_{imb}, cuyos elementos son las distancias de cada celda a la superficie de los cuerpos considerados, siendo negativo para los puntos interiores a estos. Así, se construye el sistema de ecuaciones algebraicas formado por la Ec. 4.8 para todas las celdas que se encuentran adentro del rígido ($X_{imb} \leq 0$) y por la Ec. 4.5 para todos los puntos que se encuentren afuera ($X_{imb} > 0$). Una vez resuelto el sistema de ecuaciones, se actualizan las velocidades en las celdas de frontera inmersa, con la Ec. 4.9. Luego, se procede a resolver la ecuación de la presión y de los campos que se encuentren activos en el modelo, y se pasa a la siguiente iteración externa.

A partir de este método, es posible calcular el flujo en presencia de un cuerpo rígido, pero además podemos calcular la fuerza $\overrightarrow{F}_{imb}$. La Ec. 4.8 nos proporciona el término fuente Su^* en presencia del rígido, por lo que contempla la fuerza que se ejerce sobre el resto del fluido en la superficie ∂D. Por otro lado, el término fuente Su de la Ec. 4.5 contiene esta misma fuerza pero en ausencia del cuerpo rígido. Por lo tanto, restando $(Su - Su^*)$ se obtiene cada componente de la fuerza sobre el cuerpo $\overrightarrow{F}_{imb}$. El cálculo preciso de esta fuerza es crucial para poder modelar satisfactoriamente la interacción sólido-fluido. La validación exhaustiva de estos cálculos en diferentes escenarios se aborda

en el Cap. 7.

Existen varias optimizaciones pendientes sobre el método presentado y que forman parte del trabajo a futuro. Por ejemplo, contemplar esquemas alternativos para el cálculo de gradientes, cuya precisión puede afectar sensiblemente al desempeño del método.

Por otro lado, es de interés perfeccionar la elección del esquema de interpolación para las velocidades en las celdas de frontera inmersa. En particular, el camino que actualmente sigue el modelo puede tener problemas de precisión en presencia de una capa límite, lo que actualmente se resuelve refinando el paso de malla, tanto como sea necesario. Este puede ser un problema importante a la hora de considerar los recursos de cálculo con los que se cuente. Una alternativa es precisamente la técnica de anidamiento, que tratamos en el Cap. 5 y que permite hacer un refinamiento local de malla, en las cercanías de la frontera del cuerpo. También es posible considerar la alternativa de acoplar modelos numéricos de capa límite, sobre el que han estado trabajando otros integrantes del grupo de investigación (grupo de Mecánica de los Fluidos Computacional).

Otro aspecto a considerar es el desacople de la presión entre regiones separadas por cuerpos rígidos muy delgados. En esos casos puede suceder que la solución correspondiente a una determinada región «contamine» a la solución correspondiente a otra región independiente [16].

Capítulo 5

Técnica de anidamiento

Durante las últimas tres décadas, se han desarrollado numerosas técnicas computacionales para modelar flujos que involucran cuerpos móviles inmersos. Las tres principales son: la aproximación de deformación de mallas, la aproximación de regeneración de mallas, y la aproximación de solapamiento de mallas.

La opción de deformación de mallas utiliza mallas adaptativas, que se ajustan a la superficie del cuerpo en cada paso temporal, conservando la topología (tanto para mallas estructuradas [22] como para mallas no-estructuradas [23]) y número total de celdas que la componen. Una de las ventajas de esta aproximación son sus propiedades completamente conservativas, mientras que presenta limitaciones para representar casos en que el cuerpo realiza grandes desplazamientos entre dos pasos temporales o en que realiza rotaciones. La manera de abordar estas situaciones es utilizando mallas deslizantes, lo que igualmente es restrictivo debido a que las interfaces entre las mallas móviles y las fijas deben ser comunes y no se permite solapamiento.

En la segunda aproximación mencionada, de regeneración de mallas, la malla cercana al cuerpo móvil es regenerada en cada paso temporal, en función de la nueva posición del cuerpo. En este caso no es necesario conservar la topología de la malla, lo que permite movimientos de malla arbitrarios. Sin embargo, la principal desventaja de esta aproximación es que las variables del flujo deben ser interpoladas de la malla del paso temporal anterior a la nueva malla, del paso temporal actual. Otra desventaja es que la regeneración de mallas es una operación muy costosa (en términos numéricos) y se debe realizar muchas veces, aún cuando la estrategia sea regenerar únicamente la

porción de malla en las proximidades del cuerpo [24].

La técnica de deformación de mallas y de regeneración de mallas caen en la categoría de métodos de mallas conformes al dominio, donde el dominio computacional es totalmente cubierto en cada paso temporal por mallas que no se solapan. La técnica de solapamiento de mallas o técnica de *anidamiento* (*nesting*) [25] es el método alternativo a los anteriores y es el que se encuentra implementado en el modelo CAFFA3D.MBRI. En esta tesis, apoyándonos en dicha implementación, adaptamos la técnica para que las mallas anidadas sigan el movimiento de los cuerpos rígidos y siempre tengamos buena precisión de los cálculos en sus inmediaciones.

En este capítulo presentamos la técnica de *nesting*, cómo era su implementación en el CAFFA3D.MBRI previa a esta tesis (Secs. 5.1 y 5.2) y cómo adaptó la técnica para lograr nuestro cometido, que consisten en mallas anidadas que se muevan de manera solidaria a los cuerpos (Sec. 5.3).

5.1. Características de la técnica

El uso de mallas no-estructuradas que se ajusten a la superficie de un cuerpo arbitrario o del dominio del problema, independientemente de su complejidad, es un método que predomina entre los códigos en la mecánica de los fluidos computacional. Sin embargo, en aquellos problemas que involucran cuerpos en movimiento relativo la malla debe ser deformada en cada paso temporal, y si el movimiento es grande la deformación será severa. Esto se traduce en un alto costo computacional para la generación de las mallas en cada paso de tiempo, debiendo modificar parte o la totalidad de la malla de cálculo.

En contraposición, en la técnica de anidamiento el dominio computacional es cubierto por un número de mallas que se solapan entre sí de manera arbitraria. Esto ofrece gran flexibilidad en la resolución de problemas que involucran varios cuerpos en movimiento relativo, debido a su flexibilidad para superponer entre sí mallas de diferentes características. La técnica incorporada al CAFFA3D.MBRI, sigue la estrategia propuesta por Hadzic (2006) [25], diseñada para:

- alcanzar un fuerte acoplamiento de todas las mallas para tener una solución iterativa eficiente
- proporcionar soluciones «suaves» (desde el punto de vista matemático,

sin discontinuidades) en las regiones solapadas
- garantizar la conservación de la masa global, a través de todas las mallas
- ser aplicable a mallas compuesta de poliedros arbitrarios
- permitir un movimiento relativo arbitrario entre los cuerpos

Estas propiedades garantizan que el procedimiento de resolución iterativa sea eficiente, que la precisión de la solución en la vecindad de la región solapada sea consistente con la precisión de la solución en el resto del dominio, así como que la solución en la región solapada sea la misma en todas las mallas superpuestas.

5.2. Esquema del método

Los dos elementos principales que componen el esquema del método son:

- descomponer el dominio computacional en sub-dominios, y generar mallas apropiadas para cada sub-dominio
- desarrollar un método de acoplamiento que permita obtener una solución precisa, eficiente y única de las ecuaciones del problema en las mallas solapadas

En general, el primer elemento mencionado suele ser más sencillo que generar una única malla para el dominio completo. No es necesario que las mallas asociadas a los sub-dominios encajen entre sí de una determinada manera, pero sí deben solaparse lo suficiente, de forma de proveer de los medios necesarios para el acoplamiento de las soluciones entre los componentes de la malla.

Cada malla que compone al esquema tiene tres tipos de celdas o puntos:

- celdas *activas*, que son los utilizados para discretizar las ecuaciones en derivadas parciales del problema (como la ecuación del momento) o las condiciones de borde
- celdas *de interpolación*, que interpolan el valor de su solución desde la malla anidada
- celdas *inactivas* o «huecos», que son puntos que no se consideran durante la discretización de las ecuaciones en esa malla

El algoritmo básico, desarrollado por Benek, Steger y Dougherty (1983) [26] y Kreiss (1983) [27], consta principalmente de dos pasos. Primero, determinar todas las celdas inactivas, que están afuera del dominio computacional o que

son innecesarias en regiones con superposición excesiva (allí se considera sólo la solución en la malla más fina, o de mayor *jerarquía*, como veremos) y, segundo, encontrar los puntos de malla desde los que se interpolarán los datos (celdas *donantes*) hacia las celdas *receptoras*. En las siguientes secciones de este capítulo se describe el proceso completo de implementación para el CAFFA3D.MBRI, comenzando con la clasificación de las celdas de cada malla según su rol en el método.

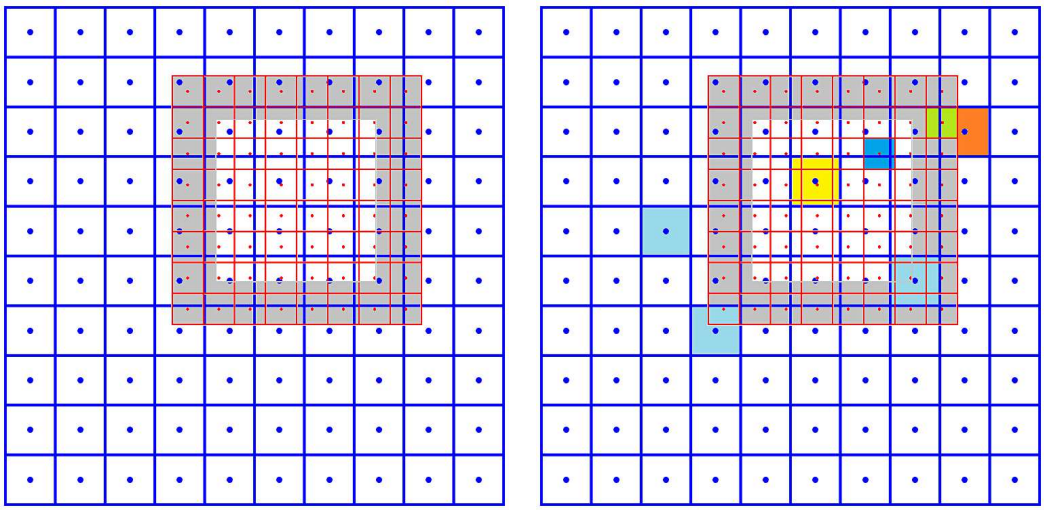
5.2.1. Clasificación de celdas según su función dentro de la técnica de anidamiento

Para explicar la forma en que se clasifican las celdas en el CAFFA3D.MBRI, consideraremos el caso de dos niveles de anidamiento. En este caso tenemos una malla donante o *background* G_1, que es la de menor jerarquía, y una malla anidada G_2 (receptora) más fina y anidada sobre la primera. Denotaremos con ∂G_2 a la frontera o borde de la malla G_2. En la Fig. 5.1(a) se ejemplifica esta situación: la malla azul es la malla *background* (G_1) y la malla roja es la malla anidada (G_2).

El primer paso es definir una zona de solapamiento entre G_1 y G_2. Para esto se define la longitud de solapamiento δ (definida por el usuario), y todos los puntos interiores a ∂G_2 y cuya distancia a dicha frontera sea menor que δ, componen la región de solapamiento. Alcanza con definir δ como el tamaño de unas pocas celdas de G_2, como se señala sombreado con color gris en la Fig. 5.1(a).

El siguiente paso es clasificar las celdas de G_1 y G_2 entre los tres tipos mencionados. Las celdas activas son aquellas que participarán en el cálculo del flujo, mientras que las inactivas son aquellas que no participan, es decir, su valor no se considera para la solución final ni es necesario para calcular la solución en los demás puntos del dominio de cálculo. Las celdas de interpolación son aquellas para las que no se resuelve el flujo, sino que se calcula mediante interpolación del valor de la solución en celdas cercanas a ella pero pertenecientes a la malla donante (por lo tanto, la malla de menor jerarquía, o donante, no tiene celdas de interpolación).

Comencemos con la malla de menor jerarquía, G_1. Todos los puntos de G_1 se consideran activos, excepto aquellos que se ubican dentro de ∂G_2 y a una distancia del borde $d > \delta$ (donde definimos d como dicha distancia de los



(a) (b)

Figura 5.1: Ejemplo de mallas anidadas. En (a), la malla *background* G_1 se representa en color azul (celdas y sus centros), la malla anidada G_2 se representa en color rojo y, sombreado en color gris se indica la región de solapamiento entre estas. En (b) se señalan la región de solapamiento (sombreado gris) y la clasificación de algunas celdas con colores. En G_1: celdas activas (celeste), celdas inactivas (amarillo) y celdas donantes (naranja). En la malla G_2: celdas activas (azul) y de interpolación (verde). En este ejemplo G_2 no tiene celdas inactivas (es decir, celdas de G_2 que se ubiquen afuera de G_1).

centros de celda al borde de G_2). En la Fig. 5.1(b) se señalan algunas celdas activas de G_1 en color celeste, y en color amarillo una celda inactiva.

Por otro lado, todos las celdas de G_2 que estén por fuera de los límites de la malla donante se etiquetan como inactivas (no existen celdas con estas características en el caso de la Fig. 5.1(a)). Luego, todas aquellas celdas de G_2 cuyo centro se encuentre a una distancia $d > \delta$ de ∂G_2 se definen como activas. La celda sombreada en color azul en la Fig. 5.1(b) es un ejemplo de celda activa de la malla receptora. Finalmente, los puntos de G_2 que estén a una distancia $d < \delta$ (pertenecientes a la región de solapamiento) se definen como puntos de interpolación, como ser la celda sombreada en color verde en la Fig. 5.1(b).

Para calcular el campo en un determinado punto de interpolación de la malla fina, se debe primero detectar la celda de la malla *background* a la que pertenece. Por ejemplo, en la Fig. 5.1(b) el centro de la celda de G_2 sombreada en color verde cae en el interior de la celda de G_1 que se muestra parcialmente sombreada en color naranja. Dicha celda se denomina celda donante. Para cada

celda de interpolación de G_2 se determina la correspondiente celda donante de G_1 y se procede a realizar la interpolación de los campos. Cada celda donante P de G_1, tiene seis celdas vecinas de la misma malla G_1: N, S, E, W, T y B. Del conjunto formado por estos siete nodos de G_1, se seleccionan los seis más cercanos a la celda de interpolación de G_2 y se aplica el método mejorado de interpolación de la Sec. 3.3 para hallar el valor del campo allí (sustituyendo el punto e de las ecuaciones de dicha sección por el centro de la celda de interpolación de G_2).

5.2.2. Técnica de anidamiento en el CAFFA

En esta sección se resumen las diferentes etapas de la técnica de *nesting* que se encontraba implementada en el CAFFA3D.MBRI y busca ser de utilidad para potenciales usuarios del modelo.

Para simplificar, consideramos el caso unidimensional de la Fig. 5.2. Allí se cuenta con una malla fina, que cuenta con las celdas 9 a 16 y que solapa a otra de menor jerarquía, que aquí consideramos como *background*, que ocupa las celdas 1 a 8. Las celdas ya se encuentran clasificadas, siguiendo el método descrito en la sección anterior. Además, en este punto ya se han generado patrones o tablas de comunicación, entre las regiones con las celdas de interpolacion y las regiones con celdas donantes (lo que además organiza las comunicaciones MPI, en caso de ser necesario)

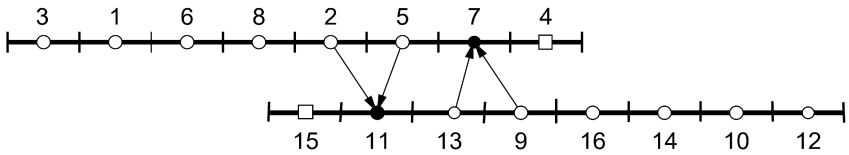


Figura 5.2: Caso unidimensional de solapamiento de dos mallas. La línea superior (celdas 1 a 8) representa la malla *background* (o de menor jerarquía que la siguiente). La línea inferior (celdas 9 a 16) representa a la malla anidada. Las celdas 4 y 15 son celdas inactivas, las celdas 7 y 11 son de interpolación, y el resto de las celdas son activas. Figura adaptada de Hadzic (2006) [25].

Se comienza el cálculo en todas las mallas, trabajando en las respectivas celdas activas. En la Fig. 5.2, las celdas activas correspondientes a la malla *background* son todas excepto la número 4 y la 7, mientras que en las malla anidada son todas excepto la 11 y la 15. Una vez completada una iteración externa, se realizan dos interpolaciones. Por un lado se interpola la solución

calculada desde las celdas donantes de la malla *background* (2 y 5) a la celda de interpolación de la malla anidada (celda 11). A su vez, se interpola la solución de la malla anidada a la primera celda inactiva de la malla *background* (que oficia de borde en sus cálculos). En la Fig. 5.2 esta celda es la número 7, y recibe, mediante interpolación, la solución calculada en la malla anidada de sus correspondientes donantes (celdas número 9 y 13 en la figura citada). Completada esta operación, se pasa a la siguiente iteración externa.

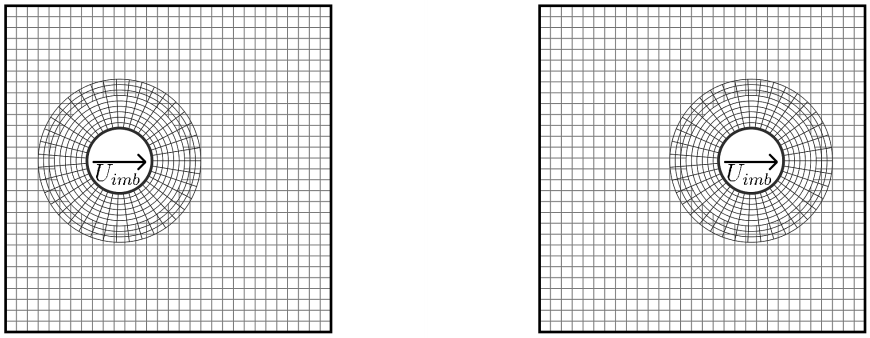
Debido a la naturaleza implícita del esquema, la modificación que se introduce en las celdas que reciben la interpolación de la solución (7 y 11 en la Fig. 5.2) consiste en modificar la ecuación algebraica correspondiente, imponiendo que tanto los coeficientes fuera de la diagonal (nodos vecinos) como el término fuente sean nulos. Así, la solución en ese nodo no se ve modificada hasta no recibir la interpolación desde la otra malla, lo que se hace a través del método mejorado de interpolación FTSE.

A modo de bitácora, para dar continuidad al desarrollo del CAFFA3D.MBRI, documentamos aquí un aspecto que se podría corregir. Este refiere al cálculo de los campos en las celdas inactivas. Actualmente, en las celdas inactivas de la malla *background* (como la número 4 de la Fig. 5.2), el modelo igualmente calcula la solución, la cual no será considerada al final del proceso (ya que ahí, la solución efectiva es la correspondiente a la malla anidada). Estas operaciones son innecesarias y se podría buscar una estrategia para evitarlas. Sin embargo, debido a la naturaleza implícita del modelo, el sistema algebraico involucra igualmente a todas las celdas de la malla, y se debe resolver por completo. De hecho, modificar la ecuación algebraica en todos las celdas inactivas requiere de operaciones adicionales. Como la dificultad tiene sus raíces en la naturaleza implícita del método, una alternativa podría ser ensayar un esquema explícito, que permita anular más fácilmente a las celdas inactivas.

5.3. Anidamiento y IBM

Como hemos explicado, la técnica de anidamiento permite abordar problemas que involucran el movimiento de cuerpos inmersos en un determinado flujo, sin la necesidad de un excesivo refinamiento de malla donde el flujo es suave, es decir, que no exhibe grandes variaciones. Una manera de hacer esto es con mallas anidadas adaptativas a la geometría del cuerpo y que se muevan de manera solidaria a este (mismos movimientos de traslación y rotación). Por

ejemplo, en la Fig. 5.3 se representa una malla *background* cartesiana y una malla anidada curvilínea cuya frontera se adapta al contorno de un cuerpo circular que se mueve con velocidad U_{imb}.



(a) (b)

Figura 5.3: Esquema en el que una malla curvilínea anidada y adaptativa se mueve de manera salidaria a un cuerpo: (a) instante t; (b) instante $t + dt$.

En esta tesis se sigue otra estrategia, que promueve la sinergia entre la técnica de anidamiento y el IBM. La idea fundamental es utilizar mallas anidadas que no necesariamente sean adaptativas, pero que cuenten con buena resolución espacial (en particular, en las cercanías de la superficie del cuerpo) y que se muevan de manera solidaria al rígido. De esta manera, se impone la presencia del cuerpo por medio del IBM, como se ejemplifica en la Fig. 5.4.

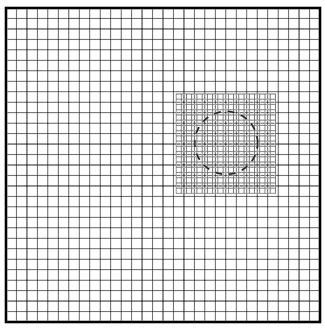


Figura 5.4: Ejemplo de combinación de las técnicas de anidamiento y IBM. La malla más fina (mayor jerarquía) se mueve solidaria al cuerpo (cuya frontera se señala en trazo punteado), pero no es adaptativa.

Esta combinación resulta ser un método con gran flexibilidad para abordar diferentes problemas que involucren la interacción sólido-fluido. Además,

esta estrategia no requiere de ningún recurso adicional de cómputo, por ejemplo para generar mallas adaptativas, que deben ser regeneradas en cada paso temporal (debido al movimiento del cuerpo).

A continuación se exponen las instrucciones necesarias que se siguen durante la aplicación de la técnica. Al comienzo de cada paso temporal, el cuerpo ocupa una determinada posición, cuenta con cierta orientación espacial, y lo mismo sucede con la malla anidada solidaria a él. En ese momento, la secuencia de instrucciones que sigue el esquema es la siguiente:

1. Se actualiza la clasificación de las celdas de la malla *background* y de la anidada, así como las tablas de índices de celdas que guardan la información necesaria para realizar las interpolaciones. Se actualiza el campo de distancias al cuerpo (X_{imb}), necesario para el método IBM.
2. Se procede a realizar la primera iteración externa, obteniendo la solución del flujo y la velocidad de traslación y rotación del cuerpo (de la manera que se explica en el siguiente capítulo).
3. Se repiten las iteraciones externas, hasta completar la cantidad máxima prescrita o reducir los errores (residuos) por debajo de la tolerancia deseada. En este momento se completó el cálculo de la solución para el paso temporal actual, y se pasa al siguiente.
4. Al comienzo del nuevo paso temporal, con la velocidades lineal y angular antes calculadas, se mueve (traslada y rota) el cuerpo (como se describe en el siguiente capítulo), al igual que su malla solidaria. Las mallas utilizadas no se deforman en ningún momento, lo que permite que su movimiento se haga a través de mover su superficie externa (*patch*), como si fuera un rígido, y con ella se actualiza la posición de las celdas que la componen.
5. Se vuelve al punto 1.

Esta secuencia de instrucciones es la que articula el acoplamiento de las técnicas que involucra el presente trabajo: IBM, solapamiento de mallas móviles y dinámica del rígido. En caso de disponer de varios rígidos, los puntos 1 y 4 de la secuencia se realizan para cada uno de ellos, antes de avanzar al siguiente ítem.

Como ya se ha mencionado, si bien previamente a esta tesis existían módulos del CAFFA3D.MBRI que implementaban los métodos de IBM y de anidamiento, debimos reformarlos y adaptarlos para que resolvieran, trabajando de

forma conjunta, el problema propuesto. Fundamentalmente, el paquete existente permitía un movimiento del cuerpo completamente prescrito, es decir, cuya trayectoria no era afectada por su interacción con el fluido. Por otro lado, la estrategia de *nesting* tenía aspectos a corregir (algunos aún siguen pendientes), en particular cuando se desea trasladar las mallas anidadas. Trabajando sobre esa base, se articularon los módulos ya existentes, y fueron adaptados para el problema planteado. De hecho, trabajar sobre versiones anteriores es el punto clave para continuar con la línea de desarrollo de un paquete computacional, en este caso el CAFFA3D.MBRI.

Asimismo, se debieron introducir correcciones en el cálculo de la fuerza de interacción sólido-fluido (IBM) cuando el sólido ocupa regiones con mallas solapadas (*nesting*), restringiéndolo a la malla solidaria más fina (es decir, de mayor jerarquía). De lo contrario, se detecta una sobre estimación de su valor. Además, se debió adaptar el módulo de *nesting* para que incorpore correctamente el desplazamiento de los bloques de malla (traslación y rotación). Se incorporaron rutinas que actualizan la posición y orientación de los rígidos al finalizar cada paso temporal, que también se comunican a las correspondientes mallas solidarias (*nesting*) para luego moverlas (actualizando además la clasificación de las celdas). Otro aspecto que se corrigió es la estrategia de reinicio de simulaciones, para que los bloques de malla móviles se ubicaran en las posiciones correctas al retomar cálculos. Lo mismo se aplicó para el caso en que los cuerpos sean representados por *patches*.

En resumen, se logró adaptar, de manera solvente, la técnica propuesta a las características del modelo CAFFA3D.MBRI

Capítulo 6

Modelado de la dinámica del cuerpo rígido

El tercer componente del producto desarrollado en esta tesis, además de las adaptaciones implementadas sobre el IBM y sobre la técnica de anidamiento, es el modelado de las ecuaciones cardinales que rigen el movimiento de un cuerpo rígido. En este capítulo se describe cómo fueron discretizadas dichas ecuaciones, de manera de obtener un cálculo preciso del movimiento del cuerpo rígido y de prevenir posibles inestabilidades. Para cerrar el capítulo, en la Sec. 6.4 se explica cómo se acoplaron los esquemas correspondientes de resolución de las ecuaciones cardinales al modelo CAFFA3D.MBRI, lo que cierra el producto desarrollado (Parte II). Luego, en la Parte III se analizan diversos casos para la validación exhaustiva del modelo, para finalizar con su aplicación a una situación concreta de gran interés científico y tecnológico, que es el fenómeno de resuspensión de partículas.

6.1. Ecuaciones cardinales

Cuando se resuelve la primera ecuación cardinal para un determinado cuerpo, se determina su movimiento traslacional, que se rige por la ley horaria de la velocidad de su centro de masa (CM). Si denotamos con $\vec{F}^{total}$ la fuerza neta que actúa sobre el cuerpo y $\vec{U}_{CM}$ la velocidad de CM, la primera ecuación cardinal es:

$$\frac{d}{dt}\vec{U}_{CM} = \vec{F}^{total}, \tag{6.1}$$

donde, para simplificar notación, consideramos que la masa $m = 1$ (de lo contrario, debería estar siempre multiplicando a $\vec{U}_{CM}$).

En nuestro caso, la fuerza total está compuesta por la fuerza de interacción con el fluido, que es calculada a partir del método de condiciones de borde inmersas ($\vec{F}_{imb}$), y por las fuerzas de origen gravitarorio, que son el peso ($\vec{P}$) y el empuje ($\vec{E}$). Podemos reescribir la Ec. 6.1 de la siguiente manera:

$$\frac{d}{dt}\vec{U}_{CM} = \vec{F}_{imb} + \vec{P} + \vec{E} \tag{6.2}$$

Aquí consideramos situaciones en las que el cuerpo se encuentra completamente inmerso en el fluido, por lo tanto, la expresión final de la Ec. 6.2 que consideramos aquí es:

$$\frac{d}{dt}\vec{U}_{CM} = \vec{F}_{imb} + (\rho_{rig} - \rho_{flu})\, V_{rig}\vec{g}, \tag{6.3}$$

donde ρ_{rig} y V_{rig} son la densidad y volumen del cuerpo respectivamente, ρ_{flu} es la densidad del fluido y $\vec{g}$ es el vector aceleración gravitatoria.

Por otro lado, la ecuación que rige el movimiento rotacional del cuerpo es la segunda ecuación cardinal. Esta relaciona la derivada de la cantidad de movimiento angular del cuerpo respecto al punto P ($\vec{L}_P$) con el momento de fuerza o torque neto que actúa sobre el cuerpo respecto del mismo punto ($\vec{\tau}_P^{total}$) de la siguiente manera:

$$\frac{d}{dt}\vec{L}_P = \vec{\tau}_P^{total} \tag{6.4}$$

Además, $\vec{L}_P$ se relaciona con la velocidad angular del cuerpo ($\vec{\Omega}$) a través de:

$$\vec{L}_P(t) = \mathbb{I}_P(t)\vec{\Omega}(t), \tag{6.5}$$

donde $\mathbb{I}_P$ es el tensor momento de inercia del cuerpo respecto de P.

Para simplificar, en nuestra implementación referenciamos la Ec. 6.4 respecto al CM, de manera que el torque del peso y del empuje sean nulos. Por lo tanto, el torque total está dado por el momento que ejerce el fluido ($\vec{\tau}_{CM}^{imb}$), que se calcula con el IBM (a partir de $\vec{F}_{imb}$, como se explica en la Sec. 8.2), que nos da la fuerza $\vec{F}_{imb}$ sobre los puntos de la superficie del cuerpo. Por lo tanto, la Ec. 6.5 se puede escribir como:

$$\frac{d}{dt}\left(\mathbb{I}_{CM}\vec{\Omega}\right) = \vec{\tau}_{CM}^{imb} \tag{6.6}$$

En las Secs. 6.2 y 6.3 se detalla cómo discretizamos las Ec. 6.3 y 6.6 respectivamente y cómo las incorporamos al CAFFA3D.MBRI.

6.2. Discretización de la primera ecuación cardinal

Al comienzo del paso temporal n, se conocen los valores de la velocidad del cuerpo en el paso temporal anterior ($\vec{U}_{CM}^{n-1}$), de la posición ($\vec{X}_{CM}^{n-1}$) y de la fuerza de interacción con el fluido ($\vec{F}_{imb}^{n-1}$). También se conocen $\vec{\tau}_{CM}^{imb,n-1}$, $\mathbb{I}_{CM}^{n-1}$ y $\vec{\Omega}^{n-1}$, que serán utilizados en la Sec. 6.3 para la discretización de la segunda ecuación cardinal.

Para discretizar la primera ecuación cardinal, nos basamos en el trabajo de Koblitz *et al.* (2017) [28]. La estrategia consiste en actualizar el valor de la velocidad del rígido al comienzo de cada iteración externa, utilizando un esquema *leapfrog* con factor de sobre-relajación α ($0 < \alpha < 1$). Esta estrategia suaviza las variaciones que ocurren cuando el cuerpo se mueve y desplaza fluido, y evita que suceda la inestabilidad de masa agregada [29, 30, 31]. Esta inestabilidad requiere incorporar un término de inercia, que mueva al fluido que es desplazado por un cuerpo rígido inmerso en él, con movimiento acelerado. Como el cuerpo y el fluido que lo rodea no pueden ocupar el mismo lugar físico, se requiere agregar cierta inercia para acelerar al fluido desplazado. Este tipo de inestabilidades pueden requerir una gran cantidad de iteraciones externas para alcanzar la convergencia [32]. No obstante lo anterior, la fuerza calculada a partir del IBM ($\vec{F}_{imb}$), por su construcción (modificando las propias ecuaciones algebraicas), contempla el efecto de masa inducida, aunque su convergencia podría requerir igualmente un gran número de iteraciones externas si no se toman los reparos convenientes.

En este método, la fuerza que el CAFFA3D.MBRI obtiene al final de la iteración externa k dentro del paso temporal n ($\widetilde{\vec{F}}^{n,k}$), es corregida de la siguiente manera:

$$\vec{F}^{n,k} = (1-\alpha)\,\vec{F}^{n,k-1} + \alpha\widetilde{\vec{F}}^{n,k}, \tag{6.7}$$

donde $\vec{F}^{n,0} = \vec{F}_{imb}^{n-1}$ y $\widetilde{\vec{F}}^{n,k}$ representa a la fuerza que el CAFFA3D.MBRI calcula al final de la iteración externa actual, la cual es corregida.

Una vez actualizada $\vec{F}^{n,k}$, se actualiza el valor de la velocidad del cuerpo

con un esquema *leapfrog*, de la siguiente manera:

$$\vec{U}_{CM}^{n,k} = \vec{U}_{CM}^{n-1} + \frac{dt}{2}\left(\vec{F}_{imb}^{n-1} + \vec{F}^{n,k}\right) \tag{6.8}$$

Si la cantidad de iteraciones externas realizadas en cada paso temporal son N_{it}, se tendrá $\vec{U}_{CM}^{n+1} = \vec{U}_{CM}^{n,N_{it}}$. Para incorporar los efectos gravitatorios, a la Ec. 6.8 se debe agregar el término correspondiente a la fuerza gravitatoria $(\rho_{rig} - \rho_{flu})\, V_{rig}\vec{g}$.

A su vez, al completar el total de iteraciones externas y antes de pasar al próximo paso temporal, se actualiza la posición del cuerpo nuevamente con el esquema *leapfrog*:

$$\vec{X}_{CM}^{n+1} = \vec{X}_{CM}^{n} + \frac{dt}{2}\left(\vec{U}_{CM}^{n} + \vec{U}_{CM}^{n+1}\right) \tag{6.9}$$

En este punto se ha completado la implementación de la primera ecuación cardinal para el rígido y se ha acoplado al modelo CAFFA3D.MBRI. En la próxima sección se detalla el método correspondiente para incorporar el movimiento de rotación del cuerpo.

