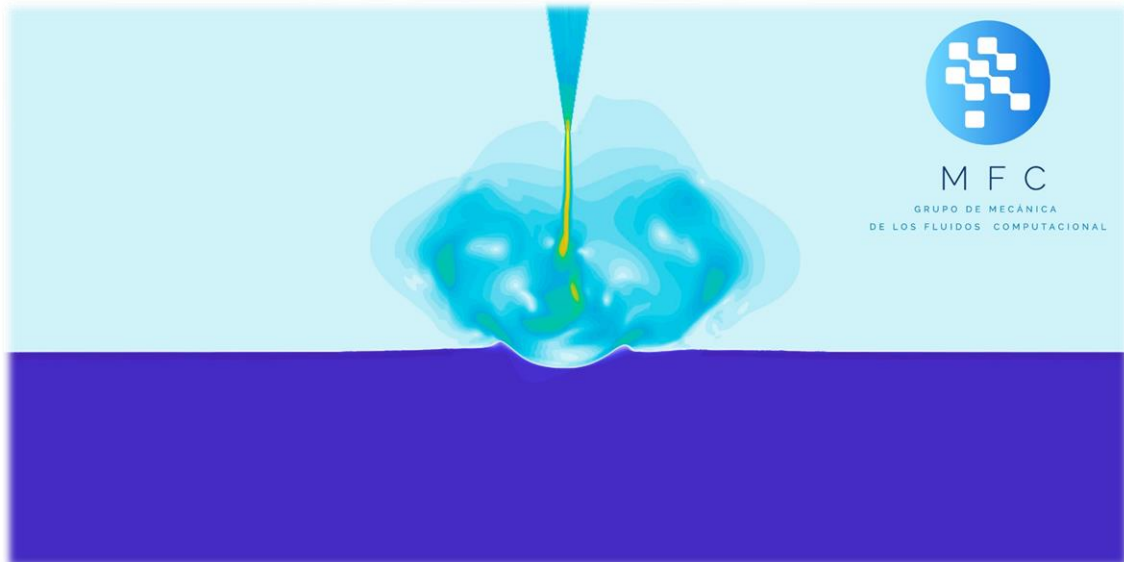




UNIVERSIDAD
DE LA REPÚBLICA
URUGUAY



**SIMULACION NUMERICA DE FLUJOS FLUIDO PARTICULA MEDIANTE LA
IMPLEMENTACION DE UN MODELO EULERIANO DE UNA SOLA FASE.**



MAG. MARIANA MENDINA GOURGUES

TUTOR: DR. GABRIEL USERA VELASCO

Doctorado en Ingeniería en Mecánica de los Fluidos Aplicada.

Instituto de Mecánica de los Fluidos e Ingeniería Ambiental.

Facultad de Ingeniería – Universidad de la República.

12 de Julio de 2018.

RESUMEN

En las últimas décadas la Dinámica de los Fluidos Computacional (CFD) ha cobrado una gran relevancia gracias a la ampliación de su rango de aplicabilidad, consecuencia parcial del fuerte aumento de la capacidad de cómputo así como del desarrollo de valiosas herramientas computacionales. χ

En particular, la combinación de los CFD con modelos de dispersión de partículas ha resultado de valiosa utilidad para la comunidad científica, área en la que se enfoca este trabajo de tesis. El transporte de partículas es probablemente uno de los desafíos más complejos e importantes dentro de la dinámica de fluidos y su relación con el flujo, aún para casos simples, no está completamente comprendida en la actualidad.

El objetivo de esta propuesta consiste en enriquecer las capacidades del código CFD-caffa3d de manera de mejorar su competencia para la resolución numérica del transporte de partículas inmersas en un flujo turbulento. El modelo elegido para representar el material particulado fue presentado previamente por Lalli et al. 2005 y considera el sistema fluido-partículas como un cuerpo pseudo-continuo de una sola fase, analizando el movimiento de éste en su conjunto considerando la interacción fluido-partícula en términos de una viscosidad efectiva que depende de las características locales de la fracción volumétrica de éstas. Esta viscosidad está definida por medio de esquemas Newtoniano y no Newtoniano ligados adecuadamente, de manera de representar tanto materiales puramente fluidos, como fluidos con material en suspensión (de mayor o menor concentración) y hasta sedimentos con un alto grado de empaquetamiento.

Para la validación del modelo se eligieron una serie de experimentos numéricos y de laboratorio desarrollados y documentado previamente por otros autores: el estudio del desmoronamiento del talud de una presa, la sedimentación de arena en una mezcla de agua y arcilla, y finalmente la erosión generada sobre un lecho de arena causada por chorros verticales turbulentos y sumergidos de forma circular y plana.

A partir del análisis de resultados se ha evidenciado que el modelo logra representar adecuadamente los diferentes procesos físicos predominantes en los ejemplos elegidos con una buena concordancia cuantitativa en varios aspectos. Se ha observado que, si bien excede el alcance de este trabajo, la traducción de los parámetros que caracterizan al sedimento hacia los parámetros numéricos del modelo es un aspecto que debe ser profundizado. Se puede concluir que los objetivos propuestos han sido cumplidos satisfactoriamente, logrando la implementación de un modelo que utiliza sobre la base de volúmenes finitos un esquema implícito de alta resolución para la discretización de las ecuaciones así como esquemas LES para la parametrización de la turbulencia.

NUMERICAL SIMULATION OF PARTICULATE FLOWS THROUGH THE IMPLEMENTATION OF OF A SINGLE PHASE EULERIAN MODEL.

ABSTRACT

The capabilities of Computational Fluid Dynamics (CFD) methods have been greatly enhanced in recent decades, due to the development of better methods and the greater computational power available.

The coupling between CFD methods and particle transport models, has become a valuable tool for the research community in this subject. Particle transport by fluid is probably one of the most difficult and involved subjects among fluid dynamics, with many important issues in this field still to be fully understood.

The main purpose in this thesis work was to advance the capabilities of the in house CFD code `caffa3d`, so to include effective numerical modeling of particle transport by turbulent fluid flow. To reach this goal an Eulerian mixture model was selected, wherein particles are not addressed individually but rather as a whole, incorporating their effect on the behavior of the mixture by means of an effective local viscosity.