6.3. Discretización de la segunda ecuación cardinal

En esta sección se considera un cuerpo rígido bajo movimiento puramente rotacional con velocidad angular $\vec{\Omega} = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$, que determina la velocidad de traslación de cualquier punto P del rígido de la siguiente manera:

$$\vec{U}_P = \vec{\Omega} \times \vec{X}_P, \tag{6.10}$$

donde $\vec{X}_P$ es la posición de P, medida desde un origen arbitrario sobre el eje de rotación.

Definiendo el tensor velocidad angular $W(t)$ asociado a $\vec{\Omega}(t)$ como:

$$W(t) = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_z(t) & \Omega_y(t) \\ \Omega_z(t) & 0 & -\Omega_x(t) \\ -\Omega_y(t) & \Omega_x(t) & 0 \end{pmatrix}, \tag{6.11}$$

se puede reescribir la Ec. 6.10 de la siguiente manera:

$$\frac{d}{dt}\vec{X}_P = W(t)\vec{X}_P(t) \tag{6.12}$$

A partir de esta relación, se obtiene la ley horaria que rige la evolución de la matriz de rotación $R(t)$ resolviendo la ecuación:

$$\frac{d}{dt}R(t) = W(t)R(t), \tag{6.13}$$

A partir de $R(t)$, si conocemos el tensor momento de inercia en el instante t, $\mathbb{I}(t)$, y hallamos la matriz de rotación $R(t+dt)$, podemos calcular el momento de inercia en $t+dt$ como:

$$\mathbb{I}(t+dt) = R(t+dt)\mathbb{I}(t)R^T(t+dt) \tag{6.14}$$

Resolviendo numéricamente la Ec. 6.4 respecto del CM se obtiene la cantidad de movimiento angular $\vec{L}_{CM}(t)$. A partir de ella y de $\mathbb{I}_{CM}(t)$ (calculado con la Ec. 6.14), queda determinada la velocidad angular en el instante t con la siguiente relación:

$$\vec{\Omega}(t) = \mathbb{I}_{CM}^{-1}(t)\vec{L}_{CM}(t) \tag{6.15}$$

Para resolver numéricamente la Ec. 6.4 seguimos un esquema análogo al descrito en la sección anterior. Primero, se calcula el valor del momento de fuerza $\vec{\tau}_{CM}^{n,k}$ con el mismo esquema de sobre-relajación de la Ec. 6.7, donde basta sustituir fuerza por torque (los factores de sobre-relajación α para el cálculo del momento y de la fuerza no son necesariamente iguales). Luego se pasa a actualizar la cantidad de movimiento angular para la k-ésima iteración externa, de manera análoga a lo realizado con la velocidad lineal en la Ec. 6.8:

$$\vec{L}_{CM}^{n,k} = \vec{L}_{CM}^{n-1} + \frac{dt}{2}\left(\vec{\tau}_{CM}^{n-1} + \vec{\tau}_{CM}^{n,k}\right), \tag{6.16}$$

La velocidad angular se obtiene con la Ec. 6.5 discretizada:

$$\vec{\Omega}_{CM}^{n,k} = \mathbb{I}_{CM}^{-1}(t)\left[\frac{dt}{2}\left(\vec{L}_{CM}^{n-1} + \vec{L}_{CM}^{n,k}\right)\right] \tag{6.17}$$

Al completar el total de iteraciones externas prescritas, se obtienen los vectores $\vec{L}_{CM}^{n}$ y $\vec{\omega}_{CM}^{n}$. Antes de pasar al siguiente paso temporal $(n+1)$, se

actualiza el tensor de inercia a sus valores $\mathbb{I}_{CM}^{-1}(t+dt)$. Para esto también se implementa un esquema tipo *leapfrog*, sustituyendo las componentes del vector $\left(\vec{\Omega}_{CM}^{n} + \vec{\Omega}_{CM}^{n-1}\right) dt/2$ en la Ec. 6.11, de donde se obtiene $W(t+\frac{dt}{2})$. Este tensor se utiliza en la Ec. 6.13, para evolucionar la matriz de rotación:

$$R(t+dt) = R(t) + W\left(t + \frac{dt}{2}\right) R(t)dt \tag{6.18}$$

Finalmente, se calcula el tensor de inercia $\mathbb{I}_{CM}(t+dt)$ a partir de la Ec. 6.14.

Como cierre de esta sección, consideramos pertinente aclarar dos detalles del método propuesto. En primer lugar, durante el total de iteraciones externas, tanto la posición del CM como la orientación espacial del cuerpo permanecen constantes. Se actualizan únicamente al completar el total de iteraciones externas correspondientes al paso temporal actual. No así sucede con su velocidad lineal y angular, que se actualizan en cada iteración externa. Por otro lado, si bien en todo momento nos hemos referido al tensor de inercia $\mathbb{I}_{CM}$, lo que también se debe actualizar es el campo X_{imb}. Esta tarea se lleva a cabo también a partir de la velocidad lineal y angular del cuerpo, con las que se actualiza la nueva posición de la superficie del cuerpo. En caso de usar *patches*, se les aplica el movimiento correspondiente y se vuelve a calcular el campo X_{imb}. En caso de definir los cuerpos a través de sus respectivas fórmulas analíticas, simplemente se vuelven a aplicar dichas fórmulas.

6.4. Acoplamiento de las ecuaciones cardinales al CAFFA

En esta sección se sintetiza la forma en que todos los esquemas mostrados fueron acoplados al modelo CAFFA3D.MBRI.

Supongamos que vamos a comenzar los cálculos correspondientes al paso temporal n (con $n = 1, 2, \dots$), es decir, el objetivo es obtener campos de velocidad, presión y de las demás magnitudes que se estén considerando sobre el fluido, para el $t = n \times dt$, así como la posición del centro de masa y orientación espacial de los cuerpos rígidos involucrados.

Si denotamos con $\mathscr{F}$ a los campos correspondientes al fluido que deseamos calcular, como ser las componentes de velocidad y presión, se conocen los valores $\mathscr{F}^{(n-1)}$. Por otro lado, disponemos de la ubicación, orientación y velocidad

(lineal y angular) de los rígidos: $\mathscr{S}^{(n-1)} = (\vec{X}_{CM}^{(n-1)}, X_{imb}^{(n-1)}, \vec{U}_{CM}^{(n-1)}, \vec{\Omega}_{CM}^{(n-1)})$..

La estrategia que implementamos consiste en dejar fijos la posición y orientación de los rígidos, así como de las correspondientes mallas solidarias, durante el total de las iteraciones externas a realizar dentro del paso temporal actual. Una vez que se haya alcanzado la convergencia, o se haya completado el total de iteraciones externas (prescrito por el usuario), se actualizan dichas cantidades. Supongamos que este punto se alcanza al realizar N_{it} iteraciones externas. Por lo tanto, en la iteración externa k (con $k = 0, 1, \ldots, N_{it}$), los campos en el fluido son $\mathscr{F}^{(n,k)}$, con $\mathscr{F}^{(n,0)} = \mathscr{F}^{(n-1)}$. Lo mismo sucede con $\mathscr{S}^{(n,k)}$.

Además, al comenzar la iteración externa k, se dispone de los campos calculados en la iteración externa $k-1$ y, con ellos, el CAFFA3D.MBRI actualiza los campos $\mathscr{F}^{(n,k)}$. Con estos valores, y disponiendo de los vectores $\vec{U}_{CM}^{(n,k-1)}$ y $\vec{\Omega}_{CM}^{(n,k-1)}$, con el método de IBM se calcula la fuerza y el momento que el fluido ejerce sobre los cuerpos. Estos son $\widetilde{\vec{F}}^{n,k}$ y $\widetilde{\vec{\tau}}^{n,k}$. Como se explicó en las secciones anteriores, en lugar de utilizar directamente estos campos para actualizar las velocidades lineal y angular de los cuerpos, se aplica la técnica de sobre-relajación (Ec. 6.7):

$$\begin{cases} \vec{F}^{n,k} = & (1-\alpha_F)\,\vec{F}^{n,k-1} + \alpha_F \widetilde{\vec{F}}^{n,k} \\ \vec{\tau}^{n,k} = & (1-\alpha_\tau)\,\vec{\tau}^{n,k-1} + \alpha_\tau \widetilde{\vec{\tau}}^{n,k} \end{cases}, \tag{6.19}$$

donde α_F y α_τ (constantes en el intervalo $0-1$) son los coeficientes de sobre-relajación, que en general consideramos iguales (y aproximadamente 0.1 en nuestras simulaciones). En caso que, además de la fuerza de interacción sólido-fluido, actúen fuerzas de cuerpo o externas sobre los rígidos, se deben sumar a cada uno de los términos de fuerza y momento a la derecha de la Ec. 6.19.

Con $\vec{F}^{n,k}$, $\vec{\tau}^{n,k}$ y sus valores correspondientes al paso temporal anterior, $\vec{F}^{n,0}$ y $\vec{\tau}^{n,0}$, actualizamos la velocidad lineal y la cantidad de movimiento angular de los cuerpos:

$$\begin{cases} \vec{U}_{CM}^{n,k} = & \vec{U}_{CM}^{n-1} + \dfrac{dt}{2}\left(\vec{F}^{n,0} + \vec{F}^{n,k}\right) \\ \vec{L}_{CM}^{n,k} = & \vec{L}_{CM}^{n-1} + \dfrac{dt}{2}\left(\vec{\tau}_{CM}^{n,0} + \vec{\tau}_{CM}^{n,k}\right) \end{cases} \tag{6.20}$$

A este esquema le llamamos *leapfrog* con sobre-relajación. Luego, con el vector $\vec{L}_{CM}^{n,k}$, se actualiza $\vec{\Omega}_{CM}^{n,k}$ usando la Ec. 6.17 de la Sec. 6.3.

Durante las iteraciones externas, tanto la posición como orientación de los cuerpos y de las mallas solidarias no se modifican, tal como si se encontraran

«congelados» en el espacio. Cuando se haya completado la última iteración externa ($k = N_{it}$), se tendrán los valores de $\mathscr{F}^{(n)}$, $\vec{U}_{CM}^{(n)}$ y $\vec{\Omega}_{CM}^{(n)}$. En ese momento, se trasladan y re-orientan los cuerpos rígidos:

$$\begin{cases} \vec{X}_{CM}^{(n)} = \vec{X}_{CM}^{(n-1)} + \dfrac{dt}{2}\left(\vec{U}_{CM}^{(n-1)} + \vec{U}_{CM}^{(n)}\right) \\ R(t+dt) = R(t) + W\left(t + \dfrac{dt}{2}\right) R(t)dt \end{cases}, \tag{6.21}$$

donde la matriz $R(t + dt)$ se aplica sobre la superficie de los cuerpos y de las mallas anidadas. Al comenzar el nuevo paso temporal, se actualiza el campo de distancias a los cuerpos ($X_{imb}^{(n)}$) y la posición de las celdas de las anidadas. Como se explicó en el capítulo anterior, también se deben actualizar las etiquetas (clasificación) de las celdas de todas las mallas de discretización, tanto *background* como solapadas. Es decir, actualizar las listas de celdas activas, inactivas, donantes y de interpolación.

Parte III

Validación del código y aplicaciones

Capítulo 7

Evaluación del cálculo de la fuerza de interacción sólido-fluido

En este capítulo se presenta una serie de casos donde se analiza el cálculo del CAFFA3D.MBRI de la fuerza de interacción entre una esfera y el fluido en el que se encuentra inmersa. Los casos tratados se pueden separar en dos grupos. Por un lado, el grupo de simulaciones en donde la esfera se encuentra en una posición y sobre ella incide un flujo uniforme aguas arriba. En el otro grupo, la esfera se traslada con velocidad constante, inmersa en un fluido que inicialmente está en reposo. Allí se busca analizar si se obtienen los mismos resultados frente al mismo movimiento relativo.

7.1. Ecuaciones empíricas del problema

El caso análisis consiste en una esfera de diámetro D y densidad ρ_s, inmersa en un fluido de densidad ρ_f, viscosidad dinámica μ y con perfil uniforme de velocidad U_{lid} aguas arriba.

La ley de Stokes, para el caso de $Re \ll 1$, proporciona una relación entre la velocidad U_{lid} y la fuerza de *drag* (F_D), que ejerce el fluido sobre la esfera. Sin embargo, la condición $Re \ll 1$ es extremadamente restrictiva. En su lugar, obtendremos los valores de la fuerza de *drag* a partir de las fórmulas empíricas propuestas por Hongli *et al.* (2015)[33], que a su vez son una corrección sobre la ley de Goldstein [34].

En el trabajo de Hongli, utilizando 480 grupos de datos experimentales en el rango $Re < 2 \times 10^5$, se propone la siguiente relación entre C_D y Re para el flujo en torno a una esfera rígida fija (siendo $Re = \rho_f U_{lid} D/\mu$):

$$C_D(Re) = R_{22}(Re) + er(Re), \tag{7.1}$$

siendo

$$R_{22}(Re) = \frac{24}{Re}\left(1 + \frac{\frac{3}{16}Re}{1 + \frac{\frac{19}{240}Re}{1+\frac{1}{122}Re}}\right), \tag{7.2}$$

y

$$er(Re) = \frac{8}{1000}\frac{Ln\left(\frac{1+Re}{21000}\right)\left(Ln\left(\frac{1+Re}{254}\right)\right)^2}{\left(1+\frac{Re}{7000}\right)} \tag{7.3}$$

La fuerza de *drag* F_D se obtiene a partir de la definición de C_D y de los parámetros del problema:

$$C_D = \frac{2F_D}{\rho_f U_{lid}^2 A} = \frac{2F_D}{\rho_f U_{lid}^2 \pi (D/2)^2} \tag{7.4}$$

El resultado anterior es válido para el caso de un flujo uniforme con velocidad U_{lid} aguas arriba, en torno a una esfera fija. Como el factor determinante es la velocidad relativa entre la esfera y el fluido, este resultado también es válido para la situación en que la esfera se mueve con velocidad $v_p = U_{lid}$ en un fluido que se encuentra en reposo aguas arriba.

Por otro lado, Hongli propone una fórmula empírica para la velocidad límite (v_{lim}) de caída de una esfera rígida en un fluido viscoso, que considera infinito para poder desestimar los efectos producidos por fronteras físicas del problema. En dicho trabajo se define:

$$C_D = \frac{432}{d_*^3}\left(0.5 + 0.5\sqrt{1+\frac{d_*^3}{24}}\right)^{1.554}\cos^3\alpha + 0.458\sin^2\alpha, \tag{7.5}$$

siendo

$$\begin{cases} \alpha = & (1 - e^{-6.7x^2+39x^5-75x^7})\frac{\pi}{2} \\ x = & Ln(1+d_*)/10 \end{cases} \tag{7.6}$$

y la distancia adimensionada d_*:

$$d_* = k'D = \left[\frac{g\rho_f\left(\rho_s - \rho_f\right)}{\mu^2}\right]^{\frac{1}{3}} D \tag{7.7}$$

A partir de estas variables, el valor empírico de la velocidad límite adimensionada se calcula como:

$$u_* = k v_{lim} = \left[\frac{\rho_f^2}{g\mu\,(\rho_s - \rho_f)}\right]^{\frac{1}{3}} \cdot v_{lim} = \sqrt{\frac{4d_*}{3C_D}}, \tag{7.8}$$

de donde se deduce que $Re = u_* d_*$. La última igualdad en la Ec. 7.8 se puede verificar sustituyendo la expresiones que definen a d_* y a C_D, para el valor de F_D en el equilibrio (igual al peso relativo de la esfera).

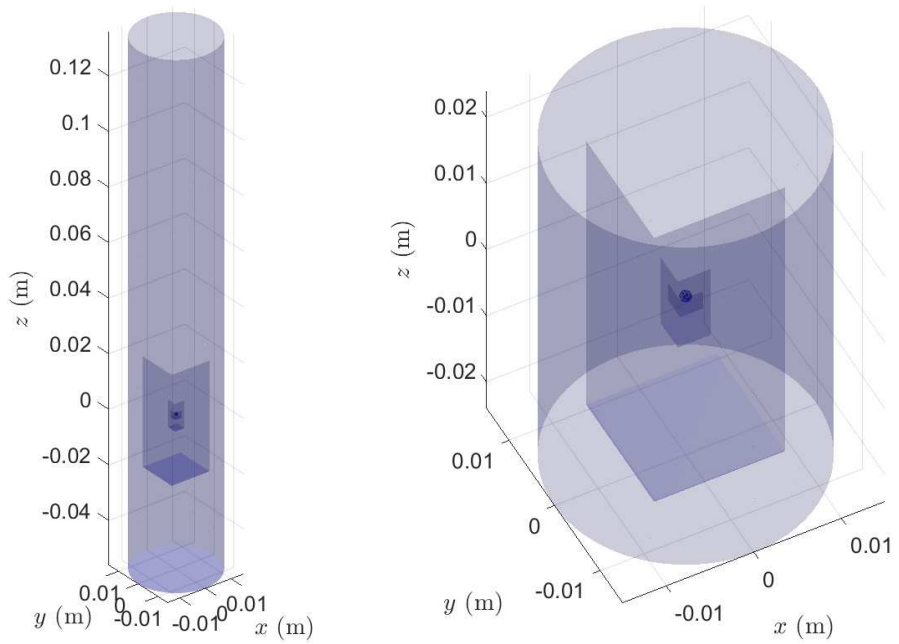
Con estas fórmulas, fijados los parámetros del problema D, ρ_s, ρ_f, μ y g, se puede calcular v_{lim} y C_D (con la Ec. 7.5). Finalmente, despejando de la definición de C_D, se calcula el valor empírico de la fuerza de *drag* que el fluido ejerce sobre la esfera una vez alcanzada la velocidad límite de caída v_{lim}.

7.2. Dominio computacional

Si bien en el problema físico considerado en este capítulo se asume que el fluido se extiende en todo el espacio, numéricamente debemos definir un dominio de cálculo finito. El mismo debe ser suficientemente grande comparado con el tamaño de la esfera, de manera de que su presencia no afecte el flujo en las cercanías de su frontera.

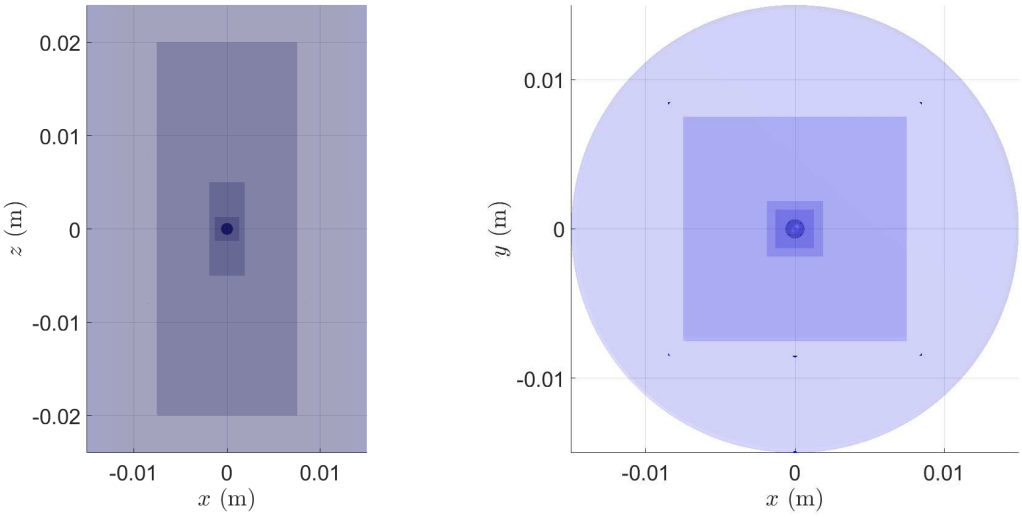
En los casos que trataremos en esta sección usamos el conjunto de mallas de la Fig. 7.1. Este consiste en una malla cilíndrica *background* G_1, y tres mallas prismáticas anidadas, G_2, G_3 y G_4, cuyas dimensiones se describen en la Tab. 7.1. En la Fig. 7.2 se muestran las mallas desde dos ángulos. Allí se puede ver que las mallas finas (de mayor jerarquía) se encuentran completamente contenidas por las gruesas, y la esfera está ubicada en el centro de ellas.

La malla cilíndrica G_1 tiene un largo de 19.2 cm según el eje z, en el intervalo $z = [-5.6, +13.6]$ cm, y 3.0 cm de diámetro. Considerando que la esfera tiene un diámetro $D = 1.0$ mm, la obstrucción de la misma (cociente entre las secciones) es del orden de 0.1 %. Para el Re considerado, la distancia de influencia de la esfera sobre el flujo se expande a escasos diámetros de la misma [10]. En este caso, la distancia entre ambas superficies supera los $10D$ y el flujo sobre la pared lateral de la malla no percibirá su presencia.



(a) (b)

Figura 7.1: Fronteras de las mallas utilizadas: (a) perspectiva del dominio completo; (b) acercamiento donde se pueden diferencias las tres mallas anidadas y la esfera, con centro en el origen de coordenadas.



(a) (b)

Figura 7.2: Vista desde dos perspectivas diferentes del conjunto de mallas utilizadas: (a) plano vertical; (b) plano horizontal

La malla cilíndrica está compuesta por 36 bloques, que se dividen en dos grupos. Uno de esos grupos es un núcleo prismático formado por 12 bloques

Tabla 7.1: Extremos de las mallas G_2, G_3 y G_4 (en mm), cantidad de celdas en cada dirección (el valor mínimo que toma cada coordinada es igual al máximo, pero negativo) y tamaño de celda Δx para cada caso (en mm).

Malla	x_{max}	y_{max}	z_{max}	N_x	N_y	N_z	Δx
G_2	7.5	7.5	20.0	72	72	192	0.21
G_3	7.5/4	7.5/4	5.0	72	72	192	0.052
G_4	33.0/256	33.0/256	33.0/256	99	99	99	0.0026

como el mostrado en la Fig. 7.3(a), que se concatenan en la dirección z, extendiéndose sobre toda la longitud de la malla. El segundo grupo se compone por 24 bloques cilíndricos y huecos, como se muestra en la Fig. 7.3(b), de manera de que los bloques del primer grupo encajan perfectamente en su hueco. Las paredes laterales de los bloques del primer grupo y las internas del segundo grupo componen la interfaz entre ellas. La pared externa de los bloques del segundo grupo cumple la función de pared lateral de la malla.

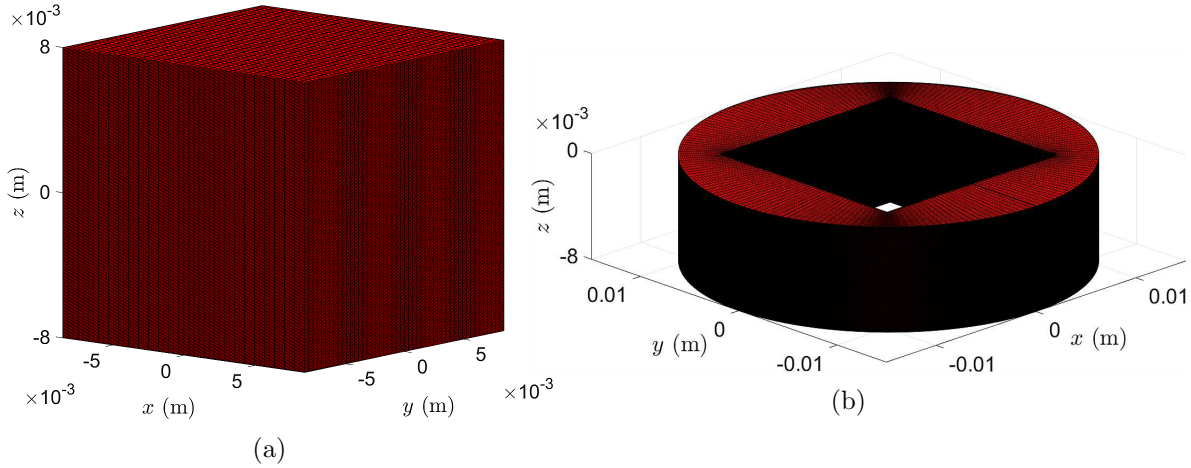


Figura 7.3: Ejemplos de bloques que conforman a la malla cilíndrica: (a) uno de los 12 bloques prismáticos que forman el núcleo; (b) uno de los bloques que revisten al núcleo y que le dan la forma cilíndrica a la malla

El bloque de la Fig. 7.3(a) tiene dimensiones $(17.0 \times 17.0 \times 16.0)$ mm y la distribución de celdas es $(48 \times 48 \times 384)$ en las direcciones x, y y z respectivamente, teniendo así un tamaño de celda $\Delta x \approx 0.35$ mm. Cada bloque del segundo grupo (Fig. 7.3(b)) tiene un diámetro de 30.0 mm y 8.0 mm de altura. En este caso, el perímetro se divide en 192 celdas, al igual que la altura. De esta manera, las celdas que se encuentran en la interfaz entre los dos grupos de bloques se comunican uno a uno, es decir, cada una de esta celdas comparte

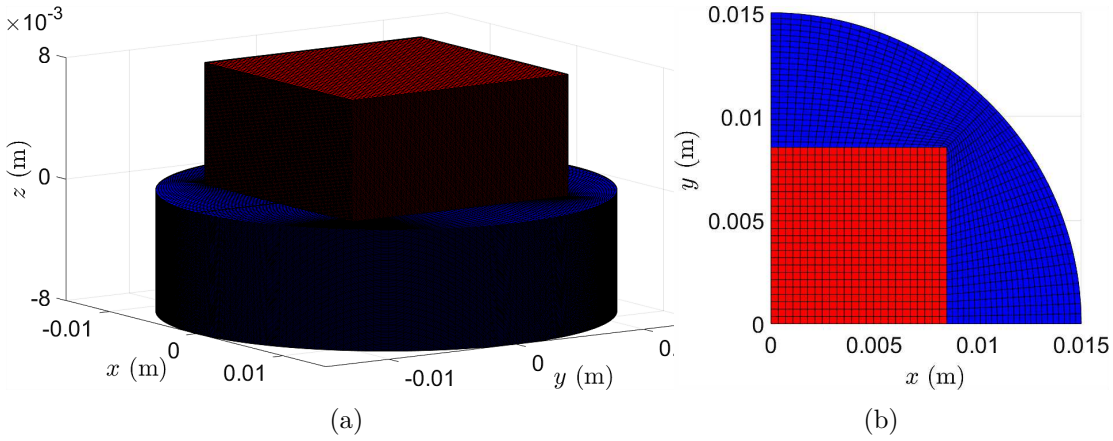


Figura 7.4: Bloques que conforman la malla cilíndrica: (a) el bloque del núcleo (rojo) encaja en hueco del bloque que lo reviste (azul); (b) cada celda roja sobre la interfaz entre los bloques comparte exactamente una de sus caras con la celda azul vecina.

exactamente una de sus caras. En la Fig. 7.4(a) se puede ver cómo el núcleo prismático encaja perfectamente en los bloques del segundo grupo, y en la Fig. 7.4(b) se muestra cómo las celdas sobre la interfaz se comunican uno a uno.

Como vimos en el Cap. 5, existe una jerarquía cuando se anidan mallas. En este caso, G_4 es la de mayor jerarquía, la sigue G_3, luego G_2 y la de menor jerarquía es la malla *background* G_1. Las distancias de solapamiento que usamos son: 1.0 mm para G_1, G_2 y G_3, y 0.2 mm para G_4.

Las regiones anidadas G_2, G_3 y G_4 siempre se trasladan de manera solidaria a la esfera. Debido a la simetría de la esfera, no daremos movimiento de rotación a las mallas. Igualmente, la actual implementación del CAFFA3D.MBRI es capaz de rotar las mallas anidadas.

El primer grupo de simulaciones, que se desarrolla en la Sec. 7.3, consiste en un flujo uniforme, con velocidad v_{lim} (calculada en la Sec. 7.1) aguas arriba, y la esfera fija en el origen de coordenadas. En el segundo grupo, el fluido se encuentra inicialmente en reposo y se impone un movimiento vertical y con velocidad constante v_{lim} sobre la esfera. Estas simulaciones se describen en la Sec. 7.4 y se comparan los resultados de ambos grupos de cálculos frente a situaciones análogas, es decir, de iguales condiciones de movimiento relativo sólido-fluido.

7.3. Simulaciones con esfera fija y flujo uniforme aguas arriba

En esta sección presentamos las simulaciones en las que un flujo que es uniforme aguas arriba (o sea, lejos del cuerpo) se ve alterado por la presencia de una esfera rígida de diámetro D fija en el origen de coordenadas. Los valores del número de Reynolds (Re) que fueron utilizados son 0.2, 0.5, 10.0 y 50.0.

El dominio computacional consiste en el cilindro descrito en la sección anterior, de 1.5 cm de radio y 19.2 cm de largo. El eje del cilindro coincide con el eje z de coordendas y su extensión ocupa el intervalo $z = [-5.6, +13.6]$ cm. Las condiciones de borde impuestas son las siguientes:

- $z = -5.6$ cm (tapa inferior): entrada de fluido con perfil uniforme de velocidad U_{lid}
- $z = +13.6$ cm (tapa superior): salida de fluido con flujo desarrollado. Es decir, que la componente del gradiente de velocidad normal a dicha frontera es nula.
- $r = 1.5$ cm (superficie lateral): condiciones de borde de simetría. Es decir, se impone que la componente de la velocidad normal a la frontera y que la componente normal a la misma frontera del gradiente para todas las variables sean nulas. La condición de frontera de simetría determina que el esfuerzo de corte en dicha frontera sea nulo. Puede interpretarse también como condición de pared «deslizante».

Las condiciones iniciales son de fluido en reposo en todo el dominio computacional, excepto en la tapa inferior ($z = -5.6$ cm), donde se impone un perfil de velocidades vertical y uniforme de magnitud U_{lid}. Al imponer este cambio abrupto sobre el flujo, inicialmente en reposo, genera un transitorio prolongado, hasta que la fuerza de *drag* converge hacia su valor en el estado final estacionario. Una forma de mitigar este efecto es imponiendo que la velocidad de entrada del fluido crezca gradualmente, desde cero hasta el valor deseado U_{lid}. Cuando más lento sea ese crecimiento, más suaves serán las fluctuaciones de la fuerza.

En las siguientes secciones se exponen los resultados obtenidos para los diferentes valores de Re. La densidad y viscosidad dinámica elegidas para el fluido son $\rho_f = 1.0 \times 10^3$ kg/m^3 y $\mu = 10^{-3}$ Pa $\cdot$ s y el diámetro de la esfera se fijó en $D = 1$ mm. La magnitud que fue modificada para variar el número de

Reynolds es U_{lid}. En cada caso se calculó el valor numérico de la fuerza de *drag* $F_D^{(num)}$ (resultado de las simulaciones), que se compara con el valor empírico $F_D^{(teo)}$.

El valor empírico $F_D^{(teo)}$ se calcula para cada Re utilizando la Ec. 7.1. De dicha ecuación se obtiene el coeficiente de *drag* empírico y, a partir de este y de la Ec. 7.4, se calcula $F_D^{(teo)}$.

El parámetro de referencia empleado para comparar el resultado empírico con el numérico es el error relativo porcentual que definimos como:

$$\epsilon_{F_D} = \left| \frac{F_D^{(teo)} - F_D^{(num)}}{F_D^{(teo)}} \right| \times 100 \tag{7.9}$$

7.3.1. Simulaciones con $Re = 0.5$

En el caso con $Re = 0.5$ se utilizó $U_{lid} = 5.0 \times 10^{-4}$ m/s y los valores obtenidos fueron $C_D^{(teo)} \approx 50$ y $F_D^{(teo)} \approx 4.940 \times 10^{-9}$ N. Se trabajó con distintas combinaciones de las mallas anidadas definidas en la Sec. 7.2 y diferentes factores de *blending* (Gds). Recordamos que $Gds = 1$ implica un esquema centrado (CDS) para la discretización del término de flujo convectivo y $Gds = 0$ establece un esquema *upwind* (UDS).

La superficie de la esfera es definida mediante la ecuación analítica de su superficie. Con ella se define el campo escalar X_{imb}, cuyo valor en cada celda del dominio computacional es igual a la distancia entre dicha celda y la superficie de la esfera, tomando valores negativos en las celdas interiores.

En todos los casos el paso temporal es $dt = 2.0$ s y en cada paso se realizaron 10 iteraciones externas. Los valores de $F_D^{(num)}$ se obtienen una vez que el flujo alcanza su estado estacionario. Existe un régimen transitorio en el que la perturbación, inducida por el flujo que ingresa al dominio (que inicialmente contiene fluido en reposo), alcanza todas las celdas de cálculo. Esto se puede observar en la Fig. 7.5, donde se muestra la evolución de la fuerza de *drag* numérica en función de la cantidad total de iteraciones externas completadas para el caso $Gds = 0.9$ (si bien en este caso cada 10 iteraciones externas se pasa al siguiente paso temporal, debido a que el problema es estacionario, se puede contar la cantidad total de iteraciones externas totales, precisamente como si no hubiese evolución temporal). El número de iteraciones externas necesario para la convergencia de la $F_D^{(num)}$ puede parecer excesivo, pero es consecuencia de que las condiciones iniciales son muy distantes al flujo final desarrollado,

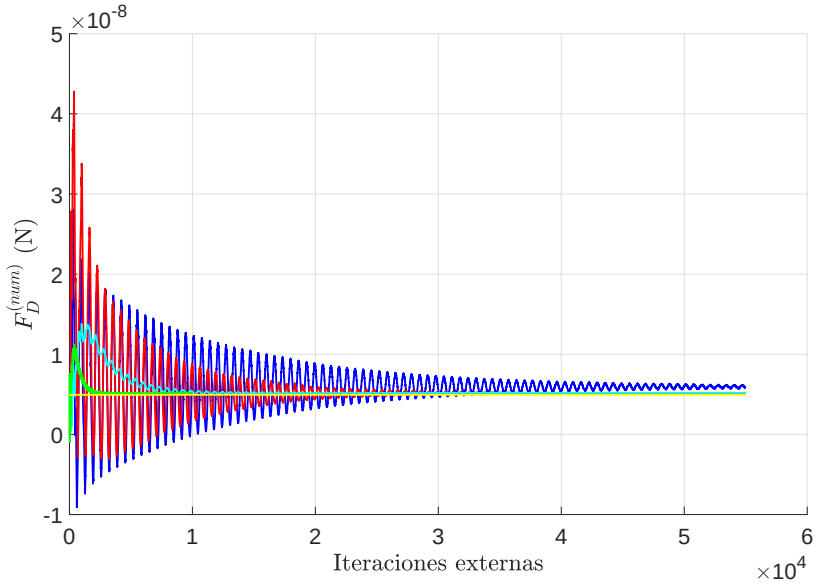


Figura 7.5: Comparación de la convergencia de $F_D^{(num)}$ en función de las mallas utilizadas, para $Re = 0.5$ y $Gds = 0.9$. El máximo nivel de refinamiento de malla para los casos graficados son G_1 (azul), G_2 (rojo), G_3 (celeste) y G_4 (verde), y se grafica además el valor empírico $F_D^{(teo)}$ (amarillo).

alcanzado el régimen estacionario. En la Fig. 7.5 también se puede observar que un mayor refinamiento de malla acelera la convergencia de $F_D^{(num)}$.

Tabla 7.2: Resultados obtenidos para $Re = 0.5$. Se señalan con cruces a las mallas anidadas utilizadas en cada caso (en todos los casos G_1 es la malla *background*)

Gds	G_2	G_3	G_4	$F_D^{(num)}$ (10^{-9} N)	ϵ_{F_D} (%)
0.5				5.912	19.7
0.5	x			5.171	4.7
0.5	x	x		5.190	5.1
0.9				5.954	20.5
0.9	x			5.189	5.0
0.9	x	x		5.185	5.0
0.9	x	x	x	5.181	4.7
1.0	x	x		5.184	4.7

Los valores a los que converge la fuerza de *drag* numérica para todos los casos estudiados en esta sección se muestran en la Tab. 7.2. Allí se observa que el valor de ϵ_{F_D} no disminuye sustancialmente a partir de cierto nivel de refinamiento de malla. Esto se explica a partir del hecho de que el Re es bajo, ya que para valores mayores de Re es necesario resolver con mayor definición el

flujo en la capa límite que se genera en torno a la esfera. Prestaremos especial atención a este detalle para el caso de $Re = 50$. Dado que no muestra notorias mejoras respecto al uso de G_3, no consideraremos la malla G_4 en las siguientes secciones, de manera de acortar la cantidad de casos de estudio.

En resumen, los resultados de la Tab. 7.2 indican que al refinar la malla de cálculo en las cercanías de la esfera, usando mallas anidadas más finas, se reduce el error. Por otro lado, usando la misma malla de cálculo, el error se reduce cuando *Gds* se aproxima a 1.0.

Simulaciones con carga de *patch*

Hacemos un breve paréntesis en el análisis en progreso para revisar el comportamiento del CAFFA3D.MBRI cuando se hace uso de una de sus notables características, que a su vez es común a la mayoría de los paquetes comerciales: la habilidad de cargar la geometría del cuerpo rígido que fue previamente generada mediante un *software* de diseño. Esta característica abre la posibilidad de cargar cuerpos de geometría arbitraria. Aquí investigamos si, para un caso particular elegido de manera arbitraria ($Re = 0.5$), se obtienen los mismos valores de fuerzas de interacción con el fluido que en el caso en que se define la geometría del cuerpo a través de la fórmula analítica de su superficie.

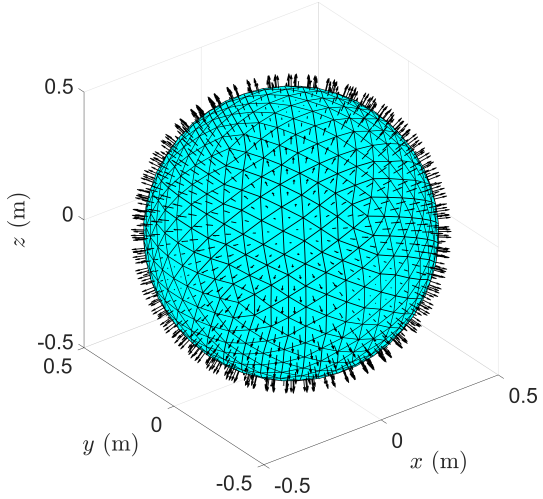


Figura 7.6: *Patch* utilizado para aproximar a la superficie de la esfera para las simulaciones de esta sección

Con la misma configuración de parámetros que la usada antes para $Re = 0.5$, se realizaron simulaciones donde el CAFFA3D.MBRI carga la superficie de la esfera a partir de una malla de triángulos que la definen o *patch*. El *patch*

se genera a partir de un conjunto de puntos de dicha superficie, con los que generan triángulos (entre los puntos más cercanos entre sí). Así, el *patch* se compone por dichos triángulos y sus vectores normales y salientes al cuerpo en sus baricentros. Cuantos más puntos se consideren, mejor será la representación de la superficie de la esfera por el *patch*, es decir, la superficie aproximada se asemeja más a la superficie real. En esta sección se utilizó el *patch* de la Fig. 7.6, que consta de 642 vértices y 1280 triángulos y normales.

El factor de *blending* utilizado es $Gds = 0.9$, el paso temporal es $dt = 2.0$ s, realizando 10 iteraciones externas por cada paso temporal, y las mallas anidadas utilizadas fueron G_2 y G_3. En la Fig. 7.7 se comparan los cálculos de $F_D^{(num)}$ para el caso en que se define la superficie de la esfera a partir de su ecuación analítica y el caso en que se utiliza el *patch*. El valor al que converge la fuerza de drag numérica para el caso de uso de *patch* es $F_D^{(num)} \approx 5.173 \times 10^{-9}$ N, que tiene un error porcentual $\epsilon_{F_D} \approx 4.7\,\%$. Este valor es muy similar al obtenido en la Tab. 7.2.

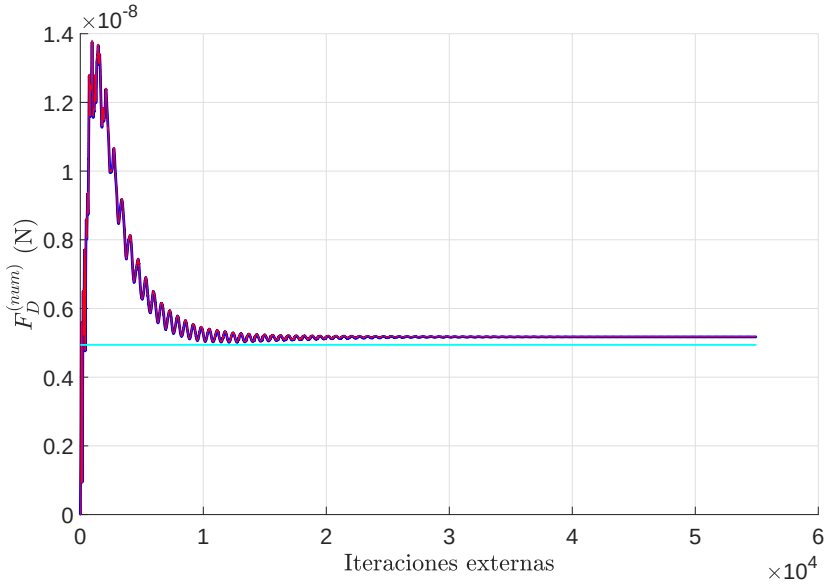


Figura 7.7: Comparación de la fuerza $F_D^{(num)}$ calculada en simulaciones en que usan *patch* (curva de color azul) con simulaciones en las que se define explícitamente la superficie de la esfera (rojo).

Para comparar los resultados del CAFFA3D.MBRI para ambas situaciones, en la Fig. 7.8 se muestran contornos de la componente de vorticidad ω_y para ambas situaciones una vez alcanzada la convergencia de las simulaciones (régimen estacionario). Como se puede observar, los campos no muestran diferencias,

lo que hace suponer que los resultados que se presentarán en las siguientes secciones, con cuerpos rígidos definidos mediante su fórmula analítica, serán similares a los que se obtendrían mediante la carga de *patch*.

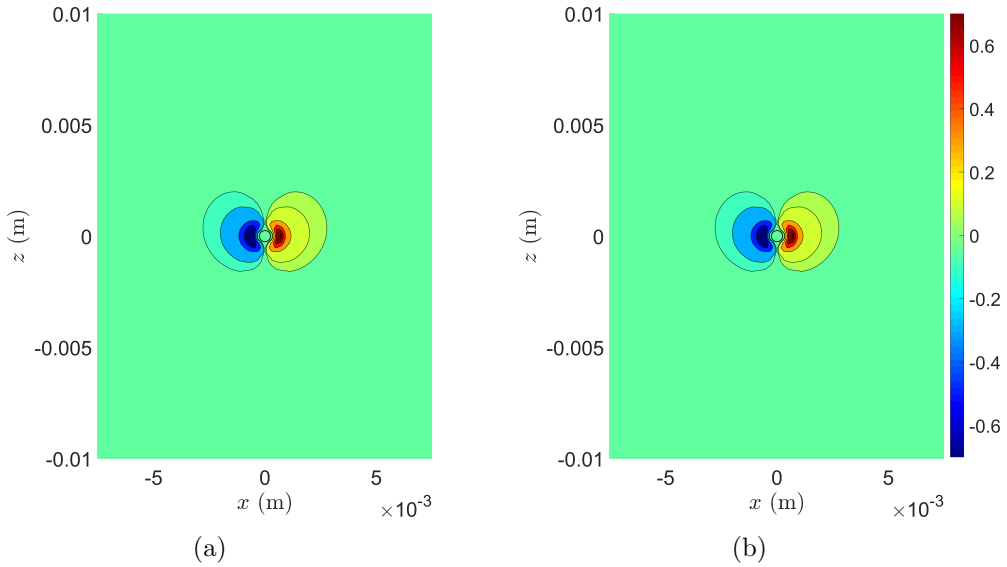


Figura 7.8: Contornos de la componente de vorticidad ω_y (s^{-1}) en el plano $x = 0$ para el flujo en torno a una esfera definida: (a) de manera analítica (campo de distancias X_{imb}); (b) usando la malla de triángulos (*patch*).

A pesar de que todos los resultados que presentaremos en las próximas secciones de esta tesis corresponden a cuerpos definidos a través de su fórmula analítica, los módulos incorporados al CAFFA3D.MBRI permiten cargar el *patch* de uno o más cuerpos, así como trasladarlo y rotarlo conforme las ecuaciones cardinales que describen su dinámica.

7.3.2. Simulaciones con $Re = 10.0$

En esta sección, el caso de análisis corresponde al mismo dominio computacional de la sección anterior, mismas condiciones de frontera y condiciones iniciales y el mismo obstáculo esférico, definido a través de su ecuación analítica (X_{imb}). La variante impuesta es considerar $Re = 10.0$, al utilizar $U_{lid} = 1.0 \times 10^{-2}$ m/s. Los valores empíricos para este caso son $C_D^{(teo)} \approx 4.4$ y $F_D^{(teo)} \approx 1.729 \times 10^{-7}$ N.

Se utilizaron mallas de cálculo con diferentes refinamientos y dos valores diferentes del factor de *blending*. El paso temporal es $dt = 1.0$ s y se realizan 10 iteraciones externas en cada paso temporal. En la Tab. 7.3 se resumen las

características de las simulaciones realizadas y los resultados obtenidos.

Tabla 7.3: Resultados obtenidos para $Re = 10.0$. Se señalan con cruces a las mallas anidadas utilizadas en cada caso (en todos los casos G_1 es la malla *background*).

Gds	G_2	G_3	$F_D^{(num)}$ (10^{-7} N)	ϵ_{F_D} (%)
0.5	x		1.709	1.2
0.5	x	x	1.721	0.5
0.9	x		1.664	3.8
0.9	x	x	1.707	1.3

Como se puede observar en la Tab. 7.3, los valores computacionales de $F_D^{(num)}$ se encuentran en excelente concordancia con los datos de referencia. De hecho, comparando los errores de dicha tabla con los obtenidos en la sección anterior para $Re = 0.5$, estos resultados son levemente mejores. Esto se explica basándonos en que la fuerza de *drag* para $Re = 0.5$ es significativamente menor que la correspondiente para $Re = 10.0$, lo que implica que cualquier pequeña diferencia con el valor empírico se vea magnificada, por ser tan pequeño el propio valor empírico $F_D^{(teo)}$ para $Re = 0.5$ (que divide la diferencia en la definición de ϵ_{F_D}).

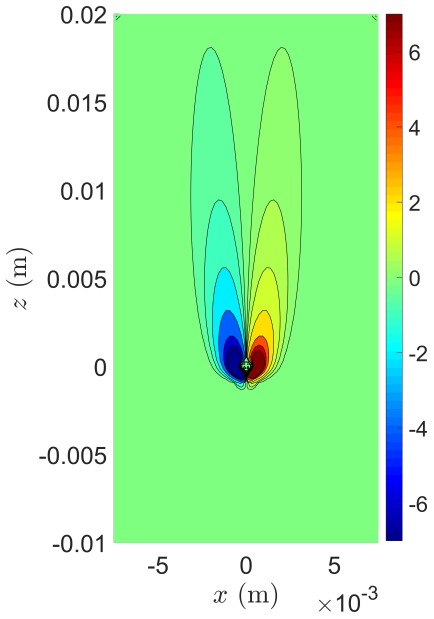


Figura 7.9: Contornos de vorticidad de ω_y (s^{-1}) en el plano $x = 0$ una vez alcanzada la convergencia del modelo para $Re = 10.0$, $Gds = 0.9$ y dos mallas anidadas, G_2 y G_3.

Finalmente, en la Fig. 7.9 se muestran contornos de vorticidad para la

componente ω_y en el plano vertical $x = 0$. que pasa por el centro de la esfera, donde se puede ver que la estela que se desarrolla detrás de la esfera tiene una mayor extensión, si comparamos con el caso $Re = 0.5$. A pesar de ello, en nuestras simulaciones los valores de la velocidad son prácticamente iguales a la salida del dominio (sección transversal en $z = +13.6$ cm).

7.3.3. Simulaciones con $Re = 50.0$

En esta sección presentamos los resultados para el caso del mayor Re con el que trabajamos, $Re = 50.0$. Para esto, se definió como velocidad de entrada $U_{lid} = 5.0 \times 10^{-2}$ m/s, y las fórmulas empíricas conducen a los valores $C_D^{(teo)} \approx 1.5$ y $F_D^{(teo)} \approx 1.511 \times 10^{-6}$ N.

Al igual que en el caso de $Re = 10.0$, trabajamos con dos niveles de refinamiento de mallas (mallas anidadas G_2 y G_3), y con los factores de *blending* 0.5 y 0.9. El paso temporal utilizado es $dt = 1.0$ s y se realizaron 10 iteraciones externas por paso temporal. Como mencionamos, aquí también representamos la superficie de la esfera mediante su fórmula analítica.

En la Tab. 7.4 se resumen las características de las simulaciones realizadas y los errores obtenidos respecto del valor empírico $F_D^{(teo)}$. De los resultados se desprende que, para conseguir resultados satisfactorios, en este caso se requiere un mayor Gds y un alto refinamiento de malla. Ambos componentes actúan en mejorar la precisión del esquema debido a que $Gds = 1$ implica un esquema centrado, que es de segundo orden, y el uso de mallas más finas permite resolver con mejor definición el flujo en las cercanías de la superficie de la esfera.

Tabla 7.4: Resultados obtenidos para $Re = 50.0$. Se señalan con cruces a las mallas anidadas utilizadas en cada caso (en todos los casos G_1 es la malla *background*).

Gds	G_2	G_3	$F_D^{(num)}$ (10^{-6} N)	ϵ_{F_D} (%)
0.5	x		2.040	35.0
0.5	x	x	1.632	8.0
0.9	x		1.853	22.7
0.9	x	x	1.577	4.4

Sin embargo, en el caso de $Re = 50.0$ existe otro factor que se manifesta en los campos de velocidades mostrados en la Fig. 7.10. Se trata de la estela que se desarrolla detrás de la esfera, cuya prolongación es mayor que en los casos anteriores. Esto provoca que imponer que la componente vertical del

gradiente de velocidades en la salida del dominio (en $z = +13.6$ cm) sea nulo no es la condición de borde apropiada en este caso. La condición de borde más apropiada para este caso sería imponer gradiente de presiones nulo, aunque no entraremos en ese análisis.

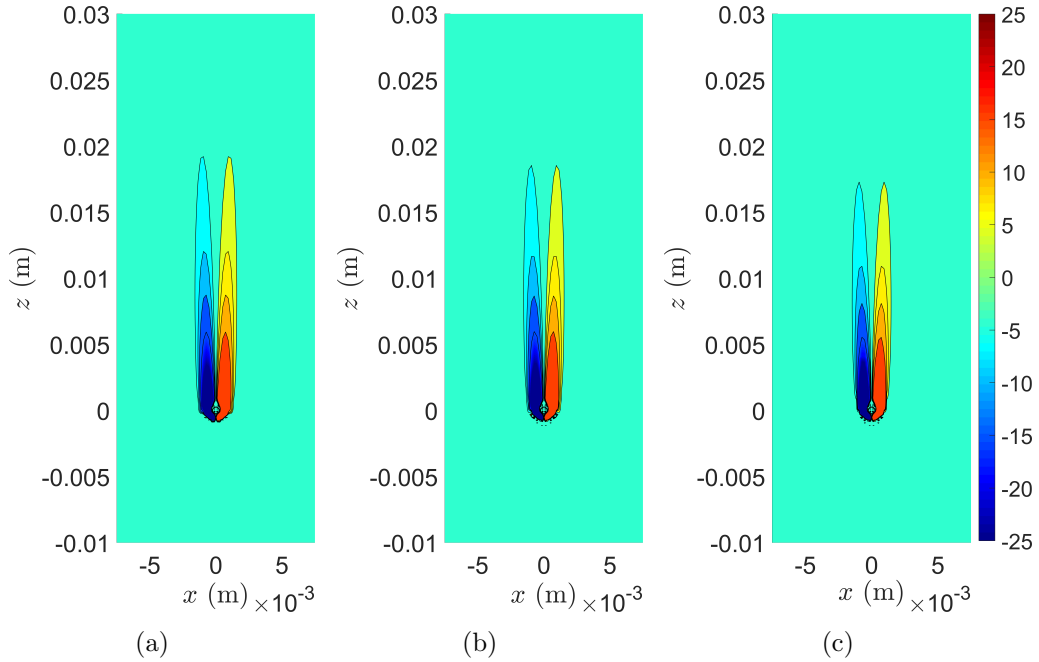


Figura 7.10: Contornos de vorticidad para la componente ω_y (s^{-1}) en el plano $x = 0$ para los siguientes factores Gds y máximo nivel de refinamiento de malla: (a) $Gds = 0.5$, G_2; (b) $Gds = 0.9$, G_2 y (c) $Gds = 0.9$, G_3.

Hasta aquí podemos concluir que los cálculos del CAFFA3D.MBRI para la fuerza de interacción entre la esfera y el flujo en el que se encuentra inmersa, en una posición fija, se encuentran en excelente concordancia con los valores empíricos. En la siguiente sección se comparan este caso con otro análogo, en el que la esfera se mueve con una velocidad constante, impuesta, mientras que no se impone ningún forzante que mueva al fluido. Dado que el mismo movimiento relativo entre la esfera y el fluido es el mismo, se espera obtener resultados similares.

7.4. Respuesta del modelo ante problemas con igual movimiento relativo sólido-fluido

En esta sección se analiza el posible desarrollo de asimetrías, de procedencia numérica, ante situaciones que involucran el mismo movimiento relativo entre un rígido y el flujo en el que se encuentra inmerso. Por un lado, se considera el caso en que un flujo, uniforme aguas arriba, se mueve en torno a obstáculo esférico inmerso en él y cuya posición está fija. Por otro lado, consideramos el caso en que el fluido se encuentra inicialmente en reposo, y la esfera es movida con la misma velocidad que tenía el flujo aguas arriba en la situación anterior, pero en dirección opuesta. Por lo tanto, el Re es el mismo para ambas situaciones. Utilizamos el mismo dominio computacional y mallas de discretización. Las mallas anidadas se posicionan con la esfera en su centro, lo que requiere que sean trasladadas de manera solidaria a la esfera en el caso de que ésta se mueve.

En este estudio seleccionamos $Re = 0.2$, de manera de reducir el impacto debido a las condiciones de borde en las fronteras del dominio, y analizamos los campos de velocidades en el referencial solidario a la esfera, donde los resultados para ambos casos deben ser los mismos.

Inspirados en las características de materiales que disponemos en nuestro laboratorio, introducimos pequeñas modificaciones en los parámetros de las secciones anteriores. Las propiedades del fluido aquí son $\rho_f = 1260$ kg/m^3 y $\mu = 1.41$ Pa$\cdot$s (glicerina pura a 20°C), y el diámetro de la esfera $D = 1.3$ mm, cuya superficie la definimos a partir de su fórmula analítica (definición explícita de X_{imb}).

Si se impone $Re = 0.2$, la velocidad característica relativa entre el rígido y el fluido debe ser $U_{lid} \approx 17.2$ cm/s. A partir de los resultados de la Sec. 7.1, el coeficiente de *drag* empírico es $C_D^{(teo)} \approx 122$ y, por lo tanto, $F_D^{(teo)} = 3.028 \times 10^{-3}$ N.

En la Sec. 7.4.1 se analiza la situación en que la esfera se encuentra fija y un flujo uniforme aguas arriba, con velocidad U_{lid}, incide sobre ella. Luego, en la Sec. 7.4.2 se analiza el caso en que el fluido se encuentra inicialmente en reposo y la esfera se desplaza con velocidad U_{lid}, y se comparan los resultados obtenidos en ambas secciones.

7.4.1. Esfera fija, flujo uniforme aguas arriba

El análisis que se realiza en esta sección es igual al de las Secs. 7.3.1 a 7.3.3, con la variante de que el paso temporal utilizado aquí es $t = 0.01$ s y se realizaron 10 iteraciones externas por cada paso temporal. La reducción de dt respecto a secciones anteriores no influye en nuestro análisis y su elección es arbitraria, ya que la solución final, una vez alcanzada la convergencia, es estacionaria.

Se repitieron simulaciones utilizando diferentes combinaciones de mallas anidadas, las que se describen en la Tab. 7.5, así como los factores de *blending* y los errores respecto del valor empírico $F_D^{(teo)}$ en cada caso. La evolución hacia la convergencia del cálculo de $F_D^{(num)}$ para los diferentes casos se muestran en la Fig. 7.11.

Tabla 7.5: Resultados obtenidos para $Re = 0.2$. Se señalan con cruces a las mallas anidadas utilizadas en cada caso (en todos los casos G_1 es la malla *background*).

Gds	G_2	G_3	G_4	$F_D^{(num)}$ (10^{-3} N)	ϵ_{F_D} (%)
0.9	x	x		3.213	6.9
0.9	x	x	x	3.242	7.1
1.0	x	x		3.238	6.9

Los resultados numéricos se encuentran, al igual que en las secciones anteriores, en excelente concordancia con los empíricos. A pesar de esto, notamos un leve aumento de ϵ_{F_D} cuando disminuimos Re. Este efecto se observó incluso al emplear un mayor nivel de refinamiento, con la malla G_4. Consideramos que la causa radica en que, cuando se trabaja con Re bajos, los esfuerzos de corte toman valores más pequeños. Esto hace imprescindible que su cálculo sea sumamente preciso y, por lo tanto, lo sea también el cálculo de los gradientes de velocidad. Dentro del trabajo a futuro se plantea reforzar este punto, analizando variantes para el cálculo de gradientes, como ser revisando diferentes esquemas de interpolación.

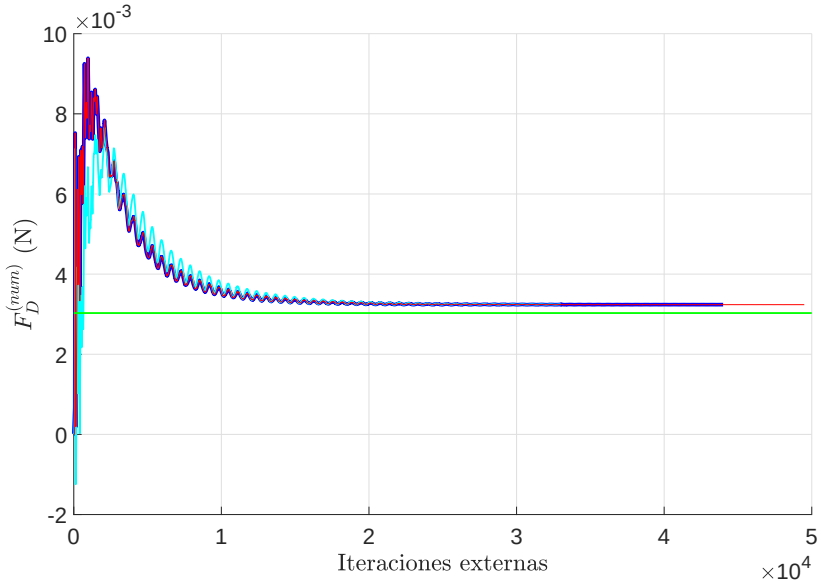


Figura 7.11: Comparación de la convergencia de $F_D^{(num)}$ para $Re = 0.2$, para diferentes factores de *blending* y máximo nivel de refinamiento. Las curvas corresponden a $Gds = 0.9$ y malla G_3 (azul), $Gds = 0.9$ y malla G_4 (rojo), $Gds = 1.0$ y malla G_3 (celeste) y valor del modelo teórico $F_D^{(teo)}$ (verde).

7.4.2. Esfera móvil, fluido inicialmente en reposo

Como caso análogo al mostrado para $Re = 0.2$, aquí consideramos que el fluido se encuentra inicialmente en reposo y que la esfera es movida en dirección vertical, con velocidad constante U_{lid} (igual a la del fluido aguas arriba en la Sec. 7.4.1). Cuando nos posicionamos en el referencial solidario a la esfera, los resultados de ambas secciones deben coincidir una vez alcanzado el régimen estacionario. Este análisis lograría validar el método descrito en la Sec. 3.6.1, que permite al utilizar mallas móviles en el CAFFA3D.MBRI.

Las propiedades del fluido y de la esfera son las mismas que las de la sección anterior, y la esfera aquí se mueve con velocidad $U_{lid} \approx 17.2$ cm/s.

Se usaron las mallas anidadas G_2 y G_3, que se trasladan a la misma velocidad que la esfera. Se utilizó el factor de *blending* $Gds = 0.9$ y el paso temporal $dt = 1.0 \times 10^{-4}$ s, que es significativamente más pequeño que el empleado en las secciones anteriores, para evitar una posible divergencia del método como consecuencia del movimiento relativo entre las mallas. Este aspecto se analizó en ensayos previos al que exponemos, buscando evitar desplazamientos relativos bruscos entre las mallas.

La otra variante que se introdujo en esta sección es la relativa a las con-

diciones de borde del problema. En este caso se impusieron condiciones de borde periódicas en las tapas o extremos del dominio (planos $z = -5.6$ cm y $z = +13.6$ cm).

Inicialmente, el fluido se encuentra en reposo y la esfera se ubica centrada en el origen de coordenadas, y con velocidad vertical y hacia arriba (de manera de tener un mayor recorrido entre los extremos del dominio). La esfera no es capaz de rotar, solamente se traslada. El módulo de la velocidad se aumenta linealmente desde el reposo en $t = 0$ hasta el valor U_{lid} en $t = 0.01$ s, momento a partir del cual se mantiene constante. Esto se hace para promover una mejor convergencia del método, imponiendo variaciones graduales y no abruptas.

Se hicieron simulaciones utilizando tres cantidades diferentes de iteraciones externas por cada paso temporal: 10, 100 y 300. Una vez que la esfera alcanzó la velocidad U_{lid} y el flujo alcanzó el régimen estacionario final, se calculó la fuerza de *drag* $F_D^{(num)}$. En la Tab. 7.6 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 7.6: Resultados para el caso de esfera móvil para $Gds = 0.9$ en función de la cantidad de iteraciones externas por cada paso temporal

Iteraciones externas	$F_D^{(num)}$ (10^{-3} N)	ϵ_{F_D} (%)
10	3.278	8.3
100	3.223	6.4
300	3.241	7.0

El efecto de aumentar la cantidad de iteraciones externas sobre el cálculo de $F_D^{(num)}$ se muestra en la Fig. 7.12. Allí se observa que a medida que aumentamos la cantidad de iteraciones externas, se alcanza más rápidamente la convergencia de dicha fuerza. Además, mejora su estimación, principalmente cuando comparamos con los cálculos realizados con 10 iteraciones externas. Debemos tener presente que realizar más iteraciones externas por cada paso temporal, incrementa significativamente el tiempo de cálculo. Este punto es crucial porque, por ejemplo en este caso, disminuir el error relativo de 8.3 % a 7.0 % requiere pasar de 10 a 300 iteraciones externas por paso temporal (como en la Tab. 7.6), que conlleva un aumento en el tiempo de cálculo por un factor del orden de 30.

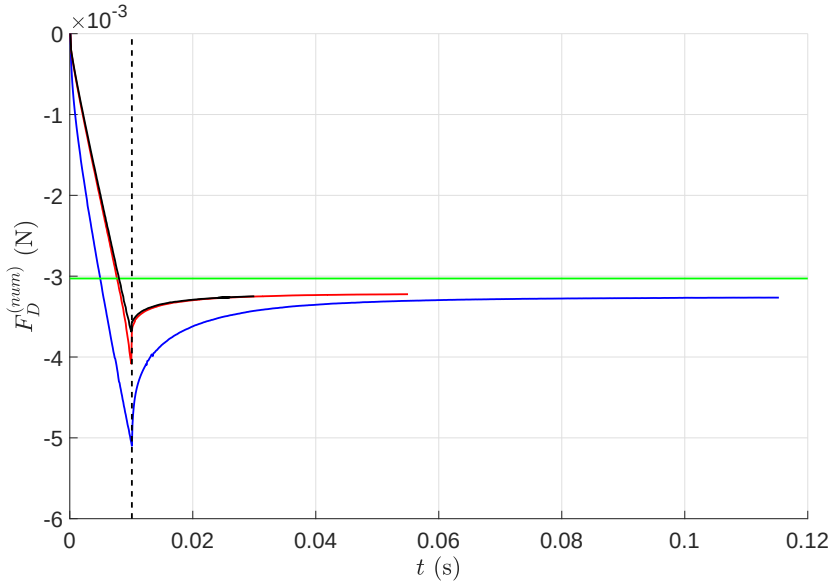


Figura 7.12: Evolución temporal de F_D empleando 10 (azul), 100 (rojo) y 300 (negro) interaciones externas por paso temporal, y se señala también el valor empírico $F_D^{(teo)}$ (verde). En trazo punteado se señala el instante $t = 0.01s$ (cuando la esfera alcanza la magnitud U_{lid}).

A partir de la Fig. 7.12 se puede hacer además un estudio de cuántas iteraciones externas es necesario realizar para que la evolución del cálculo de $F_D^{(num)}$ no presente variaciones, como sucede aquí para 100 y 300. Sería interesante realizar cálculos intermedios, como ser para 50 iteraciones externas, para encontrar el número óptimo de estas iteraciones a utilizar.

En el intervalo de tiempo durante el que se aumenta la velocidad de la esfera aumenta (correspondiente a los 0.01 s iniciales) el valor de la fuerza aumenta (cuyo valor negativo se debe a que la esfera se desplaza en sentido positivo, hacia arriba). En color verde se muestra el valor empírico de la fuerza de *drag* $F_D^{(teo)}$. Se puede ver que al aumentar la cantidad de iteraciones externas realizadas en cada paso temporal, los resultados numéricos se encuentran más próximos al valor empírico y se acercan más rápidamente a éste. Sin embargo, como ya se mencionó, se debe considerar que realizar un gran número de iteraciones externas eleva el costo computacional del modelo y puede ser meritorio solo en casos en que se requiera una elevada precisión de los cálculos.

Si comparamos los resultados obtenidos aquí con los del caso análogo, de la Tab. 7.5, para la misma malla y mismo factor de *blending*, observamos que los valores de $F_D^{(num)}$ se encuentran en excelente concordancia. Para enfatizar la robustez de los cálculos, se analizan los perfiles de velocidad vertical obtenidos

en un referencial solidario a la esfera para ambas situaciones. En la Fig. 7.13 se comparan estos perfiles a tres distancias diferentes del centro de la esfera y detrás de esta (en relación a su movimiento relativo al fluido). Las posiciones seleccionadas fueron $z = 0$, 5 y 30 mm respecto al centro de la esfera.