A single phase continuum particle transport model, previously presented by Lalli et al. 2005, was chosen, where effective viscosity is computed for a Newtonian and a non-Newtonian regime, properly bounded, allowing for simulating a broad range of particle concentrations in the flow, from light suspension mixtures to heavily compacted sediment beds.

The validation of the code and the assessment of its capabilities was addressed through a series of numerical experiments set up to reproduce the previous work of other authors : a dam break problem, settling of sand grains in water, and local scour caused by an impinging jet on a sand sediment bed.

The results achieved for these application examples, show that the model adequately represents the different physical processes that drive the evolution of the fluid - particle mixture in these cases, reaching a good quantitative match with the results previously reported in the bibliography.

The tuning of model parameters representing the mechanical behaviour of the sediment still requires further work and will be addressed in ongoing research.

The proposed goals have been reached, delivering a finite volume based model, with a time implicit, high spatial resolution discretization scheme, coupled with a large eddy parametrization of turbulence.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo de tesis de doctorado en Ingeniería, en Mecánica de los Fluidos Aplicada, tuvo lugar en el marco de los trabajos de investigación del grupo de Mecánica de los Fluidos Computacional (MFC) del Instituto de Mecánica de los Fluidos e Ingeniería Ambiental (IMFIA) de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la República. Sin embargo, su desarrollo ha sido posible también gracias a otras instituciones y personas que han brindado su apoyo para que este trabajo llegue a su término. Disponer de un espacio para expresar mi agradecimiento hacia ellas me resulta indispensable y a su vez me reporta un verdadero placer.

En primer lugar quiero agradecer a Gabriel Usera, quien ha actuado como tutor de esta tesis y por quien siento una profunda admiración no sólo como investigador sino también como persona. Su confianza en mi trabajo, su vocación docente y su altruismo han resultado para mí un invaluable aporte. Su profundo conocimiento en la Mecánica de los fluidos, y la “inquietante” capacidad para generar nuevas ideas y plasmarlas en resultados son cualidades que no dejan de sorprenderme, y que sin dudas han nutrido a este trabajo. Agradezco además esa capacidad para “mirar siempre el vaso medio lleno” y el entusiasmo para desafiar dificultades que me han ayudado a dar batalla a más de una frustración a lo largo de este camino.

Quisiera agradecer también a todos los compañeros del IMFIA, en particular a aquellos docentes con los que comparto tareas de docencia y a los integrantes del MFC que han colaborado significativamente con este trabajo cediendo espacios que facilitaron su desarrollo. Doy un sentido agradecimiento a varios compañeros que en lo cotidiano han colaborado con mi formación académica, especialmente a Julio Borghi, Alvaro Díaz y Gabriel Pisciotto. Otros compañeros del Instituto, con los que no compartimos necesariamente tareas comunes, han actuado gentilmente como “orejas de descarga” en malos ratos, me han sabido dar algún merecido rezongo pero sobre todo palabras de aliento; muchas gracias a Jimena, a Mónica y muy especialmente a Martín. Su incorporación al MFC y a la oficina en particular han nutrido mis días de trabajo; gracias por la paciencia, por la ayuda siempre desde un lugar de humildad y por tantas charlas valiosas de Mecánica de los Fluidos, de la vida y de pañales!.

Este trabajo es también fruto del apoyo y el reconociendo de muchas otras personas que sin estar directamente vinculadas al trabajo me alimentan cotidianamente como investigadora y como persona. Quisiera destacar el apoyo familiar que siempre he tenido. En particular agradezco a mis padres, Gladys y José Pedro por estar siempre, por haber sido ejemplo de perseverancia, por el gran esfuerzo que han realizado para darme la educación que hoy me ha permitido llegar hasta aquí, y por ponerle tanto amor, junto con Margot, al cuidado de mi hijo Lautaro en esos ratos en los que no puedo estar físicamente presente.

La compañía de algunas personas que saben “acariciar el alma” me ha sido de muchísima ayuda para recobrar el aliento en esas oportunidades de crecimiento que nos da la vida disfrazadas de malos ratos. Gracias profundamente a Poli, Hortencia, Roberto, Chochi, Roxana, Malu y Sole.

Quisiera darte un enorme gracias a ti Nazareno, mi eterno compañero de todos los días y de todas las circunstancias. Sin tu amor, tu apoyo, tu paciencia y tu comprensión esto directamente no habría sido posible. El habernos convertido en padres en el medio de este camino ha sido el mayor reto para llegar a destino, pero que finalmente lo ha llenado de nuevos matices. Y mi agradecimiento es sobre todo para ti Lautaro, por ese tiempo cedido que no logras comprender, y porque sin saberlo te has convertido en mi fuente más profunda de energía e inspiración. El empezar y terminar cada día con tu cariño, tus abrazos y tus “mimos del corazón” me desafía a hacer que cada jornada laboral valga la pena.

Finalmente agradezco a la Comisión Sectorial de Investigación Científica y al programa 720 de la Universidad de la República por haber financiado pasantías de Investigación en el marco de este trabajo; así como a la Agencia Nacional de Investigación por la financiación de un proyecto María Viñas y un proyecto Fondo Sectorial de Energía relacionados directa o indirectamente a esta tesis.