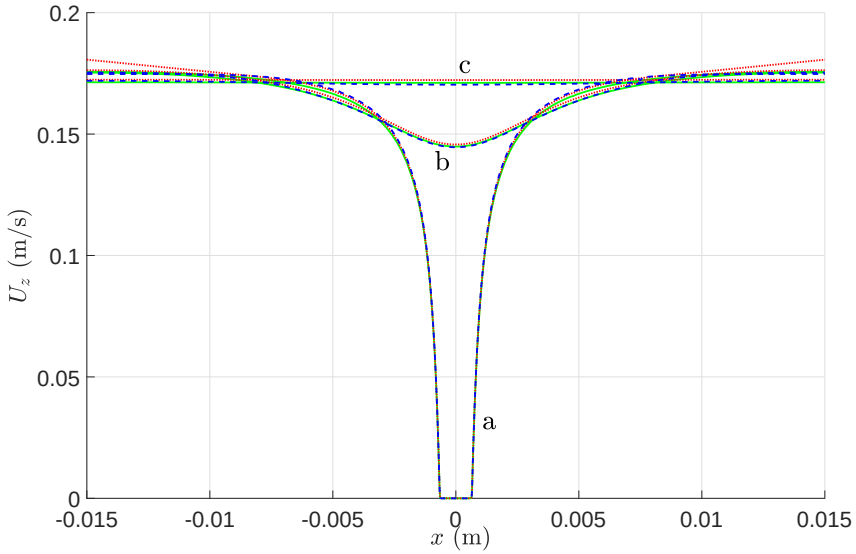


Figura 7.13: Perfiles de velocidad vertical para $Re = 0.2$, $Gds = 0.9$ y para las alturas 0 mm (grupo de tres curvas (a)), 5 mm (grupo de tres curvas (b)) y 30 mm (grupo de tres curvas (c)) detrás de la esfera (aguas abajo). Los colores corresponden a: rojo, flujo uniforme, esfera fija, 10 iteraciones externas por paso temporal; azul, esfera móvil, fluido inicialmente en reposo, 10 iteraciones externas; verde, esfera móvil, fluido inicialmente en reposo, 100 iteraciones externas

Como se puede observar, los perfiles de velocidad obtenidos en situaciones análogas, con igual movimiento relativo sólido-fluido, están en excelente concordancia para todas las alturas consideradas. Estos resultados, junto con los valores de la fuerza de *drag* obtenidos en ambas situaciones, nos permiten concluir que el modelo resuelve de forma solvente el flujo en la presencia de un obstáculo fijo o móvil. Además, los cálculos obtenidos a partir de mallas anidadas móviles son consistentes con el flujo en el resto del dominio computacional. Es decir, el movimiento relativo de las mallas anidadas no generan ninguna solución espuria en ninguna región del dominio (lo cual podría suceder), cercana o lejana al obstáculo, mostrando así que las consideraciones descritas en la Sec. 3.6.1 permiten que el CAFFA3D.MBRI resuelva correctamente el flujo.

Capítulo 8

Desempeño de la modelación de las ecuaciones cardinales

En este capítulo se evalúa el desempeño de los esquemas numéricos implementados para discretizar las ecuaciones cardinales, que rigen el movimiento de un cuerpo rígido. En primer lugar, en la Sec. 8.1, consideramos una situación donde el movimiento del rígido es de traslación pura, despreciando la componente rotacional del movimiento. Luego, en la Sec. 8.2, consideramos el caso opuesto, en el que un rígido se encuentra inmerso en un fluido bajo un movimiento de rotación pura. Finalmente, en la Sec. 8.3 analizamos dos situaciones en las que un rígido, inmerso en un fluido, tiene movimiento de traslación y rotación.

8.1. Análisis de la implementación computacional para la primera ecuación cardinal

La caída de una esfera inmersa en un fluido sin fronteras materiales, es decir, de dimensiones infinitas, puede considerarse como puramente traslacional cuando el Re es bajo ($Re \ll 1$) [10] y es el caso que estudiamos numéricamente en esta sección.

Para las simulaciones se usó el mismo dominio computacional de la Sec. 7.2, con la malla G_1 como *background* y las mallas G_2 y G_3 anidadas, que se trasladan de manera solidaria a la esfera. La densidad del fluido $\rho_f = 1260.0$ kg/m^3

y su viscosidad $\mu = 1.41$ Pa $\cdot$ s, de la misma manera que en la Sec. 7.4. El diámetro de la esfera es $D = 1.3$ mm y su densidad $\rho_s = 2650.8 \times 10^2$ kg/m^3. Su superficie se representa a través de su ecuación analítica (campo X_{imb}). La densidad elegida para la esfera no responde a la de ningún material real, sino que se eligió para tener obtener la configuración del Re deseado.

Sustituyendo estos parámetros en las ecuaciones descritas en la Sec. 7.1 se obtiene el valor empírico de la velocidad límite de caída de la esfera ($v_{lim} \approx 0.82$ mm/s, a partir de la Ec. 7.8), de donde resulta $Re = 0.2$.

Las condiciones iniciales son de fluido y esfera en reposo, con la esfera centrada en el origen del sistema de coordenadas. Dado el dominio computacional definido, para tener un mayor recorrido de la esfera durante su caída (Fig. 7.1), definimos, sin consecuencia alguna sobre los cálculos, el sentido de aceleración gravitatoria ($\vec{g}$) vertical y hacia arriba, o sea, la esfera caerá según la dirección del eje z.

Las condiciones de frontera son de simetría en la cara lateral de G_1 (distancia radial $r = 1.5$ cm) y condiciones de borde periódicas en las tapas ($z = -5.6$ cm y $z = +13.6$ cm). El factor de *blending* utilizado (a partir del análisis del Cap. 7) es $Gds = 0.9$ y el paso temporal $dt = 1.0 \times 10^{-4}$s.

Se compara la evolución temporal de la velocidad de caída de la esfera calculada mediante el modelo CAFFA3D.MBRI con los valores empíricos, que se obtienen haciendo uso de las fórmulas de Hongli *et at.* (2015), descritas en la Sec. 7.1. Dichas fórmulas proporcionan el valor de la fuerza de *drag* que experimenta la esfera en función de su velocidad. Integrando numéricamente esta relación, se puede obtener la evolución empírica de la velocidad de la esfera en función del tiempo, desde el reposo hasta alcanzar la velocidad límite. Debido a que hemos elegido $\rho_s \gg \rho_f$, no se requiere agregar ninguna corrección de fuerza de masa agregada a dicha integración, porque la misma resulta despreciable bajo estas condiciones [35]. Esta fuerza de masa agregada o virtual consiste en cierta inercia que es agregada al sistema, debido al desplazamiento de fluido por parte del cuerpo sólido mientras se mueve inmerso en él.

En la Fig. 8.1 se compara la evolución de la componente vertical de la velocidad de la esfera en función del tiempo obtenida el CAFFA3D.MBRI con la calculada a partir de las fórmulas empíricas. Como se puede observar, el perfil de ambas curvas es muy similar, acercándose a un valor límite en tiempos similares. Los valores de la velocidad límite a los que se acercan asintóticamente las curvas difieren en un error relativo del orden del 5 % (que se encuentra

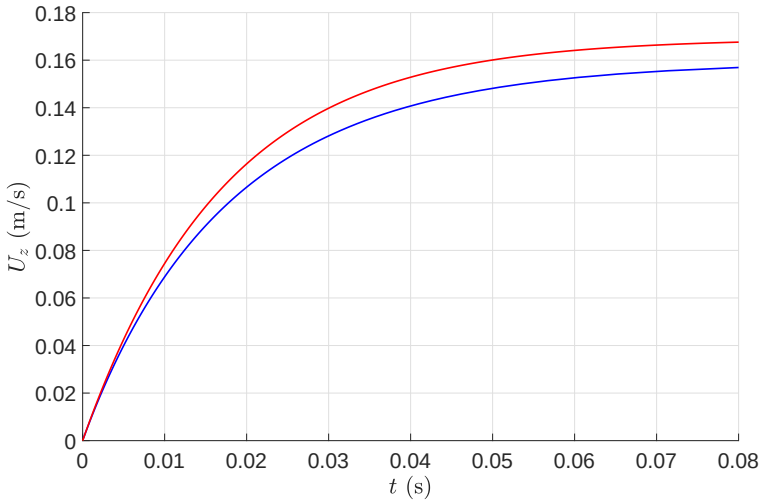


Figura 8.1: Evolución de la componente vertical de la velocidad de la esfera durante su caída. En color azul se muestran los resultados empíricos y color rojo los obtenidos con el código CAFFA3D.MBRI.

dentro del orden de los errores obtenidos en la Sec. 7.4.1). Por lo tanto, podemos concluir que ambos cálculos se encuentran en excelente concordancia, más aún si consideramos que las condiciones de borde de nuestras simulaciones son una aproximación de un medio infinito.

8.2. Análisis de la implementación computacional para la segunda ecuación cardinal

En esta sección realizamos cálculos numéricos de dos situaciones en las que se induce el movimiento de rotación pura sobre un rígido que está inmerso en un fluido viscoso, con el que interactúa. Por lo tanto, se evalúa el comportamiento del código generado para el cálculo del momento de fuerza que ejerce el fluido sobre el rígido, y el movimiento de rotación resultante que experimenta el cuerpo.

Denotamos con $\vec{X}_{CM}$ la posición del centro de masa del cuerpo y con $\vec{X}_{imb}$ a los centros de celda que se ubican en su interior. Sumando el momento de fuerza que ejerce la fuerza $\vec{F}_{imb}(\vec{X}_{imb})$, que ejerce el fluido sobre el cuerpo para forzar su movimiento, respecto a su centro de masa, se obtiene el momento

total que el fluido ejerce sobre el rígido respecto al mismo punto $\vec{M}_{CM}$:

$$\vec{M}_{CM} = \sum_{\vec{X}_{imb}} \left(\vec{X}_{imb} - \vec{X}_{CM} \right) \times \vec{F}_{imb}(\vec{X}_{imb}) \tag{8.1}$$

De esta manera se calcula el momento de fuerza debido a la interacción sólido-fluido, que condiciona el movimiento de rotación del cuerpo. En el Cap. 7 se analizó la calidad del cálculo de $\vec{F}_{imb}$ y aquí se completa la evaluación del desempeño del código al estudiar el momento de fuerza correspondiente.

El primer test que haremos corresponde al caso bidimensional, en el plano (x, z), de un cuerpo circular, de diámetro D y cuyo centro se encuentra fijo y equidistante de dos paredes paralelas e infinitas. El cuerpo se encuentra inmerso en un fluido que está confinado por estas paredes. A su vez, estas paredes se mueven con igual velocidad U_w y opuesta, ambas en la dirección z, lo que genera un flujo de corte sobre el fluido, que provoca el movimiento de rotación del cuerpo en torno a su centro.

Para nuestras simulaciones usamos los mismos parámetros del trabajo de Wan y Turek (2006) [36]. Las paredes se extienden sobre la dirección z en el intervalo $[-3.0, +3.0]$ m y su separación es 4.0 m, por lo que x varía en el intervalo $[-2.0, +2.0]$ m. El centro del cuerpo circular se ubica en $x = 0$ y $z = 0$. Para poder estudiar este caso bidimensional con el CAFFA3D.MBRI, que es de esencia tridimensional, le dimos al dominio un pequeño espesor según la dirección y, que se extiende sobre el intervalo $[-0.044, +0.044]$ m (a diferencia del trabajo de Wan y Turek, que es bidimensional). Las condiciones de borde que se aplican en esas paredes son de simetría. Las condiciones de contorno sobre los fronteras $x = -2.0$ m y $x = +2.0$ m son de pared sin deslizamiento, con velocidades $+U_w$ y $-U_w$ respectivamente. Finalmente, en las fronteras $z = \pm 3.0m$ las condiciones de borde son de periodicidad. En la Fig. 8.2 se muestra un esquema del caso de estudio.

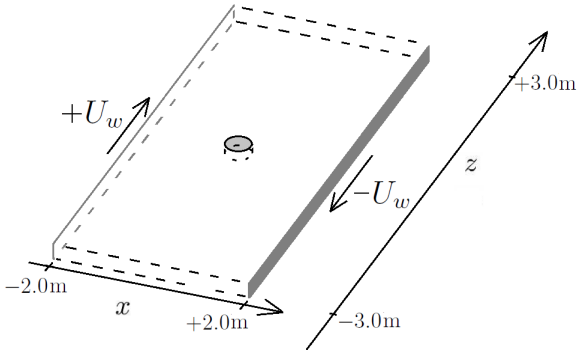


Figura 8.2: Esquema del caso de estudio de flujo de corte impuesto por paredes móviles ($x = \pm 2.0$ m).

Los parámetros que utilizamos para el fluido son densidad $\rho = 100.0$ kg/m^3 y viscosidad 1.0 Pa·s. La partícula circular es de diámetro $D = 0.4$ m, se define a partir de la fórmula analítica de su superficie (que determina al campo X_{imb}) y tiene la misma densidad que el fluido. Para el movimiento de las paredes, usamos $U_w = 0.02$ m/s. El flujo estacionario en ausencia del rígido tendría vorticidad uniforme $\omega = 2 \times U_w/4.0\text{m} = 0.01\text{s}^{-1}$.

Cuando la partícula está presente, esta gira con velocidad angular $\Omega = \omega/2$ una vez alcanzado el régimen estacionario, si D tiende a cero. En nuestro caso, el diámetro de la partícula es la décima parte de la distancia entre las paredes laterales, y esperamos obtener una velocidad angular cercana a $5.0 \times 10^{-3}\text{s}^{-1}$ en el estado estacionario.

Analizamos la independencia de malla de nuestros cálculos trabajando con tres mallas (A, B y C) de diferente refinamiento. La malla A tiene $1075 \times 23 \times 1414$ celdas según x, y y z respectivamente (paso de malla $\Delta x \approx 3.7$ mm). La malla B tiene $910 \times 20 \times 1370$ celdas ($\Delta x \approx 4.4$ mm) y la C tiene $858 \times 19 \times 1288$ celdas ($\Delta x \approx 4.6$ mm). A pesar de que el tamaño de no tener grandes variaciones del tamaño de celda para las diferentes mallas utilizadas, la diferencia entre estas mallas se hace notoria al momento de contabilizar la cantidad total de celdas que se emplea en cada caso para discretizar el mismo dominio. Esta cantidad va desde unos 21 millones para la malla C, 25 millones para B y 35 millones para A.

Como condiciones iniciales imponemos sobre el fluido un perfil lineal de velocidad según z, tomando el valor $+U_w$ ($-U_w$) en $x = -2.0$ m ($x = +2.0$ m). El cilindro se encuentra inicialmente en reposo. Durante los primeros pasos temporales se mantiene el cilindro fijo, de manera de que se establezca y asiente

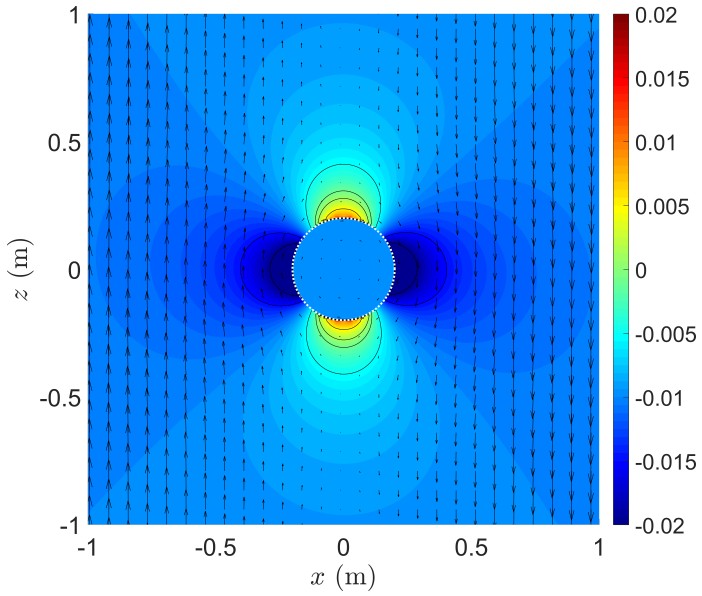


Figura 8.3: Contorno de vorticidad ω_y y campo de velocidades para la malla B en el instante $t = 28s$ (luego de haber liberado el cilindro).

el flujo de corte apropiadamente. Durante ese tiempo se calcula la fuerza y el momento que el fluido ejerce sobre el cilindro, hasta que sus valores dejan de fluctuar, y en ese momento liberamos el cilindro para que comience a moverse. En ese instante definimos $t = 0s$.

Los parámetros para el esquema numérico son $dt = 0.1$ s, $Gds = 0.9$ y el factor de sobre-relajación $\alpha = 0.1$ (tanto para la fuerza como para el momento).

En la Fig. 8.3 se muestran contornos de vorticidad con el campo de velocidades superpuesto para el instante $t = 28s$ y la malla B. Allí se puede observar el flujo de corte bien establecido y al cuerpo girando en torno a su eje.

En la Fig. 8.4 se muestra la evolución temporal de la velocidad angular del cilindro. Los resultados muestran que la velocidad angular de rotación del cilindro Ω_y, provocada por el flujo de corte en el que se encuentra inmerso, tiende al valor $\Omega/2$ cuando la malla es refinada, obteniendo una diferencia inferior al 3 %. Por lo tanto, la respuesta del CAFFA3D.MBRI junto con los módulos generados en esta tesis es satisfactoria y además se alcanzó la independencia de malla.

Esta situación de estudio es utilizada con frecuencia como método de validación estándar (*benchmark*) que evalúa el desempeño de un determinado código computacional en la resolución del movimiento de rotación de un rígido que interactúa con un fluido en el que está inmerso [37, 36, 38, 39].

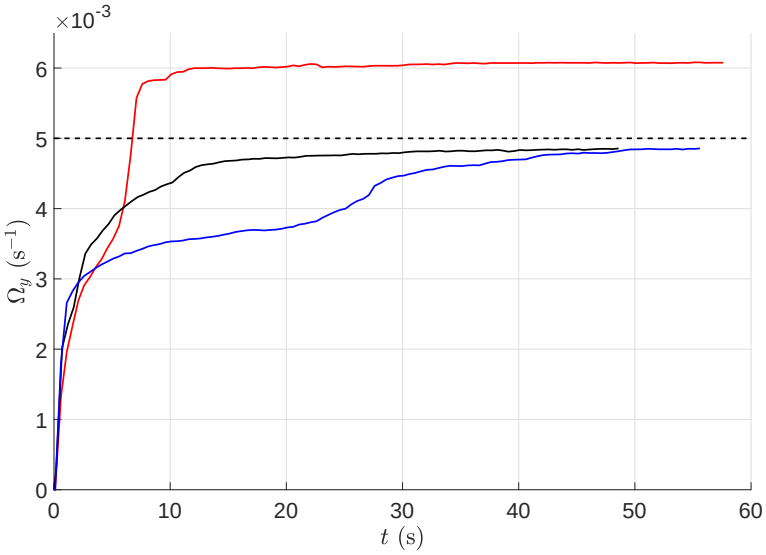


Figura 8.4: Evolución temporal de la velocidad angular del cilindro para diferentes mallas. Las referencias de colores son: negro continua para malla A, azul para malla B, rojo para malla C y negro a trazos para el valor de referencia.

El segundo test que hicimos es el que se reporta en Schwarz *et al.* (2015) [39]. Este caso consiste en una esfera de radio $r_p = 0.5$ m, con centro fijo en el origen de coordenadas y con la posibilidad de rotar. Su superficie es definida a partir de la ecuación analítica de su superficie (X_{imb}) y se encuentra inmersa en un fluido viscoso que está confinado entre dos placas paralelas, ubicadas en $y = \pm 3.2$ m. Las otras fronteras del dominio se encuentran en $x = \pm 3.2$ m y $z = \pm 3.2$ m y las condiciones de borde para ellas son de periodicidad. En la Fig. 8.5 se muestra un esquema de la situación física considerada.

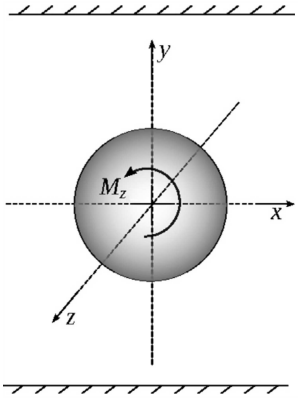


Figura 8.5: Esquema del problema de estudio, donde la esfera se ubica entre dos paredes paralelas en $y = \pm 3.2$ m, y se le aplica un momento de fuerza constante en la dirección z, M_z. Figura adaptada de Schwarz *et al.* (2015) [39].

La esfera y el fluido se consideran de igual densidad $\rho = 1.0$ kg/m^3 y la viscosidad dinámica del fluido es $\mu = 0.032$ Pa $\cdot$ s. En el instante inicial, el fluido y la esfera se encuentran en reposo y se aplica un momento constante $M_z = 1.0$ N $\cdot$ m en la dirección z, que se mantiene a lo largo del tiempo (Fig. 8.5).

El momento aplicado hace que la velocidad angular de la esfera en la misma dirección comience a crecer, pero no de manera uniforme, como sucedería en ausencia del fluido, debido a que el fluido viscoso ejerce un momento que se opone a la rotación de la esfera.

Las simulaciones se repiten con mallas de diferente refinamiento, para comparar los resultados y comprobar la independencia de malla. Las mallas utilizadas en el trabajo de Schwarz tienen el mismo paso de malla h en las tres direcciones, con los valores $d_p/h = 10$, 20, 40 y 80, siendo d_p el diámetro de la esfera (por lo que los respectivos pasos de malla son $\Delta x = 10$, 5, 2.5 y 1.25 cm). El paso temporal se elige como $dt = 1.0 \times 10^{-3}$ s para la malla $d_p/h = 20$. En los demás casos dt se ajusta de manera que dt/h sea constante. En nuestras simulaciones, la malla más fina es $d_p/h = 40$.

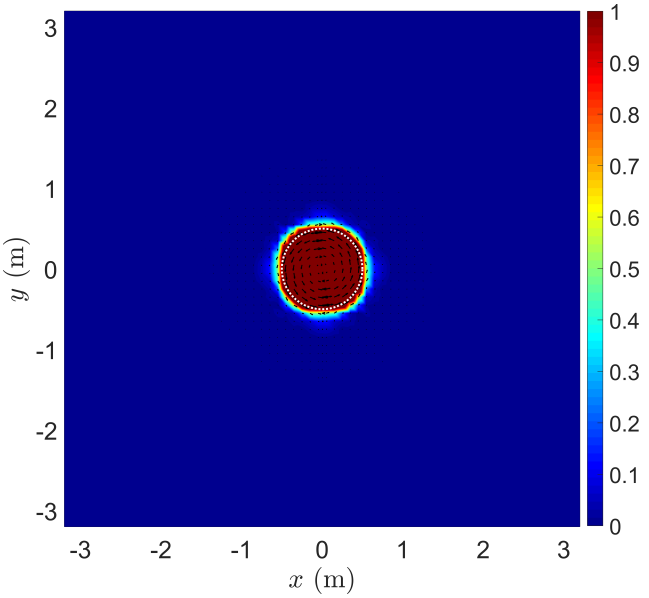


Figura 8.6: Diagrama de colores de la velocidad angular adimensioanda Ω_p obtenido con nuestras simulaciones para el instante $t = 0.25$ s y la malla $d_p/h = 40$.

La velocidad angular y el tiempo se adimensionalizaron con el radio de la esfera y la velocidad de referencia $u_{ref} = r_p\sqrt{\dot{\Omega}_s}$, siendo $\dot{\Omega}_s = M_z I_p$, con $M_z = 1.0$ N $\cdot$ m el momento externo aplicado y I_p el momento de inercia de

la esfera respecto a su centro de masa. En la Fig. 8.6 se muestra el campo de velocidad angular con el campo de velocidades superpuesto, para la malla $d_p/h = 40$ en el instante de tiempo $t = 0.25$ s. Como se puede observar, el movimiento del fluido que circunda al cuerpo se hace imperceptible a cortas distancias de este.

Los resultados de nuestras simulaciones para la evolución de la velocidad angular adimensionada de la esfera (Ω_p) en función del tiempo adimensionado se muestran en la Fig. 8.7. Observamos que las variaciones en los resultados al cambiar de malla son más pronunciadas para el trabajo de Schwarz que los obtenidos con el CAFFA3D.MBRI.

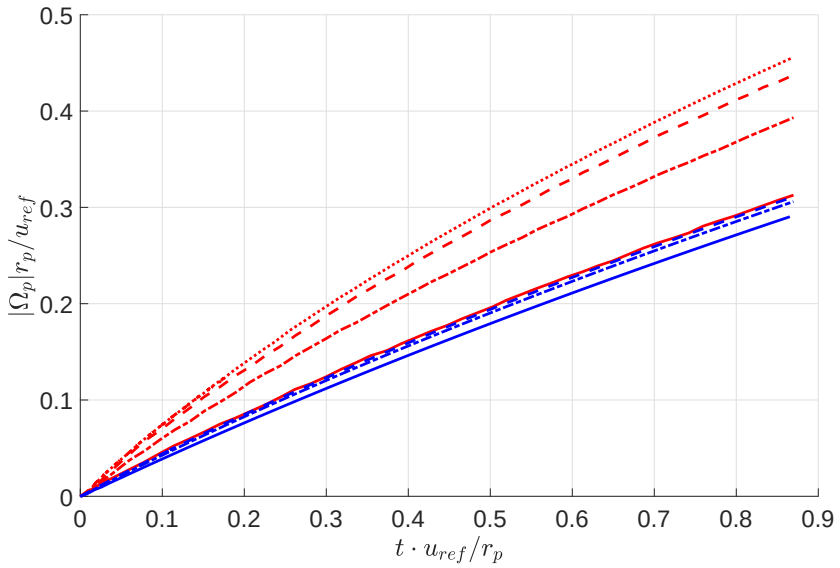


Figura 8.7: Resultados para la velocidad angular adimensionada de la esfera obtenidos en esta tesis (curvas en color azul) y comparación con los resultados de Schwarz *et al.* (2015) [39] (curvas en color rojo), para los valores $d_P/h = 80$ (línea punteada; solo para el trabajo de Schwarz), $d_P/h = 40$ (trazo a rayas), $d_P/h = 20$ (trazo punto-raya) y $d_P/h = 10$ (trazo continuo).

Se observa en la Fig. 8.7 que los resultados del CAFFA3D.MBRI para la malla más fina considerada se aproximan a los resultados que Schwarz reporta para el caso de la malla más gruesa. Por lo tanto, si bien logramos reproducir las características principales de la solución obtenida por Schwarz, los valores no coinciden frente a mallas de iguales características.

Sin embargo, en nuestra búsqueda bibliográfica no encontramos otro trabajo que reprodujera el mismo análisis, ya sea numérico, experimental o analítico, a diferencia de lo sucedido Wan y Turek (2006) [36]. Por lo tanto, lo que po-

demos concluir con certeza es que la solución que obtuvimos para el caso de estudio de Schwarz tiene el mismo comportamiento cualitativo, aunque los valores cuantitativos no coinciden, pero para poder considerar este caso de estudio como *benchmark* es necesario analizar su solución con diferentes modelos numéricos, idealmente recurriendo también a la experimentación.

Un aspecto que se debe resaltar es que el cálculo del momento que ejerce el fluido sobre el cuerpo en rotación es extremadamente sensible al cálculo de los gradientes de velocidad sobre su superficie (esfuerzos de corte). Por esta razón, el trabajo que nos hemos planteado a futuro incluye el análisis en profundidad de la manera en que el modelo CAFFA3D.MBRI calcula los gradientes, especialmente en la cercanía de superficies de condiciones de borde inmersas.

8.3. Modelado de la caída de un cuerpo rígido en un fluido viscoso

Esta sección se estudia el desempeño del código cuando se combina el movimiento de traslación y rotación. El análisis se divide en dos partes. En la primera parte se analiza el caso bidimensional de la caída de un cuerpo circular en un fluido viscoso, y en la segunda se analiza el caso tridimensional de la caída de una esfera.

8.3.1. Evaluación de resultados 2D

Uno de los casos típicos de análisis del desempeño de un determinado código dentro de la MFC, referenciado con frecuencia en la bibliografía de la temática, corresponde al caso bidimensional de la caída de una partícula circular inmersa en un fluido viscoso, que cae bajo la acción de la gravedad. En particular, trabajos como el de Wu y Shu (2010) [40] y el de Wang (2014) [41] hacen referencia al estudio realizado por Wan y Turek (2006) [36], que es el que reproducimos en esta sección.

Consideramos una partícula de diámetro $D = 2.5$ mm y densidad $\rho_s = 1250$ kg/m^3, inmersa en un fluido de densidad $\rho = 1000$ kg/m^3 y viscosidad $\mu = 0.01$ Pa $\cdot$ s, que se encuentra confinado en un dominio rectangular de 2.0 cm de ancho (dirección horizontal x) y 6.0 cm de altura (dirección z). Las

condiciones de frontera son de pared rígida (no deslizamiento) en todos los bordes.

Inicialmente el fluido y la partícula se encuentran en reposo, y la esfera se suelta desde una altura de 4.0 cm y sobre la línea vertical media del dominio ($x = 0$).

Al igual que en la Sec. 8.2, debido a la naturaleza tridimensional del CAFFA3D.MBRI, en nuestras simulaciones utilizamos un dominio prismático con un pequeño espesor en la dirección y. El dominio computacional que usamos tiene un espesor de 0.1 mm en esa dirección. Las condiciones de frontera en la cara frontal y en la trasera (planos $y = \pm 0.1$ mm) son de simetría, de manera de conseguir independencia de nuestros resultados en esa dirección. El cuerpo rígido, que se define a partir de su ecuación analítica (X_{imb}), es de forma cilíndrica, con un largo que ocupa todo el espesor del dominio. La cantidad de celdas con que discretizamos al dominio es $300 \times 3 \times 900$, según las direcciones x, y y z respectivamente (tamaño de celda $\Delta x \approx 0.033$ mm).

Agregamos una malla anidada, centrada en el centro de la partícula, de dimensiones $(8.0 \times 0.2 \times 8.0)$ mm, que se traslada de manera solidaria con la partícula. Las paredes de esta malla ($y = \pm 0.1$ mm) son coincidentes con las del dominio de fondo y también tienen condiciones de frontera de simetría. La malla anidada tiene $200 \times 5 \times 200$ celdas según x, y y z respectivamente ($\Delta x \approx 0.02$ mm), y el solapamiento es $\delta = 0.1$ mm (para la técnica de *nesting*).

En nuestras simulaciones utilizamos un paso temporal de $dt = 5.0 \times 10^{-4}$ s y se realizan 50 iteraciones externas dentro de cada paso. El factor de *blending* es $Gds = 0.5$ y el factor de sobre-relajación tanto para la fuerza como para el momento que ejerce el fluido sobre la partícula es $\alpha = 0.1$.

Dado que el objetivo de esta tesis es modelar la interacción sólido-fluido y no de interacción sólido-sólido, optamos por modelar esta segunda situación con un modelo simple. Este aspecto no será analizado en profundidad ya que resolver con precisión la interacción entre cuerpos rígidos o con las paredes del recipiente en el que se mueven, requiere del análisis de propiedades elásticas de los cuerpos, porosidad o fenómenos de lubricación, que escapa del objetivo de esta tesis.

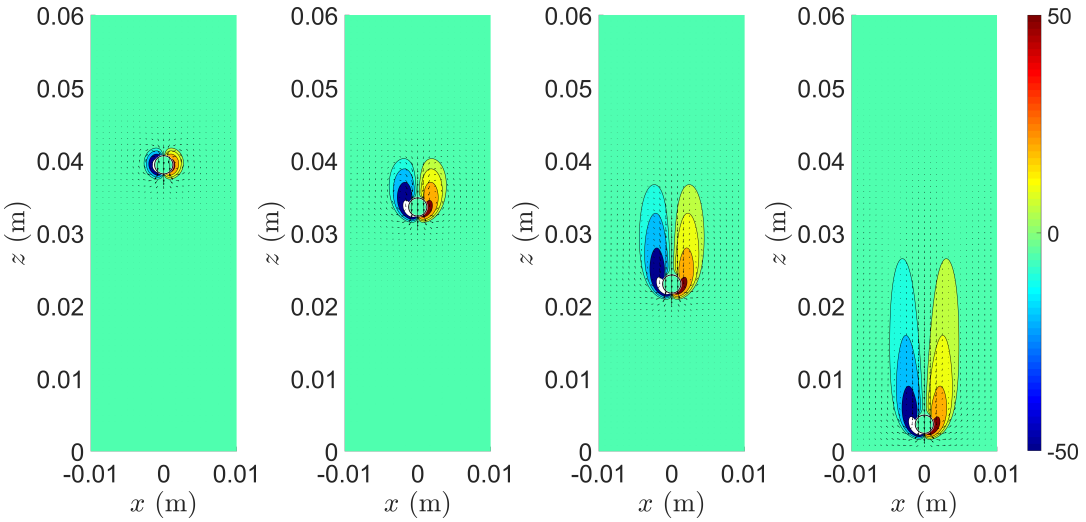
En esta sección consideramos la interacción entre una esfera de radio R, cuyo centro se ecuentra en la posición $\vec{X}$, y una pared rígida del recipiente, inspirándonos en el trabajo de Wan y Turek (2006) [36]. Modelamos la fuerza

que la esfera experimenta al impactar a la pared según la siguiente expresión:

$$\vec{F}^W = \begin{cases} 0 & ,\text{si } d_W > R + \lambda_1 \cdot \xi \\ \frac{1}{\epsilon_W}\left(\vec{X} - \vec{X}_W\right)(R + \lambda_1 \cdot \xi - d_W)^2 & ,\text{si } R + \lambda_2 \cdot \xi < d_W \leq R + \lambda_1 \cdot \xi \\ \frac{1}{\epsilon'_W}\left(\vec{X} - \vec{X}_W\right)(R + \lambda_2 \cdot \xi - d_W) & ,\text{si } d_W \leq R + \lambda_2 \cdot \xi \end{cases}, \tag{8.2}$$

donde $\vec{X}_W$ es el vector posición del punto de la pared que se encuentra más cercano a $\vec{X}$, d_W es la distancia entre el centro de la esfera y la superficie de la pared ($d_W = |\vec{X} - \vec{X}_W|$), $\lambda_1 > \lambda_2 > 0$ son factores reales que marcan los umbrales de influencia de las diferentes expresiones de la fuerza $\vec{F}_W$, ξ es la longitud característica de la celdas de discretización del dominio numérico, y ϵ_W y ϵ'_W son constantes de rigidez de las superficies.

En los cálculos que presentamos utilizamos $\lambda_1 = 5.0$, $\lambda_2 = 2.5$, $\xi \approx 6.7 \times 10^{-5}$ m y $\epsilon_W = \epsilon'_W = 7.5 \times 10^{-3}$. A diferencia del trabajo de Wan y Turek, donde utilizan $\lambda_1 = 1$ y $\lambda_2 = 0$, nosotros utilizamos una mayor zona de seguridad, que previene la superposición entre los cuerpos. En la Fig. 8.8 se muestran los contornos de vorticidad sobre el plano $y = 0$ para diferentes instantes de tiempo, y se superponen los campos de velocidad.

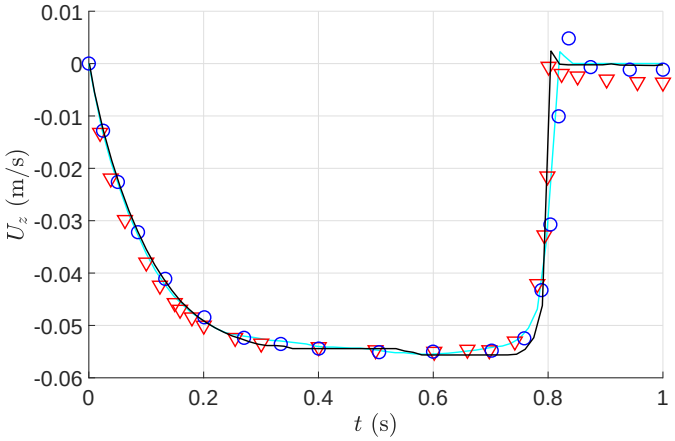


(a) $t = 0.05s$ (b) $t = 0.20s$ (c) $t = 0.40s$ (d) $t = 0.75s$

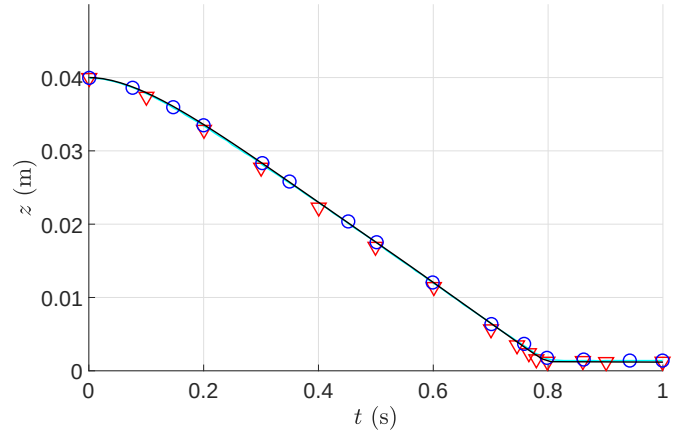
Figura 8.8: Contornos de la componente de vorticidad ω_y (s^{-1}) y campos de velocidades sobre en el plano vertical central $y = 0$, para diferentes instantes de tiempo.

En la Fig. 8.9(a) se muestran los resultados obtenidos para la evolución de la velocidad vertical de la partícula en función del tiempo, y en la Fig. 8.9(b)

se hace lo mismo para la evolución de la altura de la partícula. En ambos casos se comparan las curvas con las reportadas en las referencias bibliográficas mencionadas. Como se puede observar, los resultados se encuentran en excelente concordancia con los documentados por otros autores. Mencionamos que la componente transversal de la velocidad toma valores que son varios órdenes de magnitud inferiores a los de la componente vertical, y no la incluimos en nuestro análisis.



(a)



(b)

Figura 8.9: Resultados obtenidos en nuestras simulaciones y comparación con citas bibliográficas: (a) evolución temporal de la componente vertical de la velocidad de la partícula durante su caída; (b) evolución de la altura del centro de la partícula. Las referencias de las curvas son: triángulos, Wan y Turek (2006) [36]; círculos, Wu y Shu (2010) [40]; línea continua celeste, Wang (2014) [41]; línea continua negra, nuestras simulaciones.

8.4. Evaluación de resultados 3D

Como último nivel de evaluación del paquete numérico desarrollado, se reproduce el caso tridimensional de la caída, bajo la acción de la gravedad, de una esfera rígida inmersa en un fluido. El trabajo de referencia es el de Ten Cate *et al.* (2001) [42], que consta de simulaciones computacionales y de mediciones experimentales, para su validación.

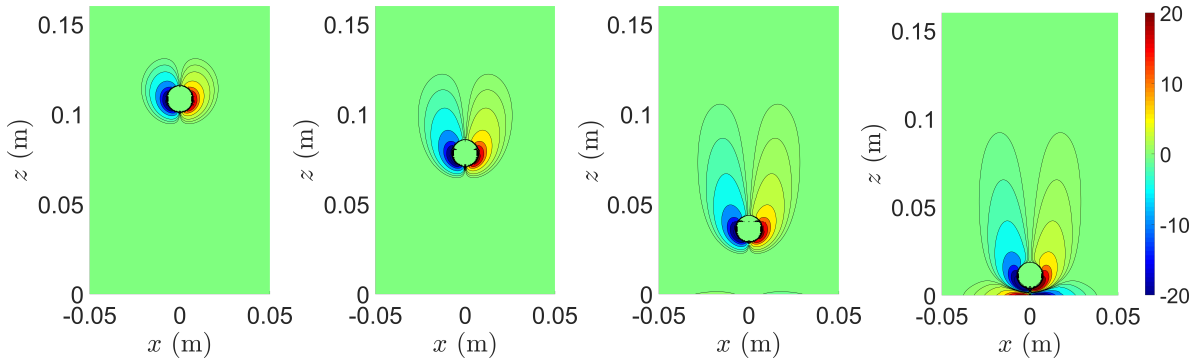
El montaje utilizado en el trabajo de Ten Cate consiste en un contenedor prismático de dimensiones 100×100 mm de base por 160 mm de altura. La esfera es de nylon, con diámetro $d_p = 15$ mm y densidad $\rho_p = 1120$ kg/m^3. Se utilizaron fluidos de diferentes viscosidades, obteniendo resultados para $Re =$ 1.5, 4.1, 11.6 y 31.9. En el instante inicial, el fluido se encuentra en reposo y la esfera se deja caer desde una altura de 120 mm y sobre el eje central del contenedor. Los campos de velocidades fueron medidos con la técnica de velocimetría por imágenes digitales de partículas (DPIV[1]) [43].

En cuanto al enfoque numérico del trabajo de Ten Cate, el esquema utilizado para resolver la dinámica del fluido es *lattice-Boltzmann*, siguiendo el esquema de Eggels y Somers (1995) [44], mientras que el movimiento de rotación de la esfera y las paredes del recipiente allí fueron impuestos bajo la técnica de campo de fuerzas adaptativo [45]. Los resultados numéricos reportados por Ten Cate se encuentran en excelente concordancia con los obtenidos en sus experimentos.

Los resultados documentados en el trabajo de Ten Cate han servido como referencia para validar el código computacional de numerosos autores (*benchmark*). Aquí también incluimos, para ampliar los puntos de comparación, los resultados obtenidos recientemente por Khalili *et al.* (2017) [46]. En dicho trabajo se utiliza una implementación del método de *lattice-Boltzman* combinado con el método de perfiles suavizados (SPM[2]), desarrollado por Jaffari *et al.* (2011) [47].

De la variedad de cálculos documentados en Ten Cate elegimos, de manera arbitraria, el caso con $Re = 11.6$. Las propiedades del fluido son $\rho_f = 962$ kg/m^3 y $\mu = 113$ mPa $\cdot$ s en este caso. El dominio computacional coincide con el del recipiente, extendiéndose sobre $x, y = [-50, +50]$ mm y $z = [0, 160]$ mm, siendo (x, y) el plano horizontal. La discretización del do-

[1] De sus siglas en inglés *Digital Particle Image Velocimetry*.
[2] De sus siglas en inglés *Smoothed Profile Method*.



(a) $t = 0.3$ s (b) $t = 0.7$ s (c) $t = 1.2$ s (d) $t = 1.5$ s

Figura 8.10: Componente de vorticidad ω_y (s^{-1}) sobre el plano vertical central $y = 0$, durante la caída (tridimensional) de la esfera inmersa en un fluido, para diferentes instantes de tiempo.

minio se hizo usando $201 \times 210 \times 336$ celdas según x, y y z respectivamente ($\Delta x \approx 0.48$ mm). Además, se utiliza una malla anidada que contiene a la esfera en su centro y que se traslada siguiendo el movimiento de esta. La malla anidada es cúbica, de 35 mm de lado y con 100 celdas de discretización en cada dirección ($\Delta x \approx 0.35$ mm).

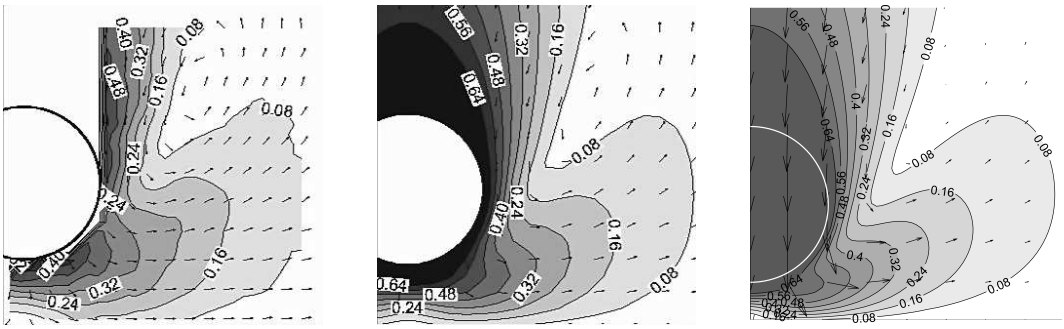
Las condiciones de frontera son todas de pared sin deslizamiento y las condiciones iniciales son de fluido y esfera en reposo, partiendo esta de una altura de 120 mm y sobre el eje del recipiente. El paso temporal que usamos en nuestras simulaciones es $dt = 5.0 \times 10^{-4}$ s, realizamos 50 iteraciones externas por cada paso temporal y el factor de *blending* es $Gds = 0.5$. El factor de sobrerelajación que usamos tanto para la fuerza como para el momento que ejerce el fluido sobre cada cuerpo es $\alpha = 0.1$.

En este caso, luego de algunos ensayos los parámetros que usamos para la fuerza choque entre la esfera y las paredes del recipiente (Ec. 8.2) son: $\epsilon_W = \epsilon'_W = 5.0 \times 10^{-5}$, $\xi = 0.476$ mm (tamaño de celda), $\lambda_1 = 2.5$ y $\lambda_2 = 0.5$.

En la Fig. 8.10 se muestran los contornos de la componente ω_y sobre el plano vertical $y = 0$, que pasa por el centro del dominio, para cuatro instantes de tiempo.

En la Fig. 8.11 comparamos los contornos del módulo de velocidad, adimensionado por la velocidad límite de caída, reportados por Ten Cate con los obtenidos con el CAFFA3D.MBRI, para el instante de tiempo $t = 1.5s$. En ese momento, la esfera se encuentra próxima a impactar la pared inferior del recipiente. Como se puede observar, existe una excelente concordancia, tan-

to cualitativa como cuantitativa, entre nuestros resultados (Fig. 8.11(c)) y los resultados numéricos (Fig. 8.11(b)) y experimentales (Fig. 8.11(a)) documentados por Ten Cate.

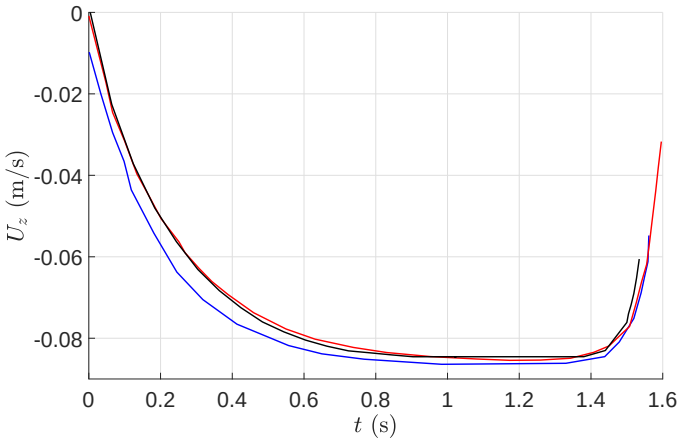


(a) (b) (c)

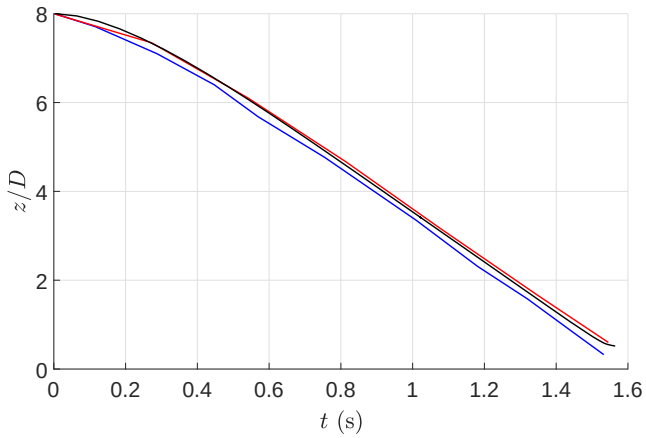
Figura 8.11: Contornos de nivel del módulo de la velocidad normalizado por el valor de u_{lim} en el instante $t = 1.5s$ y en el plano vertical que pasa por el origen de coordenadas. En (a) se muestran los resultados experimentales obtenidos en Ten Cate *et al.* del año 2001 [42] y en (b) los resultados numéricos documentados en la misma referencia. En (c) se muestran los resultados obtenidos en esta tesis, en el intervalo $x, z = [0.0, +3.0]$ cm.

En la Fig. 8.12(a) se grafica la evolución temporal de la componente vertical de la velocidad de caída de la esfera. A partir de estos resultados se obtiene el valor de velocidad límite de caída de la esfera, que resulta ser $u_{lim} \approx 9.1$ cm/s, y que se utiliza en la adimensionalización de la Fig. 8.11(c). Por otro lado, en la Fig. 8.12(b) se grafica la altura del centro de la esfera en función del tiempo. En ambas figuras se grafican también los resultados obtenidos por Ten Cate y por Khalili, para analizar la correspondencia entre los diferentes cálculos. Como se puede observar, las tres curvas muestran el mismo comportamiento, tanto para la posición como para la velocidad. En particular, los resultados obtenidos con el CAFFA3D.MBRI son prácticamente coincidentes con los recientemente reportados por Khalili.

A modo de cierre de este capítulo, a partir del análisis realizado en las diferentes secciones que lo componen, podemos concluir que nuestro modelo numérico se encuentra validado. Los próximos capítulos se orientan a presentar potenciales aplicaciones del modelo desarrollado en esta tesis.



(a)



(b)

Figura 8.12: Resultados obtenidos en nuestras simulaciones y comparación con citas bibliográficas: (a) evolución temporal de la componente vertical de la velocidad de la partícula durante su caída; (b) evolución de la altura del centro de la partícula, adimensionado por el diámetro de la esfera. Las referencias de colores son: azul, resultados numéricos reportados en Ten Cate *et al.* (2001) [42]; rojo, resultados reportados en Khalili *et al.* (2017) [46]; negro, resultados obtenidos con el CAFFA3D.MBRI.

Capítulo 9

Simulación de la interacción entre dos cuerpos rígidos en sedimento

El sedimento de partículas en fluidos viscosos se manifiesta en una variedad de fenómenos naturales e industriales, como la fluidización, la industria petrolera y papelera, flujos sanguíneos y la dispersión de contaminantes en ríos, mares o en la atmósfera. Su análisis ha atraído la atención de diversos trabajos teóricos y experimentales, y en las últimas décadas se han desarrollado una variedad de métodos numéricos para estudiar sistemas formados por fluidos y partículas.

En determinados flujos, conocer los mecanismos de las interacciones partícula-partícula y partícula-fluido es fundamental para predecir con precisión el comportamiento de estos flujos.

El problema más simple que permite estudiar este tipo de interacciones es el sedimento bidimensional de dos círculos de igual tamaño, que en el trabajo Fortes *et al.* (1987) [48] se analiza de manera experimental. Las observaciones muestran que durante la caída de dos partículas, una detrás de la otra, en un fluido Newtoniano en un canal vertical, la partícula trasera experimenta interacciones no-lineales con la estela de la partícula que cae primero.

Para $Re > 1$, la partícula trasera es «arrastrada» dentro de la estela de baja presión que genera la partícula que cayó primero (*drafting*), lo que produce que luego se pongan momentáneamente en contacto entre sí (*kissing*) hasta que se tambalean (*tumbling*), para romper el estado de equilibrio inestable en el que

se encontraban en contacto entre sí. Luego se vuelven a separar, intercambiando posiciones, en el sentido de que la esfera que se ubicaba inicialmente por encima, ahora se encuentra por debajo. Este proceso es conocido como mecanismo de *Drafting, Kissing and Tumbling* (DKT) [49, 50].

Para poder entender en profundidad los mecanismos que regulan el fenómeno DKT es necesario conocer la evolución temporal de las fuerzas hidrodinámicas existentes. Joseph *et al.* (1994) [51] sugirió que, durante el proceso de sedimentación de un cuerpo (como podemos considerar al sistema formado por las dos esferas en contacto), la dirección en la que el cuerpo es más largo tiende a orientarse de manera perpendicular a la corriente en la que se mueve (*tumbling*), para alcanzar una configuración estable. A pesar de los esfuerzos realizados en diferentes investigaciones para poder explicar el fenómeno de *tumbling*, aún sigue sin esclarecerse el comportamiento de las fuerzas hidrodinámicas durante dicha interacción.

En este capítulo se evalúa el desempeño computacional del CAFFA3D.MBRI al resolver numéricamente el caso 2D y 3D. En el primer caso se analiza la caída de dos círculos iguales inmersos en un fluido newtoniano y se comparan los resultados con el trabajo de Jafari *et al.* (2011) [47], cuyos cálculos se encuentran además en excelente concordancia con el de otros autores [36, 41]. Por otro lado, en el caso tridimensional se estudia el caso de la caída de dos esferas iguales, también inmersas en un fluido newtoniano, y se comparan los resultados con los reportados en Dash *et al.* (2014) [52], que consta de un estudio numérico y experimental de la misma situación, mostrando la validez de sus simulaciones.

9.1. Fuerza de interacción entre las partículas en sedimento

Resolver con precisión la interacción entre cuerpos rígidos y con las paredes del recipiente que confina al fluido en el que se mueven, requiere del análisis de propiedades elásticas de los cuerpos, porosidad o fenómenos de lubricación. Como el objetivo de esta tesis es modelar la interacción sólido-fluido y no de interacción sólido-sólido, optamos por resolver esta segunda situación con un modelo simple, pero que condujo a excelentes resultados una vez ajustados los parámetros de dicho modelo, sin profundizar sobre sus posibles limitaciones.

Consideremos la interacción entre dos esferas (círculos en el caso bidimensional) i y j, de radios R_i y R_j respectivamente. Para modelar la fuerza de impacto entre ellas, al igual que en la Sec. 8.3.1, nos inspiramos en el trabajo de Wan y Turek (2006) [36], cuyo modelo también fue utilizado por Wang *et al.* (2014) [41]. Modelamos la fuerza que la esfera j ejerce sobre la partícula i ($i \neq j$) a través de la siguiente expresión:

$$\vec{F}_{i,j}^{P} = \begin{cases} 0 & \text{, si } d_{i,j} > R_T + \lambda_1^P \cdot \xi \\ \frac{1}{\epsilon_P}\left(\vec{X}_i - \vec{X}_j\right)\left(R_T + \lambda_1^P \cdot \xi - d_{i,j}\right)^2 & \text{, si } R_T + \lambda_2^P \cdot \xi < d_{i,j} \leq R_T + \lambda_1^P \cdot \xi \\ \frac{1}{\epsilon'_P}\left(\vec{X}_i - \vec{X}_j\right)\left(R_T + \lambda_2^P \cdot \xi - d_{i,j}\right) & \text{, si } d_{i,j} \leq R_T + \lambda_2^P \cdot \xi \end{cases}, \tag{9.1}$$

donde, en nuestro caso $(i,j) = (1,2)$ o $(i,j) = (2,1)$, $R_T = R_1 + R_2$, $\vec{X}_i$ y $\vec{X}_j$ son las coordenadas de los centros de las esferas i y j respectivamente, $d_{i,j} = |\vec{X}_i - \vec{X}_j|$, $\lambda_1^P > \lambda_2^P > 0$ son factores reales que marcan los umbrales de influencia de las diferentes expresiones para $\vec{F}_{i,j}^{P}$, ξ es la longitud característica de la celdas de discretización del dominio numérico, y ϵ_P y ϵ'_P son parámetros de rigidez de los cuerpos [53], para los cuales no existe ninguna teoría rigurosa que determine sus valores. Si bien existen estrategias más precisas para modelar la interacción entre partículas [54, 55], estas elevan significativamente el costo computacional [56].

Físicamente, ξ contempla el caso en que las esferas no son lisas, actuando como factor de seguridad para que las esferas no se acerquen más allá del tamaño de sus «asperezas». En el caso que las partículas estén cerca de superponerse (lo cual puede darse simplemente por errores de truncamiento), la fuerza de repulsión cambia su expresión, debiendo ajustar el correspondiente factor de rigidez ϵ'_P.

Si bien la estrategia aquí descrita es capaz de modelar la interacción entre las esferas, y es la forma usual de resolverla numéricamente, nos hemos propuesto como trabajo futuro la formulación de un método que ajuste automáticamente los parámetros ϵ_P y ϵ'_P.

9.2. Simulación 2D de la caída de dos discos

En el trabajo de Jafari *et al.* (2011) [47] se analiza el caso bidimensional de la caída de dos círculos, ubicados inicialmente sobre la misma línea vertical, en un fluido newtoniano. Su trabajo ha sido referencia de estudios numéricos

sobre la temática [41, 57, 28], como *benchmark* para validación de los códigos correspondientes. El método numérico que implementa Jafari, y que predomina en la literatura relacionada, es *lattice-Boltzmann*. Aquí comparamos sus resultados con los obtenidos con el CAFFA3D.MBRI.

El problema consiste en un dominio rectangular de 2.0 cm de ancho y 8.0 cm de alto (dirección de la caída), que contiene un fluido de densidad 1000.0 kg/m^3 y viscosidad dinámica $\mu = 1.0$ mPa$\cdot$s. El dominio se extiende en el rango $[-1.0, +1.0]$ cm en la dirección horizontal x, y en el rango $[0.0, +8.0]$ cm según la coordenada vertical z. Inmersos en el fluido se encuentran dos discos rígidos idénticos, de diámetro $D = 2.0$ mm y densidad 1010.0 kg/m^3, inicialmente con sus centros en las posiciones $(x_1, z_1) = (0.0, +7.2)$ cm y $(x_2, z_2) = (0.0, +6.8)$ cm. Las condiciones de frontera son de pared sin deslizamientos en las cuatro fronteras e inicialmente el fluido se encuentra en reposo, al igual que los discos.

Para reproducir estos cálculos con el CAFFA3D.MBRI, consideramos un pequeño espesor que se extiende en el rango $[-6.0, +6.0] \times 10^{-3}$ cm en la dimensión y. Asimismo definimos a las partículas como cilíndricas, con el mismo espesor que el dominio y con su eje según la dirección y. Las condiciones de frontera en las nuevas fronteras son de simetría, eliminando los esfuerzos de corte allí.

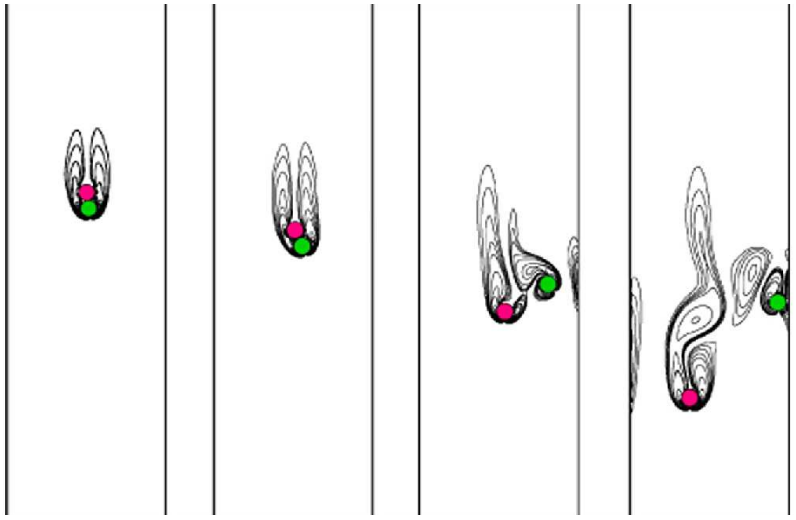
El dominio se discretiza con $500 \times 3 \times 2000$ puntos según las direcciones x, y y z respectivamente (paso de malla $\Delta x \approx 0.04$ mm). Además, agregamos una malla anidada que se mueve con la componente vertical del centro de masa del sistema formado por ambos cilindros y que se extiende inicialmente en el rango $[+6.0, +8.0]$ cm según z y ocupa todo el ancho (2.0 cm) y profundidad del dominio (12.0×10^{-3} cm). La cantidad de puntos de la malla anidada son $1000 \times 6 \times 1000$ según (x, y, z) ($\Delta x \approx 0.02$ mm).

El paso temporal que usamos para las simulaciones que presentamos es $dt = 5.0 \times 10^{-3}$ s, se realizan 50 iteraciones externas por cada paso temporal, y el factor de *blending* es $Gds = 0.9$. El factor de sobre-relajación para el cálculo la fuerza y del momento que ejerce el fluido sobre cada cuerpo es $\alpha = 0.1$.

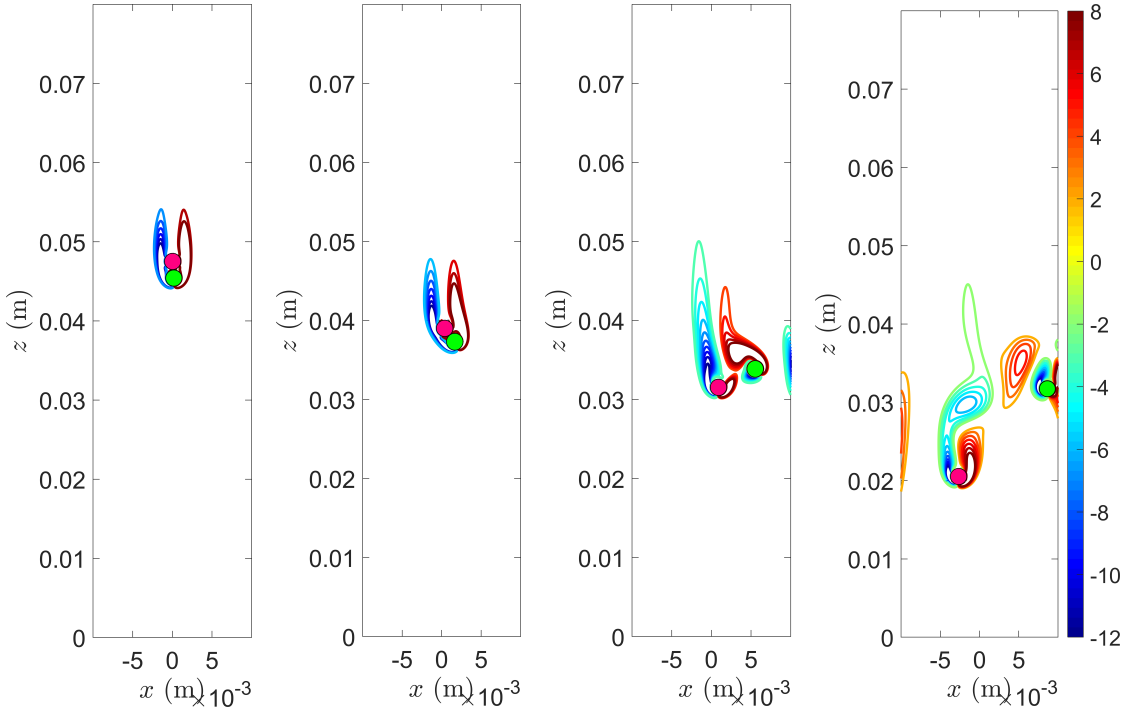
Para la fuerza de interacción entre las partículas, usamos los siguientes parámetros definidos según la Ec. 9.1: $\xi = 4.0 \times 10^{-5}$ m, $\lambda_1^P = 2.5$, $\lambda_2^P = 0.5$ y $\epsilon_P = \epsilon'_P = 1.0 \times 10^{-4}$ m^2/N.

Las fuerzas de interacción entre los cilindros y las paredes fueron calculadas a partir del modelo de la Ec. 8.2, usando para los correspondientes parámetros

los valores: $\xi = 4.0 \times 10^{-5}$ m, $\lambda_1 = 2.5$, $\lambda_2 = 0.5$ y $\epsilon_W = 5.0 \times 10^{-5}$ m^2/N.



(a) De izquierda a derecha: $t = 1.5$, 1.8, 2.5 y 3.5 s

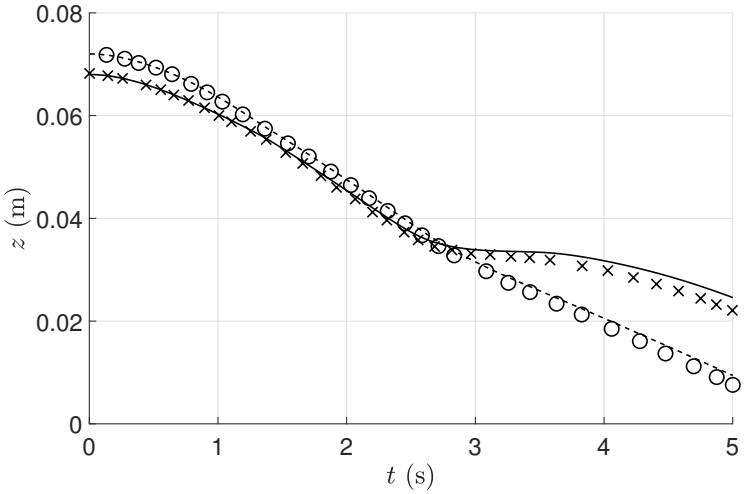


(b) $t = 1.5s$ (c) $t = 2.0s$ (d) $t = 2.5s$ (e) $t = 3.5s$

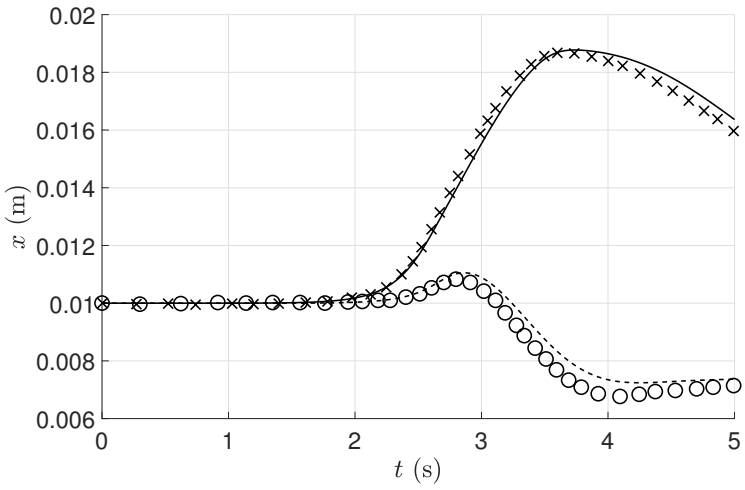
Figura 9.1: Contornos de vorticidad ω_y (s^{-1}), para diferentes instantes de tiempo. En color fucsia (verde) se señala al disco que se encuentra inicialmente por encima (por debajo). (a) Contornos de vorticidad reportados en Wang *et al.* (2014) [41]. No se especifican valores de los contornos en la referencia. (b-e) Resultados de nuestras simulaciones.

En la Fig. 9.1 se muestran contornos de vorticidad para diferentes instantes

de tiempo obtenidos en nuestras simulaciones y se comparan con los reportados en el trabajo de referencia de Wang *et al.* (2014) [41], observando una excelente concordancia entre ellos. En la Fig. 9.1(b) los discos se encuentran finalizando la etapa de *drafting* y comienzan a acelerarse hasta que el disco superior alcanza al inferior, que es cuando se da el *kissing*. La Fig. 9.1(c) corresponde a la etapa de *tumbling* y en las Figs. 9.1(d) y 9.1(e) el disco que inicialmente se encuentra por encima pasa a ubicarse por debajo y los discos separan.



(a)



(b)

Figura 9.2: Resultados obtenidos en nuestras simulaciones y comparación con citas bibliográficas: en (a) la evolución de la coordenada z de los centros de los discos durante la caída y en (b) la evolución de las coordenadas x. En línea continua (a trazos) se muestra la posición de la esfera inferior (superior) obtenida en esta tesis. Con círculos (cruces) se grafica la posición del círculo superior (inferior) en función del tiempo documentada en Jafari *et al.* (2011) [47].

La evolución completa de la posición de ambos cuerpos en función del tiempo se muestra en la Fig. 9.2. Se comparan los resultados tanto para $z(t)$ (en la Fig. 9.2(a)), como para $x(t)$ (en la Fig. 9.2(b)). En trazo continuo se grafican los resultados obtenidos en esta tesis y en asteriscos los resultados documentados en Jafari *et al.* (2011) [47]. Ambas series de registros se encuentran en notoria concordancia. Leves desviaciones de las curvas se deben posiblemente a la elección de los parámetros que definen a las fuerzas de interacción disco-disco y disco-pared.