INDICE GENERAL

1	INTRODUCCION Y ANTECEDENTES	15
1.1	Transporte de partículas en un fluido.	16
1.1.1	Método Euleriano – Lagrangiano	17
1.1.2	Método Euleriano.....	18
1.2	Objetivos del trabajo.	21
1.3	Modelos seleccionados para el desarrollo del trabajo.....	21
1.4	Principales contribuciones del trabajo	23
1.5	Contenido del documento.	23
2	EL CODIGO NUMERICO CAFFA3D.MBRI	25
2.1	Descripción general del modelo	25
2.2	Representación de la geometría.....	27
2.3	Discretización de las ecuaciones:.....	28
2.4	Paralelismo mediante MPI.....	32
2.5	Simulación de la turbulencia.....	33
2.6	Condiciones de borde inmersas.....	35
3	MODELO DE TRANSPORTE DE PARTICULAS	36
3.1	Descripción del modelo matemático.....	36
3.1.1	Ecuaciones del movimiento de la mezcla.....	36
3.1.2	Ecuación constitutiva.....	38
3.1.3	Movimiento de las partículas	39
3.2	Implementación del MFP en el caffa3d	41
3.2.1	Ecuación de cantidad de movimiento de la mezcla.	42
3.2.2	Ecuación de continuidad de χ - módulo FluidParticleLalliModel.....	45
3.2.3	Viscosidad dinámica total del material	48
4	VALIDACION DEL MODELO	49
4.1	Desmoronamiento de talud.....	50
4.2	Columna de sedimentación	66
4.3	Erosión de un lecho de arena generado por un chorro vertical sumergido....	88
4.3.1	Erosión circular	88
4.3.2	Erosión plana	105
5	RESUMEN DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES	111
6	REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	116

INDICE DE FIGURAS

<i>Figura 2.1: Hexaedro individual no regular con sus vecinos. Figura adaptada de Usera et al. 2008.</i>	27
<i>Figura 2.2: Ejemplos de uniones entre interfaces de bloques en el <i>caffa3d</i>. Figura adaptada de Usera et al 2008.</i>	27
<i>Figura 2.3: Esquema general del proceso iterativo implementado en el <i>caffa3d</i> para un paso temporal. Figura adaptada de Usera et al. 2008.</i>	31
<i>Figura 2.4: Esquema de una malla estructurada por bloques, compuesta por 4 bloques (1,2,3 y 4) en dos regiones (negro y gris), con ejemplos de interfaces intra región (intra región interfaces) e inter región (inter region interfaces). Figura adaptada de Mendina et al. 2014</i>	32
<i>Figura 2.5: Esquema de la representación de un objeto rígido de frontera Γ en una malla cartesiana mediante la implementación del método de condiciones de borde inmersas. Figura extraída de Liao et al. 2010.</i>	35
<i>Figura 3.1: Esquema general del proceso iterativo implementado en el <i>caffa3d</i> para un paso temporal incorporando el modelo de Partículas.</i>	42
<i>Figura 3.2: Diagrama general del módulo de partículas MFC.</i>	45
<i>Figura 3.3: Volumen de control 1D del esquema “donante-aceptor”.</i>	46
<i>Figura 3.4: Volumen de control 1D del esquema “donante-aceptor”. Celdas utilizadas para el NVD.</i>	46
<i>Figura 4.1: Esquema de dominio de simulación. Taludes.</i>	51
<i>Figura 4.2: Condición inicial de χ. Curvas de nivel entre 0.02 y 0.62 cada 0.1.</i>	52
<i>Figura 4.3: Evolución temporal de la simulación numérica (<i>caffa3d</i>) de la ruptura de una presa. Caso TAM201. Color: Isosuperficies de χ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.</i>	54
<i>Figura 4.4: Evolución temporal de la simulación numérica (<i>caffa3d</i>) de la ruptura de una presa. Caso TAL201.</i>	55
<i>Figura 4.5: Evolución temporal de la simulación numérica (<i>caffa3d</i>) de la ruptura de una presa. Caso TAP201. Color: Isosuperficies de χ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.</i>	56
<i>Figura 4.6: Evolución temporal de la simulación numérica (<i>caffa3d</i>) de la ruptura de una presa. Caso TAM101. Color: Isosuperficies de χ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.</i>	57
<i>Figura 4.7: Evolución temporal de la simulación numérica (<i>caffa3d</i>) de la ruptura de una presa. Caso TAM301. Color: Isosuperficies de χ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.</i>	58
<i>Figura 4.8: Evolución temporal de la simulación numérica (<i>caffa3d</i>) de la ruptura de una presa. Caso TAP101.</i>	59
<i>Figura 4.9: Evolución temporal de la simulación numérica (<i>caffa3d</i>) de la ruptura de una presa. Caso TAM205. Color: Isosuperficies de χ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.</i>	60
<i>Figura 4.10: Evolución temporal de la simulación numérica (<i>caffa3d</i>) de la ruptura de una presa. Caso TAM206. Color: Isosuperficies de χ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.</i>	61

Figura 4.11: Diferencia de la distribución de χ : Configuración final – Configuración inicial. TAM201. Taludes	62
Figura 4.12: Representación en el plano adimensionado de la evolución temporal de las simulaciones numéricas (caffa3d) de la ruptura de una presa representadas con diferentes colores por medio de la curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido)., cada color representa una simulación diferente de acuerdo a la leyenda de la figura superior izquierda. línea negra punteada: pendiente 45° representada en el plano adimensionado.	63
Figura 4.13: Perfiles de χ y μ_b en función del valor de ε para las simulaciones TAM201, TAM205 y TAM206 en la configuración final.	65
Figura 4.14: Representación esquemática de: a) la columna de sedimentación utilizada en C16 (figura extraída de C16) y b) malla de cálculo para la simulación numérica. Cada bloque se representa con un color diferente.	67
Figura 4.15: Registro fotográfico de la evolución temporal de la sedimentación de una mezcla de arcilla-arena y agua, experimento de laboratorio. Figura extraída de C16.	69
Figura 4.16: a) Valores experimentales del Factor de formación F y b) Densidad relativa de la mezcla, y la porosidad ($\alpha=1-\chi$) calculada a partir de los valores experimentales de F. Figuras adaptadas de C16.	70
Figura 4.17: Evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla simulada SED001. Sedimentadores.	71
Figura 4.18: Evolución temporal del perfil vertical de la porosidad simulada SED001. Sedimentadores.	71
Figura 4.19: Esquemización de cortes verticales en el dominio.	72
Figura 4.20: Fracción volumétrica de volumen (χ) en diferentes cortes verticales a los 30s de simulación de acuerdo al esquema de la Figura 4.19. SED001. Sedimentadores.	72
Figura 4.21: Fracción volumétrica de volumen (χ) en diferentes cortes verticales a los 120s de simulación de acuerdo al esquema de la Figura 4.19. SED001. Sedimentadores.	73
Figura 4.22: Perfiles verticales de la fracción volumétrica de volumen (χ) en diferentes instantes de tiempo. SED001. Sedimentadores.	73
Figura 4.23: Porcentaje de masa total de arena en cada instante (M) respecto de la masa total de arena inicial (Mo). Sedimentadores.	76
Figura 4.24: Evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla simulada. Análisis de sensibilidad a la malla y al paso temporal: a) Simulación base, b) malla fina, c) Δt mayor, d) Δt menor y e) Δt mayor en malla fina. Tabla 4.7. Sedimentadores.	77
Figura 4.25: Perfiles verticales de la fracción volumétrica de partículas (χ) en diferentes instantes de tiempo. Sensibilidad a la malla y al paso temporal. Cada simulación se representa en un color diferente de acuerdo a la descripción en la figura a) y Tabla 4.7. Sedimentadores.	78
Figura 4.26: Fracción volumétrica de volumen (χ) en diferentes instantes de tiempo en el corte vertical MM de acuerdo al esquema de Figura 4.19. SED101. Sedimentadores.	79
Figura 4.27: Evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla simulada. Análisis de sensibilidad a parámetros numéricos: a) Valores límite de χ para comportamiento sólido, b) LSG-iteraciones externas, c) ε y d) r_p . Tabla 4.8. Sedimentadores.	80
Figura 4.28: Perfiles verticales de la fracción volumétrica de partículas (χ) en diferentes instantes de tiempo. Sensibilidad a parámetros numéricos. Cada simulación se representa en un color diferente de acuerdo a la descripción en la figura a), Tabla 4.3 y Tabla 4.8. Sedimentadores.	81
Figura 4.29: Evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla simulada. Análisis de sensibilidad a γ_{MFP} . a) UQ y b) upwind básico Sedimentadores.	82
Figura 4.30: Fracción volumétrica de volumen (χ) para diferentes valores de γ_{MFP} en el corte vertical MM de acuerdo al esquema de Figura 4.19. y la Tabla 4.9 a 30 segundos de simulación. Sedimentadores.	83
Figura 4.31: Fracción volumétrica de volumen (χ) para diferentes valores de γ_{MFP} en el corte vertical MM de acuerdo al esquema de Figura 4.19. y la Tabla 4.9 a 120 segundos de simulación. Sedimentadores.	83
Figura 4.32: Perfiles verticales de la fracción volumétrica de partículas (χ) en diferentes instantes de tiempo (a,b) y de la viscosidad de partículas (c y d) para diferentes simulaciones de acuerdo a la tabla	

Tabla 4.9. Sensibilidad al parámetro de γ_{MFP} . Cada simulación se representa en un color diferente de acuerdo a la descripción en la figura a), Sedimentadores.	84
Figura 4.33: a) Perfiles verticales de la fracción volumétrica de partículas (χ) (a) y de la viscosidad de partículas (b) para en $T=120s$. Sensibilidad al esquema de interpolación de la presión. Cada simulación se representa en un color diferente de acuerdo a la descripción en la figura a). Sedimentadores.	86
Figura 4.34: Sedimentación de arena sobre una esfera sólida. Isosuperficies de $\chi=0.2$ (rosa) y $\chi=0.52$ (gris) en diferentes instantes de tiempo. Sedimentadores.	87
Figura 4.35: Representación esquemática de JET (prueba de erosión de chorro sumergido). Fosa circular.	88
Figura 4.36: Representación esquemática de los diferentes regímenes generados con JET. Figura extraída de A&R. Fosa circular.	90
Figura 4.37: Representación del dominio del dominio de cálculo donde cada bloque se representa con un color diferente. Fosa circular.	91
Figura 4.38: Representación esquemática de las condiciones de borde de entrada y salida del dominio en las simulaciones caffa3d. JET.	91
Figura 4.39: Perfiles de χ inicial y al finalizar la decantación de partículas y antes de activarse el JET. Fosa circular.	93
Figura 4.40: Esquema de funcionamiento de la tobera. Color: Isosuperficies del nivel del campo de velocidad vertical adimensionado respecto de U_0 , flechas: sentido del flujo en las simulaciones caffa3d. Líneas negras: tobera generada con el método de condiciones de borde inmersas. Fosa circular.	94
Figura 4.41: Perfil de la velocidad vertical a la salida de la boquilla ($Z=0.08m$) adimensionado respecto a U_0 en las simulaciones caffa3d. Fosa circular.	94
Figura 4.42 Representación esquemática del fenómeno de erosión para una simulación genérica mediante una isosuperficie de velocidad del chorro (azul) y otra de χ (rosa). Fosa circular.	95
Figura 4.43 Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación caffa3d JET001. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	96
Figura 4.44: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación caffa3d JET002. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	96
Figura 4.45: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación caffa3d JET003. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	97
Figura 4.46: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación caffa3d JET004. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	97
Figura 4.47: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación caffa3d JET005. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	98
Figura 4.48: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación caffa3d JET001. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	99
Figura 4.49: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación caffa3d JET002. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	99
Figura 4.50: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación caffa3d JET003. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos	

corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	100
Figura 4.51: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación <i>caffa3d</i> JET004. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	100
Figura 4.52: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación <i>caffa3d</i> JET005. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.	101
Figura 4.53: Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima para diferentes valores de E_c . Valores experimentales. Figura extraída de A&R. JET.Fosa circular.	102
Figura 4.54: Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima, perfil medio en los dos planos verticales centrales curvas de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido). Valores de las simulaciones <i>caffa3d</i> . Cada simulación es representada con un color diferente. JET.Fosa circular.	102
Figura 4.55: Viscosidad turbulenta (Kg/ms) para la simulación <i>caffa3d</i> JET005. JET.Fosa circular.	103
Figura 4.56: Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima. Cruces rojas: resultados de las simulaciones <i>caffa3d</i> ; línea punteada: Ajuste teórico A&R; marcadores negros: resultados experimentales de varios trabajos recopilados por A&R. La figura base es extraída de A&R. Fosa circular.	104
Figura 4.57: Representación del dominio de cálculo donde cada bloque se representa con un color diferente. Vista en planta. Fosa Plana.	106
Figura 4.58: Perfil de χ al finalizar la decantación de partículas y antes de activarse el JET. Fosa plana.	107
Figura 4.59: a) Registro fotográfico del experimento realizado por Q10. b) Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima para diferentes valores de E_c . Valores experimentales. Figuras extraídas de Q10. Fosa plana.	108
Figura 4.60 Representación esquemática del fenómeno de erosión para una simulación genérica mediante una isosuperficie de velocidad del chorro (azul) y otra de χ (rosa). Fosa plana.	108
Figura 4.61: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad y χ en la configuración asintótica para la simulación <i>caffa3d</i> JETP01. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa plana.	109
Figura 4.62: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad y χ en la configuración asintótica para la simulación <i>caffa3d</i> JETP01. Zoom en la zona de la socavación. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Esquema general JET. Fosa plana.	109
Figura 4.63: Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima, perfil medio en los planos verticales centrales curvas de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido). Valores de las simulaciones <i>caffa3d</i> . Cada simulación es representada con un color diferente. Fosa plana.	110