Finalmente, analizamos la evolución temporal de la distancia entre las superficies de las esferas, definida por:

$$d_r = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (z_1 - z_2)^2} - D, \tag{9.2}$$

que graficamos en la Fig. 9.3.

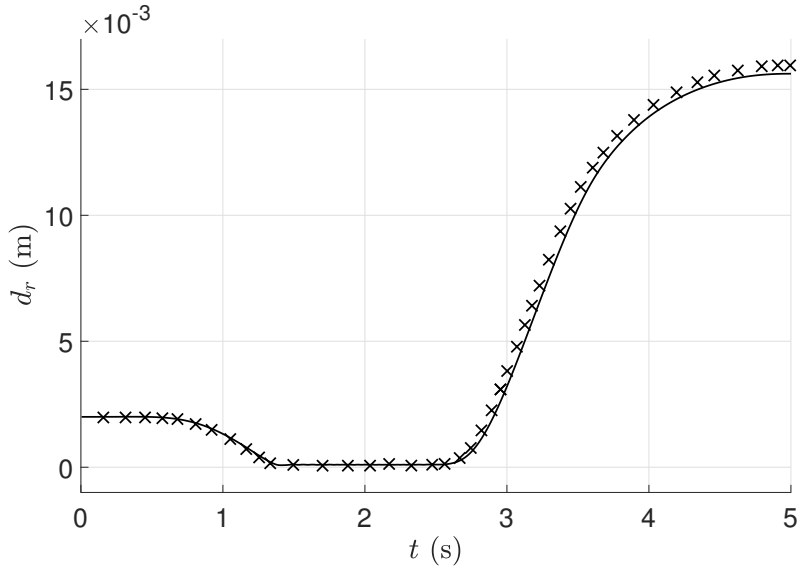


Figura 9.3: Evolución temporal de la distancia entre las esferas. En trazo continuo se grafican los resultados obtenidos en esta tesis y con cruces se señalan los valores registrados en Jafari *et al.* (2011) [47].

Nuevamente, los resultados que obtuvimos ajustan de manera satisfactoria con las referencias citadas. Se pueden apreciar las tres etapas del fenómeno DKT. La etapa *drafting* se puede apreciar en el tramo 0.7 s $< t <$ 1.3 s, donde el cuerpo superior se ve «arrastrado» por el inferior. En el instante $t \approx 1.3$ s los discos se encuentran en contacto, lo que corresponde con la etapa de *kissing*. A partir de ese momento y hasta $t \approx 2.6$ s, mientras los discos se mantienen

en contacto, el cuerpo superior rota entorno al inferior hasta pasar a ubicarse en la zona inferior a este (*drafting*). Finalmente, a partir de ese momento los discos comienzan a separarse.

El análisis de esta sección muestra que el modelo CAFFA3D.MBRI fue capaz de resolver con solvencia el caso bidimensional de la caída de dos rígidos circulares inmersos en un fluido newtoniano, así como la interacción entre ellos cuando colisionan.

9.3. Simulación 3D de la caída de dos esferas

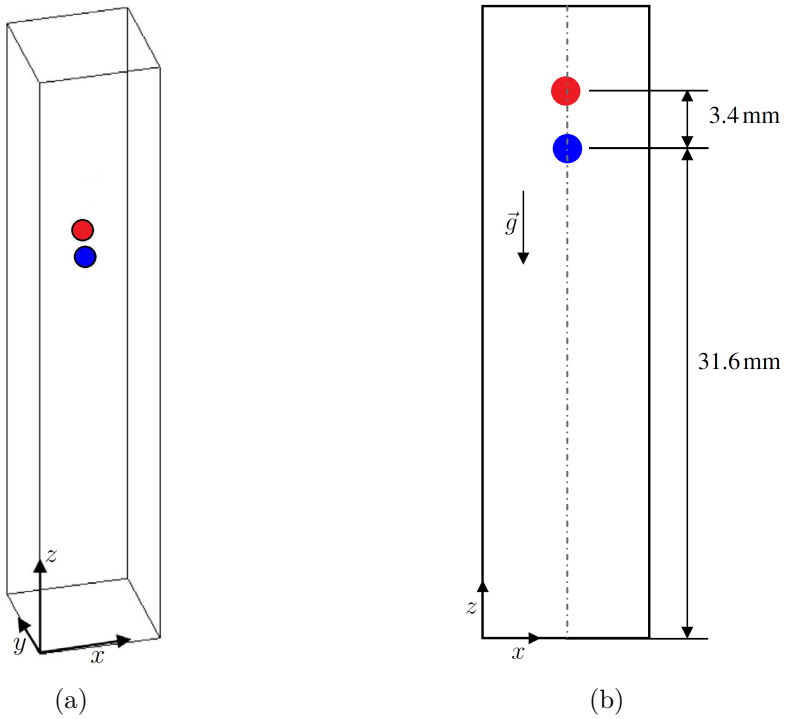
En esta sección abordamos el caso tridimiensional de la dinámica de sedimentación de dos esferas cayendo inmersas en un fluido newtoniano. Esta situación ha sido objeto de diversos estudios numéricos y experimentales.

En el área computacional, en Glowinski *et al.* (2001) [53] se aborda este problema, utilizando el método de elementos finitos y confinando el fluido a un determinado contenedor usando métodos de dominio ficticio basado en multiplicadores de Lagrange, para analizar la caída de dos esferas inmersas en un fluido confinado. En la Fig. 9.4 se esquematizan tanto las condiciones del problema, como la configuración inicial. El dominio es prismático, cuyos límites se extienden sobre $(x, y, z) = [-0.5, +0.5] \times [-0.5, +0.5] \times [0, +4.0]$ cm, siendo z la dirección vertical (dirección de caída) y el plano (x, y) horizontal. La condición de borde sobre todas las fronteras es de pared sólida sin deslizamiento (correspondiendo a las paredes del recipiente).

La viscosidad cinemática del fluido es $\nu = 1.0 \times 10^{-6}$ m^2/s y la relación entre la densidad del fluido (ρ_f) y la de las esferas (ρ_p) es $\frac{\rho_p}{\rho_f} = 1.14$. Las esferas son idénticas, de diámetro $D = \frac{1}{6}$ cm y parten inicialmente del reposo en las posiciones $(x_1, y_1, z_1) = (0, 0, 3.16)$ cm y $(x_2, y_2, z_2) = (0, 0, 3.5)$ cm.

Entre la bibliografía que reproduce el trabajo de Glowinski se encuentra la referencia de Apte *et al.* (2009) [58]. Allí se utiliza el método de volúmenes finitos con la aproximación de dominio-ficticio, para imponer la presencia de las esferas, siguiendo la línea de la técnica propuesta por Patankar (2001) [59]. En el análisis también se incluyen los resultados de Sharma y Patankar (2005) [60], que utilizan un método basado en volúmenes de control sobre mallas escalonadas [8].

Por otro lado, en el trabajo de Dash *et al.* (2014) [52] se resuelve numéricamente el mismo problema con una implementación del método de *lattice-*



(a) (b)

Figura 9.4: Esquema del problema físico planteado: (a) bosquejo tridimensional del sistema; (b) configuración inicial. Figuras adaptadas de Dash *et al.* (2014) [52].

Boltzmann con condiciones de borde inmersas. En dicho trabajo se destaca la realización de mediciones experimentales, que se encuentran congruentes cualitativamente con las simulaciones computacionales. En los experimentos de Dash se usa $\rho_f = 1195$ kg/m^3, parámetro que utilizamos en nuestras simulaciones. El recipiente experimental es cilíndrico con diámetro 100 mm.

Otro trabajo numérico que resuelve la misma situación es de Cheng *et al.* (2017) [61] donde, al igual que en el trabajo de Dash, se utiliza también un esquema similar de *lattice-Boltzmann* con la técnica de condiciones de borde inmersas para definir la presencia de las esferas. Cheng además desarrolla un método híbrido de *lattice-Boltzmann* orientado a simular flujos multifásicos.

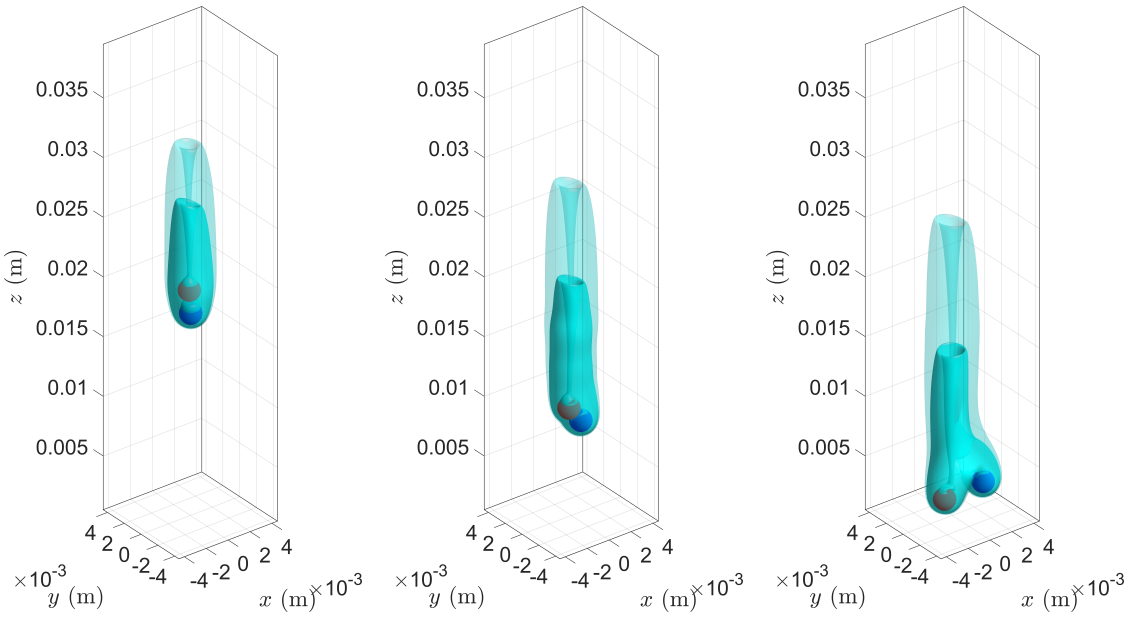
A las referencias citadas, agregamos los resultados resportados en Breugem (2012) [62] y en Liao *et al.* (2015) [63]. Por un lado, Breugem propone en su trabajo una implementación de segundo orden del IBM para modelar con el MVF situaciones que involucran flujo de partículas, en particular, la misma situación que analizamos en esta sección. Posteriormente, en Liao *et al.* (2015) [63] se desarrolla un modelo similar, para analizar la interacción entre esferas de diferentes tamaños que sedimentan inmersas en un fluido.

En nuestras simulaciones, la cantidad de celdas utilizadas para discretizar el dominio es $135 \times 135 \times 540$ según las direcciones x, y y z respectivamente ($\Delta x \approx 0.075$ mm). Además se utilizó una malla anidada que se mueve junto con la componente vertical del centro de masa del sistema formado por ambas esferas, como hicimos en la Sec. 9.2, y que se extiende inicialmente en el rango $[+2.96, +3.70]$ cm según z y ocupa la región $[-0.475, +0.475]$ cm en las direcciones x y y. La cantidad de puntos de la malla anidada es $189 \times 189 \times 148$ según (x, y, z) ($\Delta x \approx 0.050$ mm) y las condiciones de frontera son de celdas interpolantes (para la técnica de *nesting* del Cap. 5), ya que la malla se encuentra completamente dentro del dominio computacional.

Incluimos un pequeño desfasaje δ en la posición inicial de las esferas según dirección x, para inducir la ocurrencia temprana del fenómeno DKT [57, 63]. Este tipo de perturbaciones son propias de las mediciones experimentales. En nuestras simulaciones utilizamos $(x_2, y_2, z_2) = (-\delta, 0, 3.5cm)$, con $\delta \approx \frac{D}{10}$, que ocupa aproximadamente tres celdas de cálculo de la malla anidada. Esto además promueve que el movimiento del centro de las esferas se desarrolle sobre el plano vertical $y = 0$.

El paso temporal que usamos para las simulaciones que presentamos es $dt = 5.0 \times 10^{-4}$ s, se realizaron 50 iteraciones externas por cada paso temporal y el factor de *blending* es $Gds = 0.9$. El factor de sobre-relajación utilizado tanto para la fuerza como para el momento, ejercidos por el fluido sobre cada cuerpo, es $\alpha = 0.1$. Para la fuerza de interacción entre las esferas, usamos los siguientes parámetros definidos según la Ec. 9.1: $\xi = 5.0 \times 10^{-5}$ m, $\lambda_1^P = 4.0$, $\lambda_2^P = 1.5$ y $\epsilon_P = \epsilon'_P = 0.01$ m^2/N. La fuerza de interacción entre las esferas y las paredes fueron calculados a partir del modelo de la Ec. 8.2, usando el mismo parámetro $\xi = 5.0 \times 10^{-5}$ m, $\lambda_1 = 4.0$, $\lambda_2 = 1.5$ y $\epsilon_W = \epsilon'_P/2$.

Comparando los cálculos realizados por el CAFFA3D.MBRI con los reportados en las referencias previas, se observa gran similitud, presentando pequeñas diferencias una vez alcanzada la inestabilidad que provoca el fenómeno de *tumbling*. Efectivamente, es esperable tener resultados similares hasta el proceso de *kissing*, dado que el desarrollo del proceso de *tumbling* depende de la manera en que crece dicha inestabilidad, que a su vez está fuertemente condicionado por las características de la implementación computacional utilizada [60]. Por lo tanto, los detalles del movimiento posterior a la etapa de *kissing* depende de la manera en la que se desarrolla el *tumbling*, y no esperamos concordancia en esta etapa. Por otro lado, el proceso de *kissing* depende de la manera en



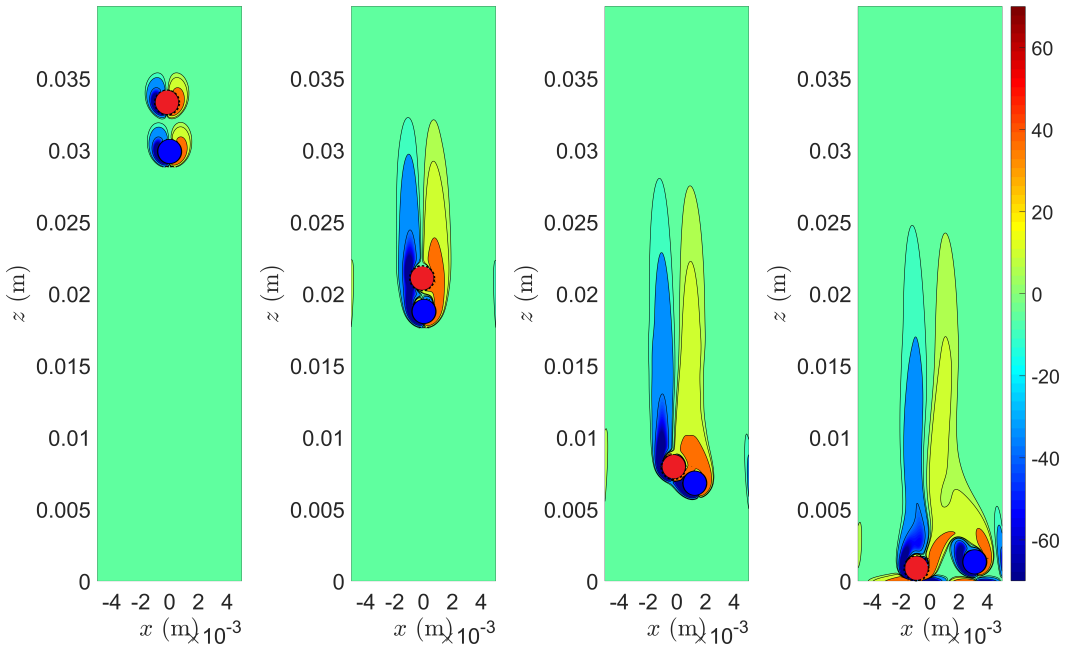
(a) $t = 0.38s$ (b) $t = 0.53s$ (c) $t = 0.65s$

Figura 9.5: Superficies de iso-vorticidad para $\omega = 5.0s^{-1}$ (mayor transparencia) y $\omega = 15.0s^{-1}$ (mayor opacidad). En color rojo (azul) se representa la superficie de la esfera inicialmente superior (inferior).

que fue modelada la fuerza de repulsión entre las esferas. En nuestro caso, al incluir una fuerza de repulsión suave de largo alcance, es esperable que dicho proceso se vea suavizado en comparación con una fuerza de acción más abrupta (impacto instantáneo).

En la Fig. 9.5 representamos los resultados obtenidos. Allí graficamos dos curvas de iso-vorticidad diferentes en tres instantes de tiempo. En la Fig. 9.5(a) las esferas están experimentando el fenómeno de *drafting*, ya próximas al instante en que toman contacto. En la Fig. 9.5(b) se está desarrollando el fenómeno de *tumbling*, durante el que las esferas se mantienen en contacto y la esfera superior paulatinamente pasa a ubicarse en la posición inferior. Completado este proceso, las esferas se vuelven a separar, como se muestra en la Fig. 9.5(c).

En la Fig. 9.6 se muestran contornos de vorticidad ω_y obtenidos con el CAFFA3D.MBRI, que es la componente de vorticidad dominante, para diferentes instantes de tiempo. Estos fueron generados en el plano vertical $y = 0$, que es prácticamente donde se mantienen los centros de las esferas durante la caída, gracias a la pequeña perturbación que impusimos sobre las posiciones iniciales según la dirección x.

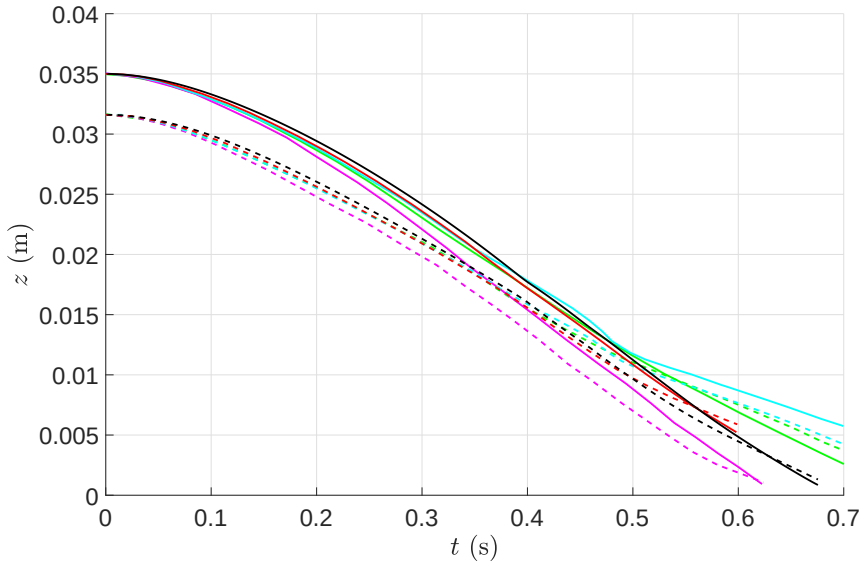


(a) $t = 0.10s$ (b) $t = 0.35s$ (c) $t = 0.55s$ (d) $t = 0.68s$

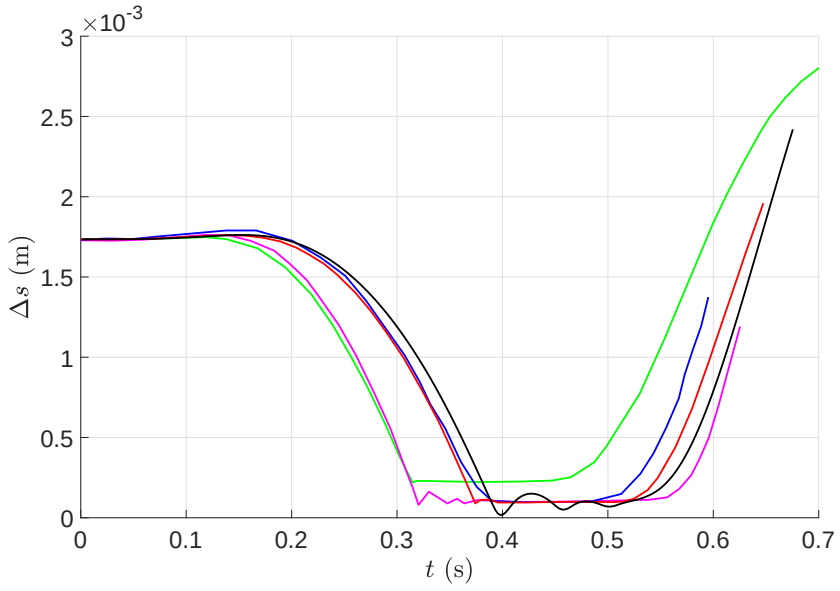
Figura 9.6: Componente de vorticidad ω_y (s^{-1}) en el plano vertical central $y = 0$, para diferentes instantes de tiempo. En color rojo (azul) se representa la superficie de la esfera inicialmente superior (inferior).

Las Figs. 9.6(b) y 9.6(b) corresponden al proceso de *drafting*, mientras que la Fig. 9.6(c) se enmarca en el proceso de *tumbling*, que culmina cuando la esfera superior pasa a ubicarse por debajo y se separan, como en la Fig. 9.6(d).

En relación al movimiento de caída de las esferas, en la Fig. 9.7(a) se muestra la evolución de la posición vertical de las esferas durante la caída, y se compara con la bibliografía citada. Como se puede observar, el andamiento de las curvas se encuentran en excelente concordancia con las documentadas en diferentes referencias bibliográficas. Como ya mencionamos, la presencia y el momento en que se da el proceso de *tumbling* dependen fuertemente de las características del modelo numérico utilizado. Sin embargo, el proceso de caída se ajusta muy bien a los cálculos realizados por los diferentes autores citados.



(a)



(b)

Figura 9.7: Resultados obtenidos en nuestras simulaciones y comparación con citas bibliográficas: (a) evolución temporal de la posición vertical de las esferas (esfera superior en trazo continuo y esfera inferior en trazo punteado); (b) evolución de la distancia entre las superficies de las esferas. Las referencias de colores corresponden a: negro, resultados de la presente tesis; verde, resultados de Glowinski *et al.* (2001) [53]; magenta, Apte *et al.* (2009) [58]; celeste, Sharma y Patankar (2005) [60] (sólo para (a)); rojo, Breugem (2012) [62]; azul, Liao *et al.* (2015) [63] (sólo para (a)).

En la Fig. 9.7(b) se muestra cómo evoluciona la distancia de separación entre las superficies de las esferas (Δs). Nuestros resultados coinciden con las

referencias previas, aún más en el intervalo previo a la interacción entre las partículas, como es esperado debido a que las fuerzas de interacción entre las esferas no fue modelada de la misma manera. Ajustar los parámetros de rigidez y las distancias que definen a dicha fuerza de interacción es crucial para mejorar la calidad de los resultados. Precisamente, en la Fig. 9.7(b) se puede notar una pequeña oscilación en la distancia entre las esferas después del instante de *kissing* (en $t \approx 0.4s$), que sugieren que nuestros parámetros deben ser ajustados. Si bien una fuerza de lubricación de largo alcance tiene consecuencias no deseadas, como la oscilación señalada, también beneficia el intercambio de momento tangencial. Sin embargo, la zona de seguridad (región entre las esferas y donde actúa la fuerza de repulsión para impedir la superposición de los cuerpos) debe mantenerse tan pequeña como sea posible [56].

Si bien la evolución de la distancia de separación entre las esferas puede ser perfeccionada, experimentando con diferentes parámetros para la fuerza de interacción entre las esferas y disminuyendo el paso de malla y el paso temporal, consideramos que los resultados numéricos encontrados son satisfactorios, más aún considerando que este tipo de cálculos (relacionados con la interacción entre cuerpos rígidos) escapan al objetivo de la presente tesis.

Podemos concluir que se logró modelar el proceso DKT y los resultados se encuentran en muy buena concordancia con lo reportados en la bibliografía. Perfeccionar el cálculo de la fuerza de interacción entre rígidos para el CAFFA3D.MBRI se ha planteado como trabajo a futuro. Se plantea realizar simulaciones incluyendo modificaciones sobre la expresión de la fuerza, así como buscar una estrategia para determinar y ajustar automáticamente, en tiempo de simulación, los parámetros que la definen.

Capítulo 10

Resuspensión de partículas en un ducto

Uno de los problemas que se enmarcan en el fenómeno de interacción sólido-fluido es la resuspensión de sedimentos. La resolución numérica de este problema requiere del tratamiento cuidadoso de numerosos detalles, como ser la definición de contacto entre el sedimento y la superficie sobre la que reposa inicialmente.

En este capítulo se plantea resolver con el CAFFA3D.MBRI el caso bidimensional de levantamiento de un sedimento circular, por un flujo horizontal de Poiseuille, confinado entre dos paredes paralelas. Se busca reproducir el mecanismo que hace que una corriente, generada por un gradiente de presión constante, levante un sedimento y, una vez alcanzado el régimen estacionario, este se traslade manteniendo una altura aproximadamente constante. Resolver esta tipo de situaciones con el CAFFA3D.MBRI es una demostración del tipo de problemas que es capaz de abordar el paquete computacional desarrollado en esta tesis.

10.1. Motivación y descripción del problema

La resuspensión o levantamiento de partículas refiere al proceso en el que partículas adheridas a una superficie son removidas por un determinado flujo. La remoción de partículas sedimentadas ocurre durante el transporte natural de sedimentos, y puede también ser beneficioso, por ejemplo en la acumulación de polvo en paneles solares, o problemático, como ser el levantamiento de

partículas contaminantes depositadas sobre superficies en hospitales.

Existen numerosas situaciones en las que el fenómeno de resuspensión es crucial [64], lo que ha estimulado a su extenso estudio. Sus aplicaciones abarcan fenómenos como ser la resuspensión de partículas en suelos (partículas de tamaño de decenas de micrómetros a unos pocos milímetros) o la resuspensión de polvo en carreteras (que involucra partículas de tamaño menor a 10 mm), que tiene un fuerte impacto ambiental. El transporte de partículas por vientos es investigado tanto en ambientes cerrados (como ser en sistemas de ventilación), como en abiertos (por ejemplo, cuando se aplican pesticidas). En la industria farmacéutica se puede ver este fenómeno en aplicaciones como inhaladores, o en el sector alimenticio este puede afectar el proceso de fabricación de productos como la leche en polvo. El fenómeno también se hace presente en el área de la biología, por ejemplo en la retención en medios porosos, como ser virus o bacterias.

Investigaciones en el tópico de la resuspensión de sólidos hacen especial énfasis en encontrar las condiciones críticas para mover a una partícula en suspensión, es decir, encontrar el mínimo flujo, y por tanto potencia invertida, necesario para movilizar partículas en suspensión [65].

En la literatura técnica no se da una definición precisa de velocidad mínima de transporte, ya que pueden determinarse dos velocidades mínimas, que corresponden a los tramos de conductos verticales y a los horizontales, siendo diferente el mecanismo de sedimentación en cada caso [66, 67]. En conductos verticales, la sedimentación del sólido ocurre para velocidades del aire inferiores a la velocidad terminal de sedimentación de las partículas sólidas. En el caso de ductos horizontales, la dirección de la fuerza de gravedad no coincide con la dirección del transporte de las partículas. Por debajo de cierta velocidad de flujo, que se denomina velocidad crítica de transporte, las trayectorias de las partículas dejan de ser continuas y comienza a ser a saltos, sobre la pared inferior del ducto, que se conoce como velocidad de transporte por saltos [68].

Para entender cualitativamente el proceso de resedimentación, consideremos un flujo de Poiseuille bidimensional entre dos paredes horizontales, generado por un determinado gradiente de presión impuesto. Si una partícula circular se apoya sobre la pared inferior, cuando el gradiente de presión es suficientemente grande dicha partícula levita hasta alcanzar cierta altura de equilibrio por encima de la pared inferior, como se esquematiza en la Fig. 10.1. En la situación final de equilibrio, la velocidad traslacional (horizontal) y angu-

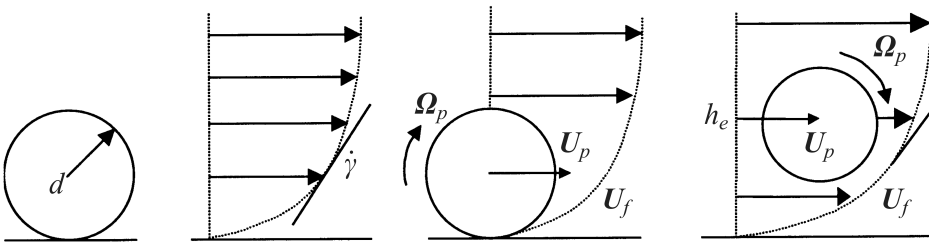


Figura 10.1: De izquierda a derecha, esquema del proceso durante el cual la partícula es removida por un flujo incidente (segunda figura), comenzando por rodar sin deslizar sobre la superficie (tercera figura) hasta su resuspensión y alcanzar la altura de equilibrio h_e al final del proceso (figura de la derecha) [1]. U_p representa la velocidad de la partícula y U_f la velocidad del fluido.

lar de la partícula alcanzan un valor constante. Por lo tanto, en esa situación la fuerza de arrastre (*drag*), que es en la dirección horizontal, se hace nula, mientras que la fuerza de sustentación (*lift*), que actúa en la dirección vertical, equilibra a la fuerza de peso relativo ($(\rho_p - \rho_f) \cdot V_p g$). Lo mismo sucede con el momento neto.

Por lo tanto, la fuerza de *lift* $\vec{L}$ es la responsable de la levitación de la partícula. Esta fuerza se puede escribir como la suma de la componente normal ($\vec{L}_p$) a la superficie de la partícula y la de cizalla o tangencial ($\vec{L}_s$), que tienen la siguientes expresiones [1]:

$$\begin{cases} \vec{L}_p = & \oint_{\partial P} -p\hat{n}d\Gamma \\ \vec{L}_s = & \oint_{\partial P} \mu \mathbf{A} \cdot \hat{n}d\Gamma \end{cases}, \tag{10.1}$$

donde ∂P es la superficie de la partícula (borde circular), cuyo vector normal y saliente es $\hat{n}$, p es la presión, μ es la viscosidad dinámica del fluido, $\mathbf{A} = (\nabla\vec{u} + \nabla\vec{u}^T)$ es el tensor de deformaciones multiplicado por el factor 2.

En el equilibrio, se cumple:

$$\vec{L}_p + \vec{L}_s = (\rho_p - \rho_f) \cdot V_p \vec{g}, \tag{10.2}$$

donde V_p es el volumen de la partícula ($V_p = \frac{1}{4}\pi d^2$, siendo d el diámetro de la partícula), ρ_p la densidad de la partícula y ρ_f la densidad del fluido.

Consideremos una partícula circular que rueda sin deslizar sobre la pared inferior del ducto, hasta que es removida (elevada) por un flujo plano de Poiseuille. La situación, una vez alcanzada la altura de equilibrio (régimen

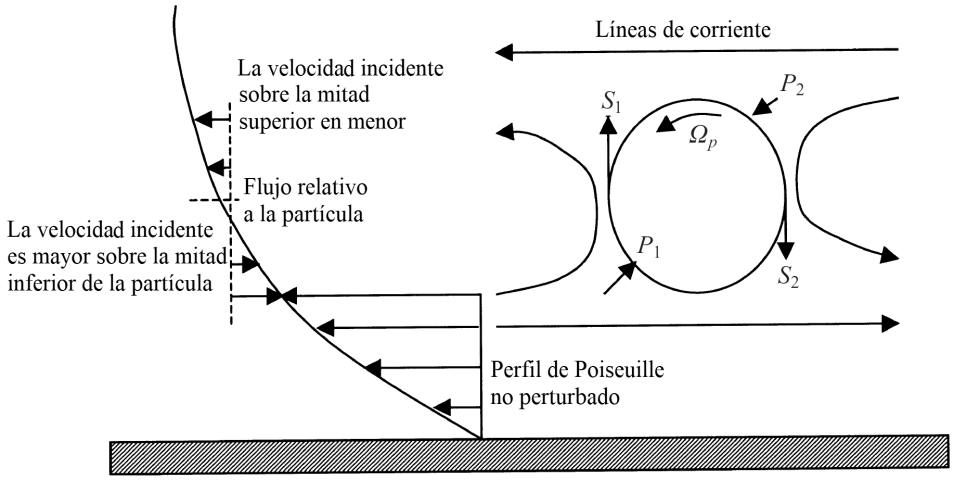


Figura 10.2: Esquema de la velocidad del fluido y las líneas de corriente relativas a la partícula, en un flujo plano de Poiseuille [1].

estacionario), se esquematiza en la Fig. 10.2. Allí se muestra el flujo medido desde un referencial en reposo, así como respecto a un referencial que se traslada solidario al centro de la partícula, que rota libremente.

La Fig. 10.2 permite analizar cualitativamente los orígenes de la fuerza de *lift*. Allí se muestran las líneas de corriente del flujo alrededor de la partícula, en un referencial que se traslada solidario a la partícula, en un instante en que la partícula se desprende de la superficie y que se retrasa respecto al flujo no perturbado (aguas arriba). Debido a la curvatura del perfil de velocidades no perturbado, la velocidad relativa que incide sobre la mitad inferior de la partícula es mayor que la que incide sobre la mitad superior [69]. Un mayor flujo relativo sobre la mitad inferior de la partícula resulta en un mayor esfuerzo viscoso de corte sobre esa mitad [70].