INDICE DE TABLAS

<i>Tabla 4.1: Parámetros utilizados en la simulación caffa3d. Taludes.</i>	51
<i>Tabla 4.2: Resolución espacial Δ y temporal Δt de la simulación caffa3d. Dimensiones del Dominio: L- Largo, B-Ancho, H-Altura. Taludes.</i>	51
<i>Tabla 4.3: Resolución espacial Δ y temporal Δt de las diferentes simulaciones caffa3d. Dimensiones del Dominio: Largo, (L), Ancho (B), Altura. (H). Análisis de sensibilidad a la resolución espacial y temporal. Taludes.</i>	53
<i>Tabla 4.4: Sensibilidad al parámetro ε de la simulación caffa3d.</i>	53
<i>Tabla 4.5: Valores de densidad y fracción volumétrica inicial de los diferentes materiales usados en los ensayos numérico caffa3d y físico C16.</i>	67
<i>Tabla 4.6: Parámetros utilizados en la simulación caffa3d. Sedimentadores.</i>	67
<i>Tabla 4.7: Tamaño de las celdas: $\Delta x \Delta x \Delta z$ y resolución temporal Δt de las diferentes simulaciones caffa3d. Dimensiones del Dominio: Lado (B), Altura. (H). Análisis de sensibilidad a la resolución espacial y temporal. Sedimentadores.</i>	76
<i>Tabla 4.8: Análisis de sensibilidad a los parámetros del modelo. Sedimentadores.</i>	79
<i>Tabla 4.9: Análisis de sensibilidad al método de resolución de la ecuación de continuidad χ.</i>	81
<i>Tabla 4.10: Parámetros numéricos de las simulaciones caffa3d. Fosa circular.</i>	92
<i>Tabla 4.11: Características del sedimento simulado con el caffa3d. Fosa circular.</i>	92
<i>Tabla 4.12: Valores de la velocidad en la boquilla y del parámetro de erosión (E_c) para las diferentes simulaciones caffa3d. Fosa circular.</i>	93
<i>Tabla 4.13: Valores experimentales empleados en Q10. Fosa plana.</i>	106
<i>Tabla 4.14: Parámetros numéricos de la simulación caffa3d. Fosa plana.</i>	106

ACRONIMOS Y ABREVIATURAS

ESPAÑOL:

CDS	Corrección Diferida de Segundo orden
CFD	Dinámica de los Fluidos Computacional
CLP	Capa Límite Planetaria
CHAMAN	Computación Heterogénea en Mecánica
DNS	Simulación Numérica Directa
EL	Euleriano Lagrangiano
LSG	Número de iteraciones externas
MFC	Grupo de Mecánica de los Fluidos Computacional
MFP	Modelo Fluido Partícula.

INGLES:

CICSAM	Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes
CPU	Central Processing Unit
DEM	Discrete Element Method
GPU	Graphics Processor Unit
JET	submerged Jet Erosion Test
LES	Large Eddies Simulation
MPI	Message Passing Interface
NVD	Normalised Variable Diagram
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
SDJR	Strongly Deflected Jet Regimen
SGS	Sub Grid Scales
UQ	Ultimate-Quicktest
VOF	Volume of Fluid
WDJR	Weakly Deflected Jet Regime
WDR	Wind Driven Rain

NOMBRES PROPIOS:

A&R	Aderibigbe y Rajaratman 1996
C16	Cuthbertson et al. 2016
L05	Lalli et al. 2005
L06	Lalli et al. 2006

SIMBOLOS

Se enumera a continuación los símbolos más utilizados en el trabajo:

\mathbf{g}	aceleración gravitatoria
\mathbf{p}	presión dinámica
p_T	presión absoluta
\mathbf{D}	tensor velocidad de deformación
ϕ	escalar pasivo
\mathbf{u}	velocidad resuelta por el cafa3d
\mathbf{v}	velocidad promedio en volumen
\mathbf{v}^p	velocidad de partícula
\mathbf{v}^f	velocidad del fluido
\mathbf{v}^r	velocidad relativa de las partículas
$\tilde{\mathbf{w}}$	velocidad de sedimentación
$\hat{\mathbf{w}}$	velocidad por re-suspensión viscosa
α	Porosidad
μ	Viscosidad dinámica
μ_T	Viscosidad turbulenta
μ_m	Viscosidad molecular
ρ	densidad de la mezcla
ρ_p	densidad de partículas
ρ_f	densidad del fluido
r_p	radio de partículas
τ^p	tensor de tensiones adicional
τ_o	tensión de fluencia del modelo de Bingham
χ	fracción volumétrica de partículas
χ_{lm}	umbral de χ que determina el comportamiento sólido
χ_{IM}	máximo valor de χ
α	porosidad
ϕ	ángulo de fricción interna
ε	parámetro numérico de desingularización
C_D	Coefficiente de Drag
η	coeficiente de difusión de la mezcla
γ_{CDS}	Coefficiente de blending para la ecuación de balance mecánico
γ_{MFP}	coeficiente de blending de la ecuación de transporte de partículas
Δ	dimensión de la celda
Δt	paso temporal

X_a	abscisa adimensionada
Z_a	ordenada adimensionada
F	factor de formación
a	coeficiente de tortuosidad
m	factor de cementación
H	espesor de la zona de mezcla con presencia de partículas
D₅₀	diámetro mediano de partículas
d	diámetro o espesor del chorro sumergido
d_{in}	diámetro o espesor superior de tobera
h	altura de impacto
U_o	velocidad en la boquilla
U_{in}	velocidad de entrada a la tobera
U_{out}	velocidad de salida
R_{ep}	Número de Reynolds de partículas
Re	Número de Reynolds
Fr	Número de Froude
E_m	máxima erosión
E	erosión
Ec	parámetro de erosión

1 INTRODUCCION Y ANTECEDENTES

La aplicación de la Dinámica de los Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) ha cobrado una gran relevancia en los últimos años. Diversos estudios se han venido desarrollando desde hace décadas con el objetivo de profundizar en la modelación, tanto teórica como experimental, de flujos asociados a diversas aplicaciones de interés ingenieril. La resolución analítica de las ecuaciones de Navier-Stokes, empleadas para el análisis de estos flujos, está limitada por su complejidad al estudio de algunos casos particulares. Si bien la componente experimental ha sido históricamente una de las herramientas de mayor utilidad en estos casos, el empleo de modelos físicos puede resultar costoso y demandar tiempos excesivos, tornándose incluso impracticable en algunas situaciones (al menos sin perturbar seriamente el flujo que se pretende estudiar). Gracias al fuerte aumento reciente de la capacidad de cómputo así como del desarrollo de herramientas computacionales, como por ejemplo la paralelización masiva, se ha conseguido una gran ampliación del espectro de aplicaciones resueltas con CFD. Estos modelos, permiten obtener soluciones numéricas aproximadas de las ecuaciones de Navier Stokes mediante diferencias finitas, volúmenes finitos, elementos finitos u otros métodos, proporcionando información detallada del patrón de flujo, siendo capaces de resolverlo explícitamente en torno a obstáculos considerando detalles específicos de un determinado emplazamiento.

La combinación de los CFD con modelos de dispersión de partículas ha resultado de valiosa utilidad para la comunidad científica, y es en esta área en la que se encuentra el foco de este trabajo de tesis. El transporte de partículas es probablemente uno de los desafíos más complejos e importantes dentro de la dinámica de fluidos y su relación con el flujo, aún para casos simples, no está completamente comprendida en la actualidad. Diferentes aplicaciones de ingeniería se han visto potenciadas con el desarrollo de estas herramientas: el estudio de la dispersión emisiones industriales, el transporte de sedimentos en una corriente de agua, la erosión del suelo entorno a estructuras, la deposición de partículas en compartimientos ventilados o sobre superficies, la explotación y operación de minas a cielo abierto o canteras etc.

Este trabajo de tesis tiene como objetivo central enriquecer las capacidades del código `caffa3d.MBRi` (`caffa3d`) de manera de mejorar su competencia para la resolución numérica del transporte de partículas inmersas en un flujo turbulento. El modelo `caffa3d` es un código CFD de desarrollo nacional, gestado en el seno del Grupo de Mecánica de los Fluidos Computacional - MFC (grupo donde se enmarca este trabajo de tesis) en colaboración con la Universidad de Rovira i Virgili de Tarragona (Usera et al. 2008, Mendina et al. 2014).

1.1 Transporte de partículas en un fluido.

El estudio del transporte de partículas en un flujo turbulento es un área de naturaleza multidisciplinar que ha sido objeto de estudio desde principios del siglo pasado (Einstein 1905) y hasta la fecha (como se evidencia en los párrafos siguientes). Es un área de gran complejidad y que atañe a un gran número de aplicaciones diferentes de la ingeniería, donde la dificultad del abordaje se centra en dos causas principales: la complejidad de la interacción entre partículas y fluidos causada por la dinámica de retroalimentación entre las dos fases; y la diferencia de escalas que en general se encuentran involucradas en los diferentes casos de estudio (partículas de cientos de micras inmersas en fluidos de dominios que pueden alcanzar los cientos de metros y hasta el kilómetro); Luo y Chen 2005.

El estudio del movimiento de partículas puede abordarse desde dos aspectos: Lagrangiano (Maxey 1987) o Euleriano (Zhang y Prosperetti 1994). Los métodos lagrangianos consideran a las partículas como una fase discreta inmersa en el fluido. El método consiste en calcular la trayectoria de cada partícula individual, teniendo en cuenta las fuerzas que actúan sobre ella, sin considerar la interacción partícula-partícula ni el efecto de las mismas sobre el fluido (al ser consideradas como esferas de volumen despreciable). Si bien la ecuación de seguimiento de estas esferas puede ser bastante compleja es una muy buena aproximación cuando las soluciones son diluidas dificultándose su aplicación en otros casos, dado que el tiempo de cálculo empleado para seguir a una partícula puede ser similar al de resolver el flujo en su totalidad. Por este motivo solamente se pueden seguir un número limitado de ellas en tiempos de cómputo razonables. Los métodos eulerianos trabajan en un marco de referencia fijo, con un cálculo que resulta en general más sencillo y demandando menores recursos computacionales. El conjunto de partículas es considerado como un cuerpo continuo, es decir que la interacción dinámica de la fracción sólida con el fluido circundante puede representarse por medio de dos cuerpos continuos interactuando. Se considera un modelo de dos fases en el que se debe resolver el sistema de ecuaciones en tres dimensiones con sus condiciones iniciales y de borde acordes para ambos materiales, lo que se traduce en ocho ecuaciones escalares, debiendo obtener relaciones constitutivas para el tensor de tensiones de las dos fases así como para las fuerzas de interacción entre ellas. Sin embargo, en un gran número de las aplicaciones, es importante investigar las características del movimiento colectivo de las partículas y existe una alternativa dentro de los modelos eulerianos que consiste en estudiar la dinámica de la interacción fluido-partículas considerando ambas fases juntas en términos de un material pseudo-continuo (modelo de mezcla). Este modelo considera un único fluido que tiene en cuenta el efecto de la fase de partículas en términos de una viscosidad efectiva y que se apoyan en una serie de trabajos donde se estudia la relación entre la

reología de la suspensión y las propiedades del pseudo-continuo (Krieger 1972, Leighton y Acrivos 1987 entre otros).