El fluido que incide a alta velocidad sobre la mitad inferior genera una alta presión P_1, que empuja a la partícula hacia arriba. Luego, ese fluido incidente se deflecta hacia arriba (por la propia partícula), ocasionando el esfuerzo viscoso de corte S_1, también hacia arriba. Análogamente sucede con los esfuerzos sobre la mitad superior P_2 y S_2, pero hacia abajo.

Como la velocidad incidente sobre la mitad inferior es mayor, la fuerza vertical (transversal al flujo, es decir, de *lift*) debido a P_1 y S_1 domina, ocasionando una fuerza neta hacia arriba sobre la partícula. Este hecho es consistente con observaciones previas [1].

En la siguiente sección se describen las simulaciones que hemos realizado con el CAFFA3D.MBRI, donde se modela la resuspensión de una partícula

circular inmersa en un flujo de Poiseuille. Como referencia, comparamos los resultados con el trabajo de Patankar *et al.* (2001) [1]. Si bien se analiza el caso bidimensional, el código puede ser aplicado al caso tridimensional de resedimentación de una partícula de forma arbitraria o de un grupo de partículas.

10.2. Modelado numérico bidimensional de la resuspensión de una partícula circular por un flujo de Poiseuille

En nuestras simulaciones, el dominio considerado es un rectángulo de 4.0 m de largo y 0.24 m de alto, que contiene un fluido de densidad 1000.0 kg/m^3 y viscosidad dinámica $\mu = 0.1$ Pa $\cdot$ s. Esto difiere del trabajo de Patankar *et al.* (2002) [2], donde se utiliza un dominio cuadrado de 0.24 m de lado, y sigue el movimiento horizontal del sedimento (de manera que este siempre se mantiene a igual distancia de los extremos del ducto). En contraposición, en nuestras simulaciones optamos por un dominio fijo y de mayor extensión horizontal, para que la partícula pueda desplazarse horizontalmente. Esto permite que su extensión para simular el comportamiento en resuspensión de un conjunto de partículas, con libre interacción entre ellas, sea natural, en el sentido de que no requiera mayores modificaciones.

En la dirección normal al plano de movimiento usamos un pequeño espesor, lo cual es necesario dada la naturaleza tridimensional del modelo. El dominio computacional finalmente tiene las dimensiones $[0.0, 4.0] \times [-8.1 \times 10^{-4}, +8.1 \times 10^{-4}] \times [0.0, 0.24]$ m en las direcciones x (horizontal), y (profundidad, normal al plano del flujo) y z (altura) respectivamente.

Para la discretización del dominio se emplearon $7392 \times 3 \times 444$ celdas respectivamente en x, y y z, dando un tamaño de celda de 5.4×10^{-4} m aproximadamente. Las condiciones de frontera son: condiciones periódicas en los extremos $x = 0.0$ m y $x = 4.0$ m, pared rígida sin deslizamiento en $z = 0.0$ m y $z = 0.24$ m, y condiciones de borde de simetría (que suprime los esfuerzos de cizalla) en $y = \pm 8.1 \times 10^{-4}$ m.

El flujo es impuesto por un gradiente de presión horizontal $\overline{p}$, que se relaciona con la velocidad media del perfil de velocidades de Poiseuille U_{lid} por la

siguiente expresión:

$$\overline{p} = \frac{12\mu U_{lid}}{W^2}, \tag{10.3}$$

donde $W = 0.24$ cm es el espesor del ducto y μ es la viscosidad dinámica del fluido.

El sedimento inmerso en el fluido consiste en un cilindro de diámetro $d = 1.0$ cm (de tamaño considerable frente a condiciones observadas en la naturaleza, pero que es el mismo que el usado por Patankar) y densidad 1010.0 kg/m^3, cuyo eje se ubica inicialmente en $x_0 = 1.1$ m y $z_0 = 0.52$ cm. La altura inicial no coincide con $d/2$ (z_0 lo supera en aproximadamente un tercio del tamaño de celda) con el objetivo de minimizar la superficie de contacto inicial entre el cilindro y la pared inferior del dominio. Si bien nuestro objetivo fue promover un contacto puntual entre las superficies del sedimento y la pared inferior del ducto, este procedimiento debe ser revisado, ya que puede estar generando diferencias respecto a trabajos previos.

Usamos además una malla anidada que sigue el movimiento bidimensional del sedimento. Esta malla tiene dimensiones (4.0×4.0) cm según x y z y cuyo centro se traslada siguiendo el eje del cilindro. La profundidad de esta malla coincide con la del dominio computacional antes descrito y tiene condiciones de frontera de simetría, mientras que el resto de las fronteras son de interpolación según el método de anidamiento. La cantidad de celdas de la malla anidada es $300 \times 11 \times 300$, según x, y y z respectivamente, dando un tamaño de celda de 1.3×10^{-4} m aproximadamente.

El paso temporal que usamos para las simulaciones que presentamos es $dt = 0.01$ s, se realizan 10 iteraciones externas por cada paso temporal y el factor de *blending* es $Gds = 0.5$. El factor de sobre-relajación tanto para la fuerza como para el momento que ejerce el fluido sobre cada cuerpo es $\alpha = 0.1$. Durante los primero pasos temporales (en nuestras simulaciones fueron veinte pasos) el cilindro se mantiene en posición fija y luego es liberado. De esta manera se promueve el establecimiento de las condiciones.

En el instante inicial el cilindro se encuentra en reposo e imponemos un campo de velocidades de Poiseuille sobre el fluido. Si se desea tener una velocidad media U_{lid}, este campo está dado por la siguiente ecuación:

$$u_b(z) = \frac{6}{(0.24m)^2} \cdot z \cdot (0.24m - z) \cdot U_{lid}, \tag{10.4}$$

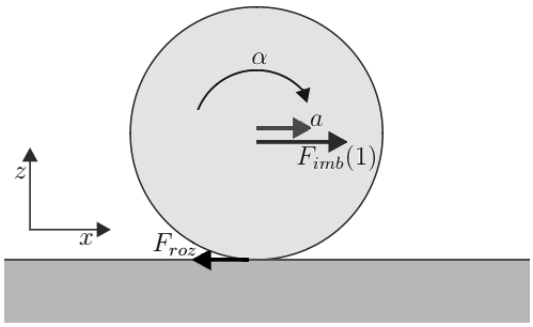


Figura 10.3: Esquema que muestra las fuerzas horizontales que actúan sobre el cilindro durante el movimiento de rodadura sin deslizamiento.

Cuando el cilindro levita por encima de la base del dominio, las fuerzas que rigen su dinámica son la fuerza que el fluido ejerce sobre la partícula y el peso relativo. En ese escenario, la rotación del cilindro se regula solamente por el momento que el fluido ejerce sobre el cuerpo. Por otro lado, mientras el cuerpo se encuentra apoyado sobre la superficie, es decir, mientras la componente vertical de la fuerza de interacción sólido fluido no supera al peso relativo del cuerpo, el cilindro rueda sin deslizar sobre la pared inferior del dominio. Para modelar la condición de rodadura sin deslizamiento, discriminamos dos situaciones, comparando la fuerza vertical de interacción sólido-fluido y el peso de la partícula.

En el caso de Patankar *et al.* (2001) [1], el umbral de distancia entre el cilindro y la pared a partir de la cual el sedimento se considera levitando es $0.0005d$. En nuestro modelo, por la propia resolución espacial de la malla utilizada, la mínima separación que se logra detectar entre superficie del cilindro y la pared inferior del dominio es $0.02d$. De esta manera, consideramos que la partícula levita cuando se dan dos condiciones: que la fuerza vertical que el fluido ejerce sobre la partícula sea hacia arriba y supere a su peso relativo, y que la distancia entre el cilindro y la pared inferior sea mayor que $0.02d$ (es decir, que la altura de la esfera sea $z > 5.2mm$).

Para expresar las ecuaciones correspondientes al movimiento de rodadura sin deslizamiento, consideramos la Fig. 10.3, donde se muestra un esquema con las fuerzas que actúan sobre el cilindro en el caso en el que el cilindro rueda sin deslizar. Durante la rodadura, la fuerza de rozamiento en el punto de contacto, $\vec{F}_{roz}$, es la que impide que deslice (movimiento relativo de las superficies) y la componente horizontal de la fuerza que el fluido ejerce sobre la partícula, $F_{imb}(1)$, que es la que lo desplaza sobre dicho plano.

La primera ecuación cardinal en la dirección horizontal y la segunda ecuación cardinal en la dirección perpendicular al plano de la figura son, respectivamente:

$$\begin{cases} m_p a = & F_{imb}(1) - F_{roz}, \\ I_p \alpha = & \dfrac{d}{2} F_{roz} + M_{imb}(2), \end{cases} \tag{10.5}$$

donde m_p es la masa de la partícula, $I_p = \frac{m_p d^2}{8}$ es su momento de inercia respecto a su propio eje, $M_{imb}(2)$ es la componente del momento de fuerza que ejerce el fluido sobre la partícula respecto al eje del cilindro, a es la aceleración horizontal y α es su aceleración angular, también respecto al eje del cilindro ($\alpha = \dot{\Omega}$).

La condición de rodadura sin deslizamiento es que la velocidad traslacional del cilindro U_p se relaciona con su velocidad angular Ω_p según la relación $U_p = \frac{d}{2}\Omega_p$. A partir de esta condición y eliminando F_{roz} entre las Ecs. 10.5, se obtiene:

$$m_p a = \frac{2}{3}\left[F_{imb}(1) + \frac{M_{imb}(2)}{d/2}\right] \tag{10.6}$$

En nuestra implementación resolvimos esta ecuación con un esquema *forward* Euler, y una vez actualizada la velocidad traslacional, queda determinada la velocidad de rotación.

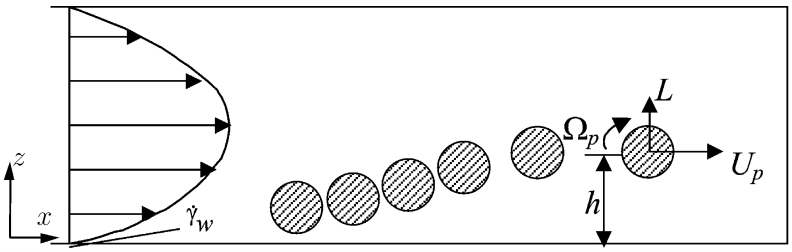


Figura 10.4: Esquema que representa las diferentes etapas del proceso de levantamiento del sedimento (figura adaptada de Patankar *et al.* (2002) [2]).

Un aspecto que buscamos analizar es la dependencia de la altura de equilibrio de la partícula en función del número de Reynolds. Como referencia usamos el trabajo de Patankar *et al.* (2001) [1], donde se define el Re como:

$$Re = \frac{\rho_f U d}{\mu}, \tag{10.7}$$

donde $U = \dot{\gamma}_w d$, siendo $\dot{\gamma}_w$ la componente vertical del gradiente del perfil de velocidades (horizontal) sobre la pared del dominio en ausencia del cilindro,

como se señala en la Fig. 10.4. Reescribimos el Re a partir de los parámetros de nuestro problema como:

$$Re = \frac{6\rho_f d^2}{W\mu} U_{lid}, \tag{10.8}$$

donde W es la distancia entre las paredes sólidas del dominio ($W = 0.24m$ en nuestro caso).

10.3. Resultados y análisis

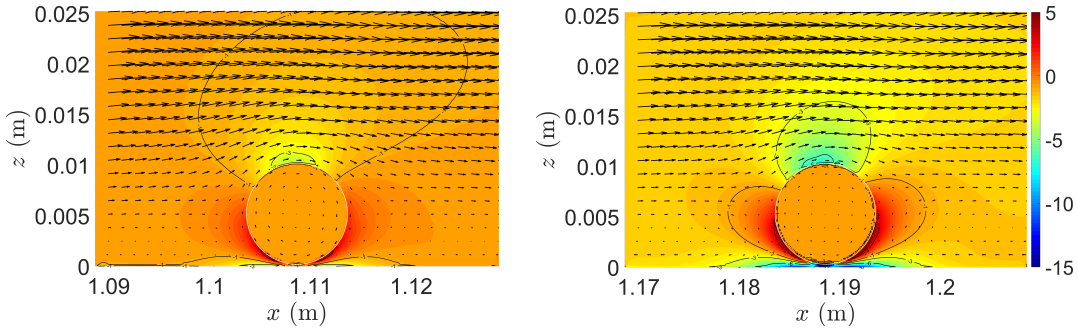
En esta sección se reportan los resultados que obtuvimos para $Re = 1.0$, 2.0, 2.5, 3.0, 4.0 y 5.0. En la Fig. 10.5 mostramos contornos del campo de vorticidad para las diferentes situaciones una vez alcanzada la altura de equilibrio, en un referencial solidario al centro del sedimento (es decir, su velocidad relativa es cero).

Se logra verificar que la vorticidad toma valores mayores cuanto mayor es el Re, respondiendo al hecho de que la remoción del sedimiento es más drástica cuando el flujo tiene mayor intensidad.

En la Fig. 10.6 se muestra la evolución temporal de la mínima distancia entre la superficie del sedimento y la pared inferior ($h_{rel} = z - \frac{d}{2}$) adimensionada por su diámetro, para las diferentes condiciones del flujo. Como se puede observar, superado el umbral de levantamiento del sedimento, cuanto menor es el Re, mayor es el tiempo que toma alcanzar el estado de equilibrio. Esto es a causa de que cerca del umbral, cuando la altura que alcanza el sedimento es muy pequeña, la fuerza de sustentación supera levemente al peso relativo de la partícula y experimenta variaciones significativas frente a pequeñas fluctuaciones en el flujo que pasa por debajo del cuerpo.

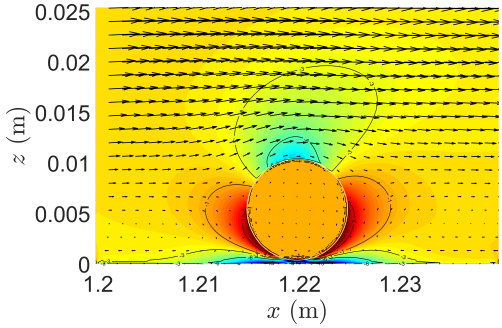
Si bien en la literatura previa no se reportan las correspondientes curvas para las mismas condiciones del problema, en el trabajo de Joseph y Ocando (2002) [71] se exponen comportamientos análogos para situaciones similares, del levantamiento bidimensional de un sedimento circular pero utilizando diferentes valores para los parámetros del problema físico.

A partir de la Fig. 10.6, se obtiene la altura de equilibrio del centro del sedimento para los diferentes valores del Re. En la Fig. 10.7 se grafican estos resultados, donde además se muestran los cálculos de Patankar *et al.* (2001) [1].

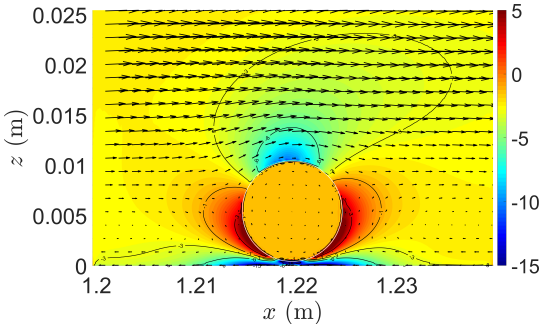


(a) $t = 5.0s$, $Re = 1.0$

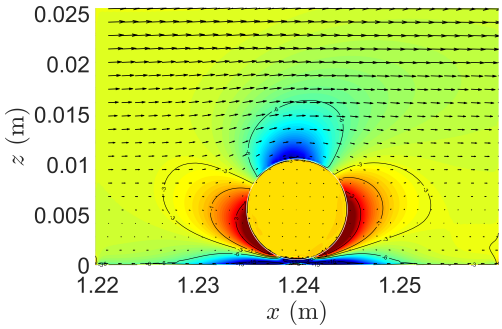
(b) $t = 15.0$, $Re = 2.0$



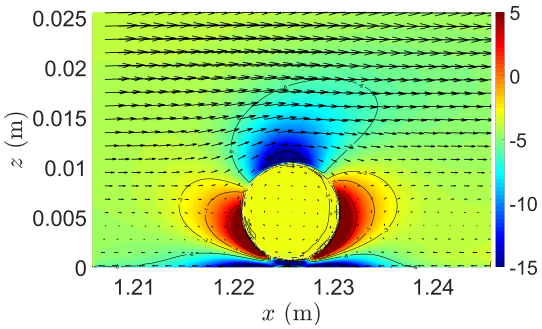
(c) $t = 15.0s$, $Re = 2.5$



(d) $t = 12.0s$, $Re = 3.0$



(e) $t = 10.0s$, $Re = 4.0$



(f) $t = 7.5s$, $Re = 5.0$

Figura 10.5: Contornos de la componente de vorticidad ω_y y campos de velocidades sobre en el plano vertical central $y = 0$ y en un referencial solidario a la esfera, para diferentes instantes de tiempo.

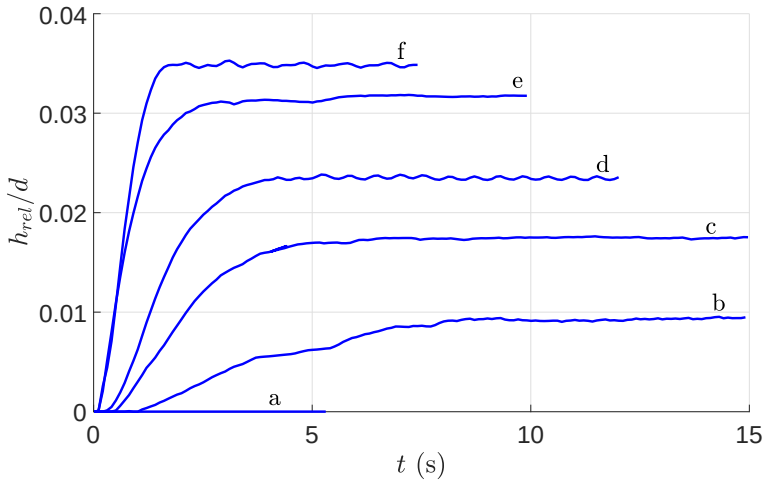


Figura 10.6: Evolución temporal de la distancia mínima que separa la superficie del sedimento a la pared inferior del ducto (h_{rel}), adimensionada por el diámetro del mismo, para (a) $Re = 1.0$ (no hay levantamiento del sedimento), (b) $Re = 2.0$, (c) $Re = 2.5$, (d) $Re = 3.0$, (e) $Re = 4.0$ y (f) $Re = 5.0$

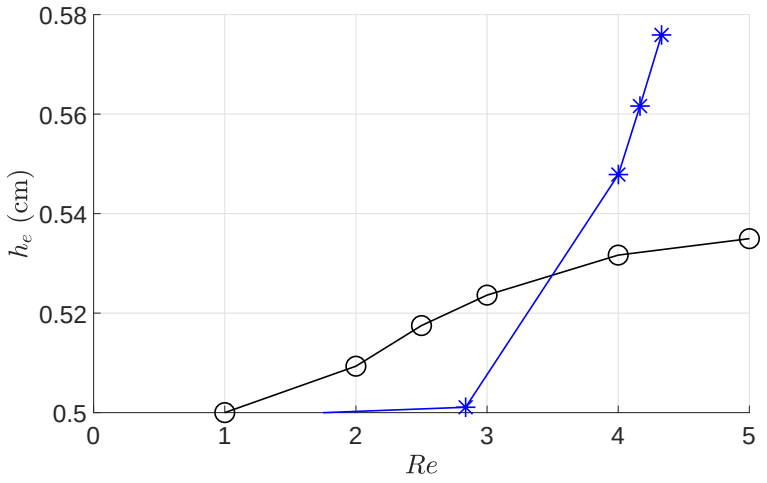


Figura 10.7: Altura de equilibrio del sedimento en función del Re. Los asteriscos azules corresponden a los resultados reportados en Patankar *et al.* (2001) [1] y los círculos negros a los obtenidos con el CAFFA3D.MBRI.

Al igual que en el trabajo de Patankar, las alturas de equilibrio crecen con Re y toman valores pequeños, inferiores a una décima del diámetro de la partícula.

Por otro lado, el valor crítico de Re (Re_{cr}) a partir del cual se da el fenómeno de resedimentación, resulta ser inferior a 2 en nuestras simulaciones, mientras que Patankar obtiene un valor de 2.83 [1]. Esta diferencia puede deberse a

numerosos factores y es fundamental complementar el análisis bajo diferentes variantes, como ser diferentes refinamientos de malla o representación de la fuerza de interacción de la partícula con la pared inferior, durante la rodadura sin deslizamiento, entre otros.

Diversos factores pueden conducir a diferencias en el cálculo de la velocidad angular del rígido, lo que provoca diferencias en los valores de la fuerza de sustentación. Por otro lado, un modelado incorrecto de las condiciones para la rodadura sin deslizamiento puede provocar que el levantamiento del sedimento se vea adelantado o retrasado, respecto del Re_{cr}. A pesar de que se plantea ampliar el análisis como trabajo a futuro, se debe tener presente que el trabajo de Patankar es numérico y que, para obtener conclusiones veraces, se requiere de la experimentación.

Capítulo 11

Conclusiones y trabajo futuro

En esta tesis hemos generado un código que expande las capacidades del modelo CAFFA3D.MBRI. Este se basa en el método de volúmenes finitos y es paralelizado bajo la estrategia de Interfaz de Intercambio de Mensajes (MPI[1]) y la presencia del cuerpo rígido se emula con una implementación de IBM. Finalizado el trabajo de tesis, el código es capaz de abordar problemas que involucren la interacción sólido-fluido.

Para alcanzar el objetivo, fue necesario el cálculo preciso de la fuerza y del momento que ejerce el fluido sobre el cuerpo. Esto requiere el uso de mallas de cálculo muy finas, es decir, compuesto por celdas muy pequeñas. Una forma de lograr esto es generar mallas de manera dinámica, que se adapten a la superficie de los cuerpos en cada instante de tiempo y que sean suficientemente finas en sus cercanías. Sin embargo, este proceso sigue teniendo como contrapartida su elevado costo computacional y es necesario recurrir a un método alternativo.

La estrategia implementada en esta tesis se basa en la técnica de mallas anidadas (*nesting*), que utiliza una malla de fondo (*background*), y otras refinadas en las zonas donde se requiere más precisión en los cálculos. Esto se hizo adaptando implementaciones previas de dichas técnicas, para que las mallas anidadas se muevan de manera solidaria a los cuerpos, teniendo un cálculo preciso de las fuerzas de interacción involucradas.

Con este cometido se incorporaron rutinas que actualizan la posición y orientación de las correspondientes mallas anidadas, para luego moverlas, actualizando además la clasificación de las celdas del dominio computacional completo. Por otro lado, se corrigió la estrategia de reinicio de simulaciones,

[1]De sus siglas en inglés *Message Passing Interface*.

que permite retomar cálculos que aún no han concluido, de manera de que los bloques de malla móviles se ubiquen en las posiciones correctas al retomar dichos cálculos. Esto también se aplicó para el caso en que los cuerpos son representados por *patches*.

De esta manera es posible calcular la fuerza y momento que ejerce el fluido sobre el cuerpo rígido con la precisión deseada, sin la necesidad de utilizar una gran cantidad de celdas de cálculo, que a su vez puede superar la disponibilidad de recursos computacionales con la que se cuenta. De hecho, refinar la malla de cálculo en todo el dominio puede elevar sustancialmente el costo computacional y en general solo es necesario en las cercanías de los cuerpos inmersos (a Re moderados).

Por otro lado, implementamos un esquema *leapfrog* con sobre-relajación para calcular la evolución de la velocidad lineal, velocidad angular y posición del cuerpo (coordenadas de su centro de masa y orientación espacial) en cada instante. Para evitar grandes variaciones en los campos de velocidades en el fluido, producto de un movimiento abrupto del cuerpo, utilizamos un coeficiente de sobre-relajación para el cálculo de la velocidad del rígido. Además, la implementación generada es capaz de contemplar el movimiento de más de un rígido. Estos cuerpos, a su vez, pueden ser definidos explícitamente en el código (a través de la ecuación analítica que define sus superficies), o generado de manera externa con algún software de diseño gráfico y cargar los correspondientes *patches*, que definen las superficies de los cuerpos.

En resumen, se ha generado un modelo original, que combina de forma novedosa un conjunto de características aplicadas al análisis de flujos en interacción con cuerpos sólidos móviles. Algunos aspectos del modelo implementado pueden ser aún mejorados. El perfeccionar ciertas características de este modelo y continuar expandiendo sus capacidades conforman el trabajo a futuro que nos hemos planteado.

Entre los aspectos a mejorar del código se encuentra explorar esquemas que puedan favorecer el cálculo de gradientes. Aumentar su precisión posiblemente perfecciones el la implementación del IBM, lo que conlleva el obtener valores más precisos de la fuerza de *drag*, que toma valores muy bajos cuando se trabaja a bajos Re (Cap. 7). Este hecho hace más significativo el error de dicha fuerza respecto a los valores empíricos. Este cálculo también afecta sensiblemente el valor numérico del momento de fuerza que el fluido ejerce sobre el cuerpo y, por lo tanto, su dinámica de rotación. Por estas razones, conside-

ramos fundamental analizar el desempeño del modelo actual en ese sentido y buscar posibles optimizaciones, y lo hemos planteado como trabajo a futuro.

Respecto a los casos de análisis abordados en esta tesis, se contemplaron Re moderados. Un punto de interés a futuro es aplicar el modelo a situaciones con altos Re e incluso que involucren flujos turbulentos. Se espera que para esos casos sea necesario un alto refinamiento local de malla y la incorporación de modelos de capa límite. En estos últimos han estado trabajado otros integrantes del grupo de Mecánica de los Fluidos Computacional, y continúan en desarrollo.

En cuanto a la técnica de anidamiento, para más de un cuerpo hemos presentado casos donde una anidada abarca a todos los cuerpos rígidos involucrados. Sin embargo, es deseable poder utilizar varias mallas, de manera que cada una sea solidaria a un cuerpo rígido diferente. Si bien hemos trabajado en conseguir ese objetivo, hemos detectado la aparición de ciertos valores espurios de la solución en algunos puntos aislados sobre la intersección de las fronteras de las regiones anidadas. Aún no hemos detectado las causas de este problema y actualmente estamos intentando corregirlo.

A pesar de que no era el objetivo central de esta tesis, se trabajó en el modelado de la fuerza de interacción entre cuerpos rígidos. Los resultados obtenidos son cualitativamente satisfactorios y buscaremos perfeccionar los cálculos y automatizar la definición de los parámetros que definen a estas fuerzas. Además, trabajaremos en agregar esfuerzos de corte entre ellos, por contacto o por lubricación. Por otro lado, esto contribuye en otra propiedad que deseamos incorporar, que es la elasticidad de los cuerpos sólidos.

Finalmente, se mostró parte del alcance del paquete generado, resolviendo el caso bidimensional del levantamiento de un sedimento circular inmerso en un flujo de Poiseuille. Los resultados cualitativos están en concordancia con trabajos previos de otros autores, y buscaremos perfeccionar los resultados cuantitativos a través de un análisis más profundo, como ser su análisis con diferentes mallas de cálculo.

Referencias bibliográficas

[1] NA Patankar, PY Huang, T Ko, and DD Joseph. Lift-off of a single particle in newtonian and viscoelastic fluids by direct numerical simulation. *Journal of Fluid Mechanics*, 438:67–100, 2001.

[2] NA Patankar, DD Joseph, J Wang, RD Barree, M Conway, and M Asadi. Power law correlations for sediment transport in pressure driven channel flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 28(8):1269–1292, 2002.

[3] A. Usera, G.and Vernet and J. A. Ferré. A parallel block-structured finite volume method for flows in complex geometry with sliding interfaces. *Flow, Turbulence and Combustion*, 81(3):471–495, 2008.

[4] C S Peskin. The fluid dynamics of heart valves: Experimental, theoretical, and computational methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 14(1):235–259, 1982.

[5] M. Schäfer. *Computational Engineering - Introduction to Numerical Methods*. Springer Berlin Heidelberg, 2006.

[6] J.H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 2001.

[7] M Peric. *Numerical methods for computing turbulent flows*. 2001. Course notes.

[8] S.V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Electro Skills Series. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

[9] S.G. Rubin P.K. Khosla. A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme. *Computers and fluids*, 2(2):207–209, 1974.

[10] P.K. Kundu, I.M. Cohen, and D.R. Dowling. *Fluid Mechanics*. Elsevier Science, 2011.

[11] Peric M. Lilek Z., Muzaferija S. and Seidl V. An implicit finite-volume method using nonmatching blocks of structured grid. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 32:385–401, 1997.

[12] T Lehnhauser, S Ertem-Muller, M Schafer, and J Janicka. Advances in numerical methods for simulating turbulent flows. *Progress in Computational Fluid Dynamics, an International Journal*, 4(3-5):208–228, 2004.

[13] LS Caretto, AD Gosman, SV Patankar, and DB Spalding. Two calculation procedures for steady, three-dimensional flows with recirculation. In *Proceedings of the third international conference on numerical methods in fluid mechanics*, pages 60–68. Springer, 1973.

[14] CM Rhie and WL Chow. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal(ISSN 0001-1452)*, 21:1525–1532, 1983.

[15] Tayfun E. Tezduyar. Finite element methods for flow problems with moving boundaries and interfaces. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 8(2):83, Jun 2001.

[16] Seongwon Kang. *An Improved Immersed Boundary Method For Computation of Turbulent Flows With Heat Transfer*. PhD thesis, Stanford University, 2008.

[17] Ming-Chih Lai and Charles S. Peskin. An immersed boundary method with formal second-order accuracy and reduced numerical viscosity. *Journal of Computational Physics*, 160(2):705 – 719, 2000.

[18] John M. Stockie and Brian R. Wetton. Analysis of stiffness in the immersed boundary method and implications for time-stepping schemes. *Journal of Computational Physics*, 154(1):41 – 64, 1999.

[19] Chuan-Chieh Liao, Yu-Wei Chang, Chao-An Lin, and J.M. McDonough. Simulating flows with moving rigid boundary using immersed-boundary method. *Computers & Fluids*, 39(1):152 – 167, 2010.

[20] Yu-Heng Tseng and Joel H Ferziger. A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry. *Journal of computational physics*, 192(2):593–623, 2003.

[21] Sekhar Majumdar, Gianluca Iaccarino, and Paul Durbin. Rans solvers with adaptive structured boundary non-conforming grids. *Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, Stanford University*, pages 353–466, 2001.

[22] I Demirdžić and M Perić. Finite volume method for prediction of fluid flow in arbitrarily shaped domains with moving boundaries. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 10(7):771–790, 1990.

[23] JOHNT BATINA. Unsteady euler algorithm with unstructured dynamic mesh for complex- aircraft aerodynamic analysis. *AIAA journal*, 29(3):327–333, 1991.

[24] LP Zhang and ZJ Wang. A block lu-sgs implicit dual time-stepping algorithm for hybrid dynamic meshes. *Computers & fluids*, 33(7):891–916, 2004.

[25] Hidajet Hadzic. *Development and Application of Finite Volume Method for the Computation of Flows Around Moving Bodies on Unstructured, Overlapping Grids; Entwicklung und Anwendung einer Finiten Volumen Methode fuer die Berechnung der Stroemung um einen bewegten Koerper mit unstrukturierenden, ueberlappenden Gittern; Entwicklung und Anwendung einer Finiten Volumen Methode fuer die Berechnung der Stroemung um einen bewegten Koerper mit unstrukturierenden, ueberlappenden Gittern.* PhD thesis, 2006. Advisor: Perić, Milovan; http://tubdok.tub.tuhh.de/handle/11420/233.

[26] J. A. Benek, J. L. Steger, and F. C. Dougherty. A flexible grid embedding technique with application to the euler equations. In *Computational Fluid Dynamics Conference, 6th, Danvers, MA, July 13-15, 1983, Collection of Technical Papers (A83-39351 18-02)*, pages 373–382. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1983.

[27] Barbro Kreiss. Construction of a curvilinear grid. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 4(2):270–279, 1983.

[28] AR Koblitz, S Lovett, N Nikiforakis, and WD Henshaw. Direct numerical simulation of particulate flows with an overset grid method. *Journal of Computational Physics*, 343:414–431, 2017.

[29] Jeffrey W Banks, William D Henshaw, and Björn Sjögreen. A stable fsi algorithm for light rigid bodies in compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 245:399–430, 2013.

[30] Jeffrey W Banks, William D Henshaw, and Donald W Schwendeman. An analysis of a new stable partitioned algorithm for fsi problems. part i: Incompressible flow and elastic solids. *Journal of Computational Physics*, 269:108–137, 2014.

[31] Jeffrey W Banks, William D Henshaw, and Donald W Schwendeman. An analysis of a new stable partitioned algorithm for fsi problems. part ii: Incompressible flow and structural shells. *Journal of Computational Physics*, 268:399–416, 2014.

[32] Santiago Badia, Fabio Nobile, and Christian Vergara. Fluid–structure partitioned procedures based on robin transmission conditions. *Journal of Computational Physics*, 227(14):7027–7051, 2008.

[33] Hongli Yang, Minqiang Fan, Airong Liu, and Lianping Dong. General formulas for drag coefficient and settling velocity of sphere based on theoretical law. *International Journal of Mining Science and Technology*, 25(2):219 – 223, 2015.

[34] Sydney Goldstein. The steady flow of viscous fluid past a fixed spherical obstacle at small reynolds numbers. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 123(791):225–235, 1929.

[35] Gregory Falkovich. *Fluid Mechanics: A Short Course for Physicists*. Cambridge University Press, 2011.

[36] Decheng Wan and Stefan Turek. Direct numerical simulation of particulate flow via multigrid fem techniques and the fictitious boundary method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 51(5):531–566, 2006.

[37] P Bagchi and S Balachandar. Effect of free rotation on the motion of a solid sphere in linear shear flow at moderate re. *Physics of Fluids*, 14(8):2719–2737, 2002.

[38] Tobias Kempe and Jochen Fröhlich. An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. *Journal of Computational Physics*, 231(9):3663–3684, 2012.

[39] Stephan Schwarz, Tobias Kempe, and Jochen Fröhlich. A temporal discretization scheme to compute the motion of light particles in viscous flows by an immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, 281:591–613, 2015.

[40] J Wu and C Shu. Particulate flow simulation via a boundary condition-enforced immersed boundary-lattice boltzmann scheme. *Communications in Computational Physics*, 7(4):793, 2010.

[41] L Wang, ZL Guo, and JC Mi. Drafting, kissing and tumbling process of two particles with different sizes. *Computers & Fluids*, 96:20–34, 2014.

[42] A Ten Cate, CH Nieuwstad, JJ Derksen, and HEA Van den Akker. Particle imaging velocimetry experiments and lattice-boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity. *Physics of Fluids*, 14(11):4012–4025, 2002.

[43] Markus Raffel, Christian E Willert, Fulvio Scarano, Christian J Kähler, Steve T Wereley, and Jürgen Kompenhans. *Particle image velocimetry: a practical guide*. Springer, 2018.

[44] JGM Eggels and JA Somers. Numerical simulation of free convective flow using the lattice-boltzmann scheme. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 16(5):357–364, 1995.

[45] Jos Derksen and Harry EA Van den Akker. Large eddy simulations on the flow driven by a rushton turbine. *AIChE Journal*, 45(2):209–221, 1999.

[46] B Khalili, M Rahnama, S Jafari, F Gharibi, and E Jahanshahi Javaran. Lattice boltzmann simulation of solid particles motion in a three dimensional flow using smoothed profile method. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, 10(4), 2017.

[47] Saeed Jafari, Ryoichi Yamamoto, and Mohamad Rahnama. Lattice-boltzmann method combined with smoothed-profile method for particulate suspensions. *Physical Review E*, 83(2):026702, 2011.

[48] Antonio F Fortes, Daniel D Joseph, and Thomas S Lundgren. Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 177:467–483, 1987.

[49] Ren Sun and Allen T Chwang. Interactions between two touching spherical particles in sedimentation. *Physical Review E*, 76(4):046316, 2007.

[50] Somaye Hosseini Rad and Ali Najafi. Hydrodynamic interactions of spherical particles in a fluid confined by a rough no-slip wall. *Physical Review E*, 82(3):036305, 2010.

[51] DD Joseph, YJ Liu, M Poletto, and J Feng. Aggregation and dispersion of spheres falling in viscoelastic liquids. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 54:45–86, 1994.

[52] SM Dash, TS Lee, TT Lim, and H Huang. A flexible forcing three dimension ib–lbm scheme for flow past stationary and moving spheres. *Computers & Fluids*, 95:159–170, 2014.

[53] R Glowinski, TW Pan, TI Hesla, DD Joseph, and J Periaux. A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies: application to particulate flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):363–426, 2001.

[54] Bertrand Maury. A many-body lubrication model. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series I-Mathematics*, 325(9):1053–1058, 1997.

[55] B Maury. Direct simulations of 2d fluid-particle flows in biperiodic domains. *Journal of computational physics*, 156(2):325–351, 1999.

[56] Howard H Hu, Neelesh A Patankar, and MY Zhu. Direct numerical simulations of fluid–solid systems using the arbitrary lagrangian–eulerian technique. *Journal of Computational Physics*, 169(2):427–462, 2001.

[57] SM Dash and TS Lee. Two spheres sedimentation dynamics in a viscous liquid column. *Computers & Fluids*, 123:218–234, 2015.

[58] Sourabh V Apte, Mathieu Martin, and Neelesh A Patankar. A numerical method for fully resolved simulation (frs) of rigid particle–flow interactions in complex flows. *Journal of Computational Physics*, 228(8):2712–2738, 2009.

[59] NA Patankar. A formulation for fast computations of rigid particulate flows. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, 2001:185–196, 2001.

[60] Nitin Sharma and Neelesh A Patankar. A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 205(2):439–457, 2005.

[61] Ming Cheng, Baili Zhang, and Jing Lou. A hybrid lbm for flow with particles and drops. *Computers & Fluids*, 155:62–67, 2017.

[62] Wim-Paul Breugem. A second-order accurate immersed boundary method for fully resolved simulations of particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*, 231(13):4469–4498, 2012.

[63] Chuan-Chieh Liao, Wen-Wei Hsiao, Ting-Yu Lin, and Chao-An Lin. Simulations of two sedimenting-interacting spheres with different sizes and initial configurations using immersed boundary method. *Computational Mechanics*, 55(6):1191–1200, 2015.

[64] Christophe Henry and Jean-Pierre Minier. Progress in particle resuspension from rough surfaces by turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 45:1–53, 2014.

[65] Junyuan Mo, Zhengming Gao, Yuyun Bao, Zhipeng Li, and JJ Derksen. Suspending a solid sphere in laminar inertial liquid flow—experiments and simulations. *AIChE Journal*, 61(4):1455–1469, 2015.

[66] Tong Deng and Michael SA Bradley. Determination of a particle size distribution criterion for predicting dense phase pneumatic conveying behaviour of granular and powder materials. *Powder Technology*, 304:32–40, 2016.

[67] Jorge E. Flores, Gloria Villaflor, Jorge W. Velasco, and Eduardo R. Bisonard. Determinación de la velocidad de transporte de partículas por saltos en conductos horizontales. *Información Tecnológica*, 28(6):199 – 206, 2017.

[68] Tariq S Khan, Ying Dai, Mohamed S Alshehhi, and Lyes Khezzar. Experimental flow characterization of sand particles for pneumatic transport in horizontal circular pipes. *Powder Technology*, 292:158–168, 2016.

[69] BP Ho and LG Leal. Inertial migration of rigid spheres in two-dimensional unidirectional flows. *Journal of fluid mechanics*, 65(2):365–400, 1974.

[70] James Feng, Howard H Hu, and Daniel D Joseph. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a newtonian fluid. part 2. couette and poiseuille flows. *Journal of fluid mechanics*, 277:271–301, 1994.

[71] DD Joseph and D Ocando. Slip velocity and lift. *Journal of Fluid Mechanics*, 454:263–286, 2002.

[72] Scarborough J. B. *Numerical mathematical analysis*. Hopkins Press, Baltimore, 1958.

[73] Hirsch C. *Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 1: Fundamentals of Numerical Discretization*. John Wiley and Sons, 1988.

[74] Hirsch C. *Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. John Wiley and Sons, 1990.

[75] S. Muzajerifa. *Adaptive finite volume method for flow predictions using unstructured meshes and multigrid approach*. PhD thesis, University of London, 1994.

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

[77] JP Van Doormaal and GD Raithby. Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical heat transfer*, 7(2):147–163, 1984.

ANEXOS

Anexo A

Esquemas de diferenciación *upwind* y centrado

En esta sección se dan detalles de las aproximaciones *upwind* (UDS), centrado (CDS) y de *blending* UDS-UDS, que se utilizan en la discretización del término convectivo en la ecuación de balance mecánico.

A.1. Esquema *upwind*

Aproximar a ϕ_e por su valor en el nodo *aguas arriba* (*upwind*) es equivalente a usar una aproximación hacia atrás (*backwards*) o hacia adelante (*forward*), dependiendo de la dirección del flujo a través de esa cara.

En el UDS se aproxima a ϕ_e como:

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P, \text{ si } (\vec{v} \cdot \hat{n})_e > 0 \\ \phi_E, \text{ si } (\vec{v} \cdot \hat{n})_e < 0 \end{cases} \tag{A.1.1}$$

Entre las características que muestra este esquema [6], se destaca el hecho de que incondicionalmente presenta resultados acotados y por lo tanto nunca conducirá a soluciones oscilatorias. Como contrapartida, la forma en que logra esto es por tener *difusión numérica*, como se pasa a explicar.

El desarrollo de ϕ_e en series de Taylor en torno a P para el caso $(\vec{v} \cdot \hat{n})_e > 0$ es:

$$\phi_e = \phi_P + (x_e - x_P) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_P + \frac{(x_e - x_P)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_P + H, \tag{A.1.2}$$

donde H representa términos de mayor orden.

La aproximación UDS sólo retiene el primer término a la derecha de este desarrollo, siendo entonces un esquema de primer orden y término principal del error de truncamiento tiene la forma de flujo difusivo $\Gamma_e \left(\partial\phi/\partial x\right)_e$. Sustituyendo este término en la Ec. 3.18, el coeficiente de difusión numérica (también conocido como coeficiente de difusión *falsa* o *artificial*) es $\Gamma_e^{num} = (\rho u)_e \, \Delta x/2$, donde Δx es el paso de malla y u la componente de $\vec{v}$ según x.

La difusión numérica se ve magnificada si el flujo es oblicuo a la malla y en ese caso el error de truncamiento provoca difusión tanto en la dirección normal al flujo como en la dirección del flujo. Este tipo de error hace que picos o variaciones rápidas de las variables sean suavizadas y, como la tasa de reducción del error es sólo de primer orden, se deberán usar mallas muy finas para obtener soluciones precisas.

A.2. Esquema centrado

Otra sencilla aproximación para los valores en las caras de celda es la interpolación lineal entre los dos nodos más próximos. En el centro de cara e sobre una malla cartesiana tenemos:

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P \left(1 - \lambda_e\right), \tag{A.2.3}$$

donde el factor de interpolación lineal λ_e se define como:

$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \tag{A.2.4}$$

Si usamos el desarrollo de Taylor de ϕ_E en torno del punto x_P para eliminar la primera derivada en la Ec. A.1.2, se obtiene:

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P \left(1 - \lambda_e\right) - \frac{\left(x_e - x_P\right)\left(x_E - x_e\right)}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_P + H, \tag{A.2.5}$$

de donde concluimos que la Ec. A.2.3 es una aproximación de segundo orden en precisión, ya que el término líder en el error de truncamiento es proporcional al cuadrado del paso de malla.

Al se una aproximación de orden mayor que uno, este esquema puede producir soluciones oscilatorias [6]. Existen condiciones para que no se generen

tales oscilaciones, como ser en función del número de Peclet [8] o el criterio de Scarborough [72]

El esquema CDS asume perfil lineal de ϕ entre P y E, que conduce a la aproximación más simple para el gradiente, $(\partial\phi/\partial x)_e \approx (\phi_E - \phi_P)/(x_E - x_P)$. Así se puede reescribir la Ec. A.2.3 como:

$$\phi_e = \phi_P + (\partial\phi/\partial x)_e (x_E - x_P) \tag{A.2.6}$$

La Ec. A.2.6 puede ser mejorada para el caso de mallas no ortogonales usando la propuesta del trabajo de Lilek *et al.* (1997) [11]. Para esto, se define un parámetro análogo al de la Ec. A.2.4:

$$\alpha_{PE} = \frac{\left|\overrightarrow{Pe}\right|}{\left|\overrightarrow{Pe}\right| + \left|\overrightarrow{eE}\right|}, \tag{A.2.7}$$

y, basándonos en el esquema de la Fig. A.1, la Ec. A.2.3 nos da el valor del campo en cierto punto e' sobre la línea que une a los nodos P y E:

$$\phi_{e'} = \phi_E \cdot \alpha_{PE} + \phi_P \cdot (1 - \alpha_{PE}) \tag{A.2.8}$$

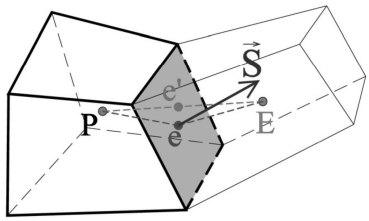


Figura A.1: Esquema del elemento de volumen P con vecino E (adaptado de [3]).

Si e coincidiera con e', la Ec. A.2.8 sería una aproximación de segundo orden para el ϕ_e. De caso contrario, la aproximación necesita de una corrección para mantener el segundo orden de aproximación. En el trabajo de Lilek se sugiere realizar el siguiente:

$$\phi_e \approx \phi_{e'} + (\nabla\phi)_{e'} \cdot \overrightarrow{e'e}, \tag{A.2.9}$$

donde el valor de $(\nabla\phi)_{e'}$ se aproxima usando la Ec. A.2.8 y los gradientes en los centros de celda:

$$(\nabla\phi)_{e'} \approx (\nabla\phi)_E \cdot \alpha_{PE} + (\nabla\phi)_P \cdot (1 - \alpha_{PE}) \tag{A.2.10}$$

A.3. *Blending* de los esquemas *upwind* y centrado

Debido a los problemas que el esquema CDS puede generar en las soluciones, en muchas ocasiones se opta por utilizar el esquema UDS en lugar de esquemas de mayor orden. Una alternativa para evadir el problema es el procedimiento de *corrección diferida* sugerido por primera vez por Khosla y Rubin (1974) [9]. Como se explicó en la Sec. 2.4, la técnica consiste en usar valores aproximados con UDS (aproximación implícita) y corregirlos con la diferencia entre el esquema UDS y el equema CDS, tomados en la iteración externa previa (aproximación explícita):

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P + \left\{\gamma_{CDS}\left(\partial\phi/\partial x\right)_e\left(x_e - x_P\right)\right\}^{old}, \text{ si } \left(\vec{v}\cdot\hat{n}\right)_e > 0 \\ \phi_E + \left\{\gamma_{CDS}\left(\partial\phi/\partial x\right)_e\left(x_e - x_E\right)\right\}^{old}, \text{ si } \left(\vec{v}\cdot\hat{n}\right)_e < 0 \end{cases} \tag{A.3.11}$$

donde γ_{CDS} es el *factor de blending*, que toma valores entre cero (esquema UDS puro) y uno (esquema CDS puro). El término con la etiqueta *old* es la resta de las Ecs. A.1.1 y A.2.6, que se calcula en la previa iteración externa.

Al ser una técnica de corrección diferida, la solución a la que converge el método es de segundo orden de precisión, y las propiedades de convergencia serán las de una aproximación de primer orden.

Anexo B

Esquema de Euler para la derivada temporal

En esta sección exponemos el método de discretización para resolver la evolución temporal de la ecuación del problema. Según el esquema utilizado, se ven afectadas propiedades como la estabilidad del método, que se describe en la Sec. B.1, o surgen restricciones sobre la elección del paso de malla y paso temporal del esquema. Entre los esquemas más utilizados se encuentran el *forward* Euler y el *backward* Euler, que se detallan en las Secs. B.2 y B.3 respectivamente. En el código CAFFA3D.MBRI se implementa el esquema de *backward* Euler, como se explica en la Sec. 3.5.

B.1. Estabilidad del esquema de Euler

El concepto de estabilidad, que fue introducido en la Sec. 2.1, relaciona la solución actualmente computada ($\widetilde{\phi}$) con la solución exacta (ϕ) de la ecuación original discretizada [5]. Existe una variedad de formas de definir estabilidad, cuya elección depende de propósito con que se use. Aquí nos centraremos en una definición simple, pero que es suficiente para nuestro análisis. Diremos que un esquema de discretización es *estable* si el error de la solución $\left|\widetilde{\phi}_P^n - \phi_P^n\right|$ es acotado en todo el dominio del problema y para cualquier paso temporal, donde n representa el paso temporal ($t^n = n\Delta t$) y P es un nodo arbitrario de la malla de cálculo.

Para probar la estabilidad de un esquema, se investiga cómo pequeñas perturbaciones (por ejemplo, causadas por errores de redondeo) influyen en los

pasos temporales siguientes. La pregunta importante aquí es, si las perturbaciones son amortiguadas por el esquema de discretización (método estable) o no (método inestable). Existen muchas técnicas para hacer ese análisis [6, 5], siendo los más comunes: el análisis de von neumann, el método matricial, y el método de pequeñas perturbaciones (método perturbativo).

Para mostrar los efectos esenciales, aquí nos limitaremos a hacer consideraciones sobre un problema típico, que es el de convección-difusión unidimiensional:

$$\rho\frac{\partial\phi}{\partial t}+\rho u\frac{\partial\phi}{\partial x}-\Gamma\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}=0, \tag{B.1.1}$$

con Γ (coeficiente de difusividad), ρ (densidad) y u (velocidad) constantes en el dominio del problema $[0, L]$. Con las condiciones de borde $\phi(0)=\phi_0$ y $\phi(L)=\phi_L$, cuando $t\to\infty$ la solución tiende a la función estacionaria:

$$\phi(x)=\phi_0+\frac{e^{x\mathrm{Pe}/L}-1}{e^{\mathrm{Pe}}-1}\left(\phi_L-\phi_0\right), \tag{B.1.2}$$

donde Pe es el número de Peclet, que se define como:

$$\mathrm{Pe}=\frac{\rho uL}{\Gamma} \tag{B.1.3}$$

Dos números característicos para consideraciones sobre estabilidad en problemas de transporte son el *número de difusión* D y el *número de Courant* C, que se definen como:

$$D=\frac{\Gamma\Delta t}{\rho\Delta x^2}\quad y\quad C=\frac{u\Delta t}{\Delta x} \tag{B.1.4}$$

D es la razón del paso temporal Δt sobre el tiempo característico de difusión $\rho\left(\Delta x\right)^2/\Gamma$, que equivale al tiempo requerido para que una perturbación sea propagada una distancia Δx por difusión. C es la razón del paso temporal Δt respecto al tiempo característico de convección, $u/\Delta x$, que es el tiempo requerido para que una perturbación sea advectada por una distancia Δx.

En las siguientes secciones se utilizan estos parámetros para discutir la estabilidad y aspectos principales de los esquemas *forward* Euler y *backward* Euler, que son los métodos más simples para resolver problemas de valor inicial.

B.2. Esquema de Euler explícito (forward Euler)

El método explícito de Euler es el esquema de discretización temporal más simple, y evalúa todos los flujos y fuentes usando únicamente los valores conocidos en el instante t^n.

Cuando se utiliza un esquema centrado (Sec. A.2) para discretizar ambos flujos, convectivo y difusivo, el análisis de estabilidad da [6]:

- Si $D = 0$ (no hay difusión), el método es incondicionalmente inestable
- Si $C = 0$ (no hay convección), el método es estable sólo si $D < 1/2$, es decir, el método es condicionalmente estable

En general, el método es estable cuando $D < 1/2$ y $C < 2D$. La primera condición restringe la elección del paso temporal a $\Delta t < \frac{\rho(\Delta x)^2}{2\Gamma}$. La segunda condición, si bien no impone un límite sobre la elección del paso temporal, da la relación entre los coeficientes de convección y de difusión $\frac{\rho u \Delta x}{\Gamma} < 2$, que es la condición de que el número de Peclet local, definido como $\mathrm{Pe}_L = (\rho u \Delta x)/\Gamma$, sea menor que 2 en todas las celdas.

En 1920 Courant y Friedrichs sugirieron de que el problema puede ser solventado si se utiliza un esquema UDS para el flujo convectivo, manteniendo un esquema CDS para el flujo difusivo. Bajo esas consideraciones se obtiene:

$$\phi_P^{n+1} = D\phi_E^n + (D + C)\,\phi_W^n + (1 - 2D - C)\,\phi_P^n \tag{B.2.5}$$

Las características del problema físico implican que si ϕ_P^n aumenta, ϕ_P^{n+1} también debe aumentar. Para ver esto, supongamos que ϕ representa la temperatura absoluta de una sustancia, es decir, ϕ no puede tomar valores negativos. Por un lado, debido a la difusión, un incremento de la temperatura en alguno de los puntos x_W (vecino de P hacia la izquierda), x_P o x_E (vecino de P hacia la derecha) en el instante t^n debería aumentar la temperatura en el punto x_P en el instante t^{n+1}. Lo mismo se puede decir para los puntos x_W y x_P respecto a la convección, asumiendo $u > 0$. En general, este comportamiento uniforme de ϕ_P^n y ϕ_P^{n+1} sólo puede ser garantizado si todos los términos de la Ec. B.2.5 son positivos. Como C y D son positivos por definición, el único término que puede ser negativo es $(1 - 2D - C)$. Esta condición introduce una limitación

en la elección del paso temporal:

$$\Delta t < \frac{\rho \Delta x^2}{2\Gamma + \rho u \Delta x} \tag{B.2.6}$$

Un análisis de estabilidad mediante el método de von Neumann también conduce al resultado anterior [73, 74].

En particular, existen dos situaciones particulares para la condición de la Ec. B.2.6, que son el de difusión pura ($u = 0$) y el de convección pura ($\Gamma = 0$), que conducen respectivamente a:

$$\Delta t < \frac{\rho \Delta x^2}{2\Gamma} \quad y \quad \Delta t < \frac{\Delta x}{u} \tag{B.2.7}$$

La segunda condición se conoce en la literatura como condición CFL (Courant, Friedrichs y Levy). La interpretación física de estas condiciones es que el paso temporal debe ser suficientemente pequeño, de manera que, debido al transporte difusivo o convectivo, la información de la distribución de ϕ no se propague más allá del siguiente punto nodal en un paso sólo temporal.

B.3. Esquema de Euler implícito (backward Euler)

El esquema de Euler implícito o hacia atrás (*backward*) para una ecuación diferencial ordinaria $\dot{\phi} = f(t, \phi)$ para el paso temporal t^{n+1} es:

$$\phi_P^{n+1} = \phi^n + \Delta t \cdot f(t^{n+1}, \phi^{n+1}) \tag{B.3.8}$$

Aplicando esta técnica a la Ec. B.1.1, usando nuevamente un esquema UDS para el flujo convectivo y un esquema CDS para el flujo difusivo, se obtiene:

$$(1 + 2D + C)\,\phi_P^{n+1} = D\phi_E^{n+1} + (D + C)\,\phi_W^{n+1} + \phi_P^n \tag{B.3.9}$$

En la Ec. B.3.9 todos los coeficientes son positivos, por lo que no se esperan problemas relativos a un cambio no uniforme de ϕ. Un análisis de estabilidad detallado (como puede ser mediante el método de von Neumann) muestra que este método es incondicionalmente estable, independientemente del paso temporal utilizado [6].

Utilizando métodos implícitos, todas las variables en el nuevo paso temporal se encuentran acopladas, lo que precisamente permite que un cambio del valor del campo en una determinada posición se pueda esparcir instantáneamente sobre todo el dominio. Por lo tanto, no existen restricciones para la elección del paso temporal y estos pueden ser adaptados de manera en tiempo de ejecución para alcanzar la precisión que se desee. Sin embargo, precisamente este acoplamiento entre las variables conlleva un mayor esfuerzo de cómputo para su resolución en cada paso temporal. Este hecho igualmente es compensado gracias a la posibilidad de usar pasos temporales más grandes (por ejemplo, para resolver problemas estacionarios, donde solo es de interés el valor final del campo) que con el esquema de Euler explícito.

Anexo C

Aproximación para flujos difusivos

El flujo difusivo de un campo escalar ϕ con coeficiente de difusividad Γ, través de la cara e de una celda de cálculo es:

$$F_e^d = \int_{S_e} \Gamma \left(\nabla\phi\right) \cdot \hat{n} dS, \tag{C.1}$$

que se puede aproximar por:

$$F_e^d \approx \left(\Gamma \nabla\phi \cdot \hat{n}\right)_e S_e = \Gamma_e \left(\frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_e S_e, \tag{C.2}$$

siendo n la dirección normal a la cara de celda y S_e su superficie.

La aproximación CDS más simple para esta derivada es:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{\left|\overrightarrow{PE}\right|}, \tag{C.3}$$

donde $\left|\overrightarrow{PE}\right|$ es la distancia entre los nodos E y P.

Esta aproximación no considera la posible no ortogonalidad de la malla y debe ser corregida. En particular, cuando la línea que conecta a los nodos P y E es prácticamente ortogonal a la cara e, la derivada con respecto a n puede ser aproximada por la derivada con respecto a la coordenada ξ, que es la coordenada en la dirección de dicha línea. Por lo tanto, se puede utilizar

una aproximación CDS implícita para el flujo (ver Ec. C.3):

$$F_e^d = \Gamma_e S_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_e = \Gamma_e S_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\left|\overrightarrow{PE}\right|} \tag{C.4}$$

Muzajerifa (1994) [75] propuso agregar un término de corrección diferida que contenga la diferencia entre los gradientes en las direcciones ξ y n, de manera que se active en caso de que la malla no sea ortogonal. El término explícito que se propone agregar al flujo difusivo es:

$$F_e^d = \Gamma_e S_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_e + \Gamma_e S_e \left[\overline{\left(\frac{\partial \phi}{\partial n}\right)_e} - \overline{\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_e}\right]^{old}, \tag{C.5}$$

donde las derivadas contenidas en el término explícito en las direcciones n y ξ se definen como:

$$\overline{\left(\frac{\partial \phi}{\partial n}\right)_e} = \overline{(\nabla \phi)_e} \cdot \hat{n}; \quad \overline{\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)_e} = \overline{(\nabla \phi)_e} \cdot \frac{\overrightarrow{PE}}{\left|\overrightarrow{PE}\right|}, \tag{C.6}$$

siendo que la barra sobre los términos indican que son calculados mediante interpolación.

La expresión final para el flujo difusivo a través de la cara de celda e puede ser ahora escrita:

$$F_e^d = \Gamma_e S_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\left|\overrightarrow{PE}\right|} + \Gamma_e S_e \overline{(\nabla \phi)}_e^{old} \cdot \left(\hat{n} - \frac{\overrightarrow{PE}}{\left|\overrightarrow{PE}\right|}\right), \tag{C.7}$$

donde la corrección diferida es cero cuando las direcciones n y ξ coinciden, como es requerido. Si la no ortogonalidad no es severa, este término es pequeño comparado con el término implícito, y la convergencia del método implícito no es afectado sustancialmente.

Anexo D

Método SIMPLE

El sistema de ecuaciones algebraicas que se obtiene de la discretización de la ecuación de balance mecánico en el paso temporal $n+1$ para el punto P es de la forma:

$$A_P^{u_i} u_{i,P}^{n+1} + \sum_l A_l^{u_i} u_{i,l}^{n+1} = Q_{u_i}^{n+1} - \Delta\Omega \left(\frac{\delta p^{n+1}}{\delta x_i} \right)_P , \tag{D.1}$$

donde $i = 1, 2, 3$ indica la componente de la velocidad y la sumatoria es sobre los nodos vecinos a P que intervienen en la discretización. El término fuente $Q_{u_i}^{n+1}$ es un término explícito, calculado a partir de los campos de la iteración externa previa, al igual que los coeficientes $A_P^{u_i}$ y $A_l^{u_i}$. El término correspondiente a la presión fue escrito aquí como una diferencia simbólica para enfatizar la independencia del método de resolución de la ecuación respecto de la aproximación que se haya elegido para las derivadas espaciales. El factor $\Delta\Omega$ (volumen de celda) surge del cálculo de la integral de superficie correspondiente con el teorema de Gauss (como en la Ec. 3.16).

En la iteración externa m-ésima de este proceso iterativo de actualización de los campos para el paso temporal $n+1$, podemos reescribir la Ec. D.1 como:

$$A_P^{u_i} u_{i,P}^{m*} + \sum_l A_l^{u_i} u_{i,l}^{m*} = Q_{u_i}^{m-1} - \Delta\Omega \left(\frac{\delta p^{m-1}}{\delta x_i} \right)_P , \tag{D.2}$$

donde u_i^m representa a la estimación de la solución u_i^{n+1} en la iteración actual. Como las velocidades de la Ec. D.2 aún no verifican la ecuación de continuidad, las denotamos como u_i^{m*}. Es decir, aún deben ser corregidas para verificar la ecuación de continuidad discretizada.

Despejando $u_{i,P}^{m*}$ de la Ec. D.2, se obtiene:

$$u_{i,P}^{m*} = \frac{Q_{u_i}^{m-1} - \sum_l A_l^{u_i} u_{i,l}^{m*}}{A_P^{u_i}} - \frac{\Delta\Omega}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\delta p^{m-1}}{\delta x_i} \right)_P , \tag{D.3}$$

que reescribimos como:

$$u_{i,P}^{m*} = \widetilde{u}_{i,P}^{m*} - \frac{\Delta\Omega}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\delta p^{m-1}}{\delta x_i} \right)_P , \tag{D.4}$$

donde el campo de velocidades $\widetilde{u}_{i,P}^{m*}$ corresponde a la solución del sistema sin considerar la contribución de la presión. Sin embargo, como el método es implícito, esa no sería igual a la velocidad que se obtendría si se quita el gradiente de presión en la Ec. D.2.

La velocidad debe verificar la Ec. D.4 pero para los campos corregidos, es decir:

$$u_{i,P}^{m} = \widetilde{u}_{i,P}^{m} - \frac{\Delta\Omega}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\delta p^{m}}{\delta x_i} \right)_P , \tag{D.5}$$

donde:

$$\widetilde{u}_{i,P}^{m} = \frac{Q_{u_i}^{m-1} - \sum_l A_l^{u_i} u_{i,l}^{m}}{A_P^{u_i}} \tag{D.6}$$

En lugar de usar $\widetilde{u}_{i,P}^{m}$ en la Ec. D.5, el método SIMPLE lo aproxima por $\widetilde{u}_{i,P}^{m*}$ y luego aplica la ecuación de continuidad para corregir la solución. Por lo tanto, la relación de la que se parte entre los campos de velocidad y presión corregidos es:

$$u_{i,P}^{m} = \widetilde{u}_{i,P}^{m*} - \frac{1}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\delta p^{m}}{\delta x_i} \right)_P \tag{D.7}$$

Sustituyendo esta expresión de u_i^m en la ecuación de continuidad:

$$\frac{\delta u_i^m}{\delta x_i} = 0, \tag{D.8}$$

se obtiene la ecuación discretizada de Poisson para la presión:

$$\frac{\delta}{\delta x_i} \left[\frac{\rho\Delta\Omega}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\delta p^{m}}{\delta x_i} \right) \right]_P = \left[\frac{\delta \left(\rho \widetilde{u}_i^{m*} \right)}{\delta x_i} \right]_P \tag{D.9}$$

Aquí las derivadas dentro de los paréntesis rectos están discretizadas de la misma manera que en las ecuaciones del momento, mientras que las derivadas afuera de dichos paréntesis son aproximadas de igual manera de la que fueron discretizadas en la ecuación de continuidad (ya que provienen de su

discretización).

Por lo tanto, la solución de esta ecuación es el campo de presiones corregido, que luego se debe sustituir en la Ec. D.7 para obtener la velocidad corregida para la iteración m-ésima (u_i^m). Esta velocidad verifica la ecuación de continuidad pero no la ecuación de balance mecánico. Se comienza así una nueva iteración externa para hallar $u_{i,P}^{(m+1)*}$, solución de la ecuación de balance mecánico, y corregirlo a $u_{i,P}^{(m+1)}$ luego a partir de la ecuación de continuidad.

Métodos de este tipo, donde primero se construye un campo de velocidades que no satisface la ecuación de continuidad y que luego es corregido sustrayéndole otro campo (usualmente el gradiente de presiones), se conocen como *projection methods* [76]. En uno de los métodos más comunes de este tipo, en lugar de usar la presión actual (p^m) en la Ec. D.7, se trabaja directamente con correcciones de la presión. Las correcciones u' y p', en la velocidad y presión respectivamente, se definen como:

$$\begin{aligned} u_i^m &= u_i^{m*} + u_i' \\ p^m &= p^{m-1} + p' \end{aligned} \tag{D.10}$$

Sustituyendo estas expresiones en la Ec. D.5, se obtiene:

$$u_{i,P}' = \widetilde{u}_{i,P}' - \frac{\Delta\Omega}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\delta p'}{\delta x_i} \right)_P , \tag{D.11}$$

donde $\widetilde{u}_i'$ está definido como:

$$\widetilde{u}_{i,P}' = -\frac{\sum_l A_l^{u_i} u_{i,l}'}{A_P^{u_i}}, \tag{D.12}$$

Aplicando la ecuación de continuidad discretizada a la velocidad corregida u_i^m (con $u_i^m = u_i^{m*} + u_i'$) y usando la Ec. D.11 (para u_i'), obtenemos la siguiente ecuación para la corrección de la presión:

$$\frac{\delta}{\delta x_i} \left[\frac{\rho\Delta\Omega}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\delta p'}{\delta x_i} \right) \right]_P = \left[\frac{\delta \left(\rho u_i^{m*} \right)}{\delta x_i} \right]_P + \left[\frac{\delta \left(\rho \widetilde{u}_i' \right)}{\delta x_i} \right]_P \tag{D.13}$$

Sin embargo, no es posible hallar p' de la Ec. D.13 porque las velocidades $\widetilde{u}_i'$ son desconocidas en este punto. El procedimiento habitual es omitir este término, aunque no existe un argumento sólido que lo justifique y probablemente sea la causante de la lenta convergencia del método. Con esta aproxi-

mación, se resuelve la Ec. D.13 para obtener las correcciones en la presión y luego se calculan las correcciones en las velocidades con la siguiente relación:

$$u'_{i,P} = -\frac{\Delta\Omega}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\delta p'}{\delta x_i}\right)_P \tag{D.14}$$

Se sustituyen las correcciones calculadas en las Ecs. D.10 para obtener los campos de velocidades y de presión corregidos. Este método es conocido como el algoritmo SIMPLE (Caretto *et al.*, 1972 [13]).

Existen métodos alternativos, como el SIMPLEC desarrollado por Van Doormal y Raithby (1984) [77], que manipula la ecuación de balance de momento mecánico de diferente manera para que los términos omitidos en ese caso sean menos significativos que los omitidos por el método SIMPLE.