1.1.1 Método Euleriano – Lagrangiano

Un abordaje clásico que puede encontrarse en la literatura es el euleriano-lagrangiano (EL), técnica que, en general, considera el acople en una sola dirección (sólo el efecto del fluido sobre las esferas y no recíprocamente). Se utiliza un modelo CFD que resuelve el flujo turbulento primario (esquema euleriano) cuyos resultados son considerados luego al aplicar un modelo lagrangiano encargado de calcular las trayectorias de las partículas. Una revisión de estos métodos puede encontrarse en Subramaniam 2013.

Una de las aplicaciones que emplea habitualmente esta metodología es el estudio de la deposición seca dentro de compartimientos cerrados, donde para el movimiento de las partículas se tiene en cuenta únicamente la fuerza de Drag despreciando la flotación (Zhao et al. 2004, Zhang y Ahmadi 2000). Lai y Chen 2006 estudian la deposición dentro de un recinto ventilado (por ejemplo museos, fábricas de chips de computadores etc.) mientras que Wang y Squires 1996 lo hacen en un canal vertical, donde toma relevancia el efecto del esfuerzo de Lift.

Bohem y Aylor 2005 utiliza un modelo Lagrangiano estocástico (incorpora estadísticos de turbulencia para imitar la trayectoria de las partículas dentro de un régimen de flujo dado) para estudiar el movimiento de material particulado en la capa límite convectiva incorporando la velocidad de caída de éstas; tal como se resume en el trabajo existen un gran número de estudios que utilizan este método con foco de atención en partículas con peso despreciable y sólo algunos lo hacen para partículas pesadas donde es necesario considerar la sedimentación.

Sidik et al. 2011 estudia el movimiento de partículas en una cavidad forzada analizando cómo la estructura vorticosa en la cavidad influencia directamente las trayectorias de las partículas sólidas. Kosinski et al. 2009 lo hace incorporando la interacción partícula-partícula en el modelo lagrangiano utilizando un modelo de esfera rígida y considerando el acople en las dos direcciones, lo que permite analizar además el efecto del conjunto de esferas sobre el fluido. Ghaffari et al. 2012 estudia la deposición en un ducto cuyo flujo es alterado por la presencia de un obstáculo modificando además el esquema de colisión de las esferas rígidas luego del impacto. Estos trabajos muestran acuerdo entre la simulación numérica y las medidas experimentales.

Zhang 2009 y Kleinstreuer 2009 estudian la deposición de nano y micro partículas en el en las vías respiratorias del árbol traqueobronqueal representándolo como un sistema de unidades de bifurcación triple. Nowak et al. 2003 realiza un trabajo similar utilizando

un dominio más realista de las vías respiratorias obtenido a partir de tomografía computarizada de un cuerpo humano.

Montazeri 2014 estudia el enfriamiento de edificios por evaporación utilizando la pulverización de agua donde las gotas de agua son consideradas como esferas que se siguen con un esquema lagrangiano. Lakehal 1995 utiliza una técnica similar para estudiar el efecto de la lluvia sobre los edificios causado por la desviación que los flujos vorticosos alrededor de éstos generan sobre las gotas de agua (WDR – wind driven rain). En Blocken y Carmeliet 2004 se hace una revisión del estado del arte en la temática resumiendo las diferentes técnicas y estudios que han abordado el fenómeno de WDR.

Luo y Chen 2005 enfatiza la dificultad de modelar la dispersión de partículas en la capa límite planetaria (CLP) debido al amplio espectro de escalas que intervienen ya que si bien la CLP puede alcanzar hasta el kilómetro de espesor las partículas de interés apenas tienen cientos de micras de diámetro teniéndose por tanto unos 7 u 8 órdenes de magnitud de diferencia, y señala además que el diseño de la malla de cálculo debe hacerse especialmente para cada caso concreto. El trabajo trata de reducir el gran costo computacional resolviendo en paralelo el movimiento de partículas (seguimiento de trayectorias) y del fluido. Cabe señalar que una estrategia posible a seguir para abordar esta problemática, independientemente del enfoque del modelo de partículas que se elija, es el trabajar con mallas anidadas (Sullivan et al. 1996, Yamada 2006), o inclusive anidar el código CFD con modelos de mesoescala cuando las dimensiones del problema así lo requieran (Leelőssy et al. 2018, Yamada y Koike 2011, Zajaczkowski 2011, Liu et al. 2011, Kunz et al. 2000).

1.1.2 Método Euleriano

Dentro de los modelos puramente eulerianos, ya sea de varias fases o de mezcla, pueden encontrarse también un gran espectro de trabajos en la literatura. En los artículos de Andrews et al. 1996, Lalli et al. 2005 y 2006, Gorb et al. 2014 por ejemplo se presentan modelos matemáticos que trabajan con materiales pseudo-continuos que son utilizados para simular numéricamente algunos problemas de interés. La ventaja de estos modelos frente a los modelos de varias fases es que la complejidad de estos últimos muchas veces obliga a recurrir a esquemas simples para representar la interacción fluido-partícula o partícula-partícula (Ribberink y Salem 1995). Chauchat y Médale 2010 utiliza un modelo tridimensional de dos fases y un modelo de mezcla (cuyo comportamiento se asimila al de un fluido de Bingham) para estudiar el flujo de un fluido Newtoniano sobre un lecho granular. Encuentra que en el caso del modelo de mezcla (donde se asume que las partículas y el fluido tienen la misma velocidad) se requiere un tiempo de cálculo diez veces menor y un 20% menos de memoria, bajo la precaución de que este modelo sólo

se puede aplicar en aquellos casos en que la velocidad relativa de las partículas es despreciable frente al fluido.

Raziyeh et al. 2014 estudia el desempeño de un hidrociclón industrial utilizado en la industria de explotación de cobre para la clasificación del material según el tamaño de las partículas. El modelo utiliza nueve fases para el cobre y una para el agua, encontrando una buena correlación con los resultados experimentales. Shu et al. 2014 estudia con un modelo euleriano la interacción gas-sólido con el fin de aplicar los avances al estudio de reactores de flujo descendente modificando el esfuerzo de Drag sólido-fluido y considerando las estructuras aglomeradas de las partículas. Kubilay 2014 analiza la problemática de WDR utilizando un modelo euleriano de dos fases incorporando la dispersión turbulenta de partículas.

Aydin et al. 2014 utiliza el CFD para desarrollar un modelo analítico que estudie la dinámica de las partículas en movimiento en una suspensión de fluido para analizar la distribución cerca de paredes sólidas. Esta aproximación es comparada con un modelo de fase discreta en la aplicación a una suspensión gas-sólido donde se observa una buena predicción de la distribución de concentraciones de partículas en ambas aproximaciones.

En los trabajos de Lowdnes et al. 2008 y Storven et al. 2015 y 2016 por ejemplo, donde se estudia la explotación de la minería a cielo abierto, se utilizan códigos CFD para estudiar el entorno cercano a la explotación (donde sedimentarán las partículas de mayor porte) mientras que la dispersión en el campo lejano es analizada con un modelo de penacho gaussiano, modelo estacionario para dispersión gaseosa que puede utilizarse para analizar la dispersión de la fracción de partículas finas. Holmes et al. 2006 hace una revisión de los diferentes modelos de dispersión de partículas en la atmósfera, relevando el estado del arte de los modelos de dispersión en general. Señala que si bien existe un gran número de trabajos que estudian la dispersión de contaminantes en la atmósfera, lamentablemente pocos de ellos estudian en conjunto gases y partículas, encontrando algunos que muestran diferencias en la dispersión local entre éstos (Holmes et al. 2005), y que justifican por lo tanto su estudio en forma separada. (Es común que en las emisiones a la atmósfera que provienen de algunas actividades antropogénicas se tengan diversos tamaños de partículas, en general aquellas con diámetros aerodinámicos menores, - PM10 o PM2.5 - diámetros menores a 10 y 2.5 μm respectivamente, pueden ser consideradas como gases).

En cuanto a la utilización de esta clase de modelos en aplicaciones vinculadas a la hidráulica fluvial existen también un número importante de estudios, donde la estrategia más utilizada consiste en la utilización de modelos de dos fases donde se resuelven las ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad para cada una de ellas y que son acopladas mediante la utilización de una serie de coeficientes que caracterizan el comportamiento en la interface. Qian et al. 2010 utiliza esta metodología

para estudiar la erosión generada por chorros verticales sumergidos planos y circulares sobre un depósito de arena, comparando su modelación con experimentación física realizada por otros autores y por ellos mismos. Una profundización de esta área en particular puede encontrarse en la sección 4.3 de este documento. Una técnica similar es implementada por Liang y Bombardelli 2017, quienes validan el modelo a través de simulaciones de flujos estacionarios en canal abierto, tanto en estados de equilibrio como de no equilibrio, así como en flujos oscilatorios. Dixen et al. 2013 por su parte, estudia la socavación de un lecho de arena provocada por la presencia de una esfera en una corriente uniforme de agua donde acopla al modelo del fluido un modelo morfológico para describir el comportamiento del sedimento. Los modelos hidromorfológicos son empleados por Khosronejad et al. 2013 y 2015 por ejemplo, para estudiar el comportamiento de grandes dunas en ríos con estructuras rocosas.

Algo menos común es la utilización de métodos eulerianos de una única fase del tipo planteado en esta tesis (al menos en lo evidenciado en la búsqueda bibliográfica realizada en este trabajo). Desde nuestro conocimiento, hay muy pocos trabajos que toman en cuenta formulaciones empíricas para explicar el mecanismo del transporte de sedimentos. En los trabajos de Lalli et al. 2005, donde originalmente se presenta la formulación aquí utilizada, se estudia la socavación bajo una tubería en un flujo estacionario, laminar y bidimensional. Lalli et al. 2006 emplea la misma técnica para analizar la rotura de una presa en una situación laminar. Gorb et al. 2014 implementa un modelo similar con un método de elementos finitos, que es utilizado para estudiar la dispersión de partículas en un ejemplo de escalón hacia atrás (Backward facing step) y en una cavidad forzada (bajo la hipótesis de fluido de Bingham con una tensión de corte constante). El trabajo que más se aproxima al aquí planteado es el trabajo de tesis doctoral de Bohorquez 2008, que hace una implementación parecida utilizando el modelo OpenFOAM con un esquema semi implícito para la resolución de la ecuación de transporte de partículas. El modelo es utilizado para la simulación de casos esencialmente planos (socavación bajo una tubería y por una onda de ruptura de presa), que a diferencia de lo aquí planteado, emplea métodos RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes equations) para representar la turbulencia.

1.2 Objetivos del trabajo.

Tal como se enunció antes el objetivo general de este trabajo es el desarrollo del modelo `caffa3d.MBRi`, de manera de mejorar su capacidad para la resolución numérica de la dispersión de partículas inmersas en un flujo turbulento.

Como objetivos específicos se plantea:

- a) Incorporar un módulo específico para simular numéricamente el transporte de material particulado sedimentable mediante la incorporación de un modelo euleriano de mezcla de una sola fase.
- b) Validación del modelo mediante la comparación de resultados numéricos con un código similar (desde el punto de vista de la parametrización del movimiento de partículas) así como con resultados experimentales de trabajos realizados por otros autores.

Los ejemplos seleccionados para este objetivo consisten en el estudio del desmoronamiento del talud de una presa, la sedimentación de arena en una mezcla de agua y arcilla, y finalmente la erosión generada sobre un lecho de arena causada por chorros verticales turbulentos y sumergidos de forma circular y plana. Una descripción más detallada se puede encontrar en el capítulo 4 de este documento.

1.3 Modelos seleccionados para el desarrollo del trabajo.

El modelo de partículas elegido fue presentado previamente por Lalli et al. 2005 (L05) y considera el sistema fluido-partículas como un cuerpo pseudo-continuo de una sola fase, analizando el movimiento de las mismas en su conjunto considerando la interacción fluido-partícula en términos de una viscosidad efectiva. Esta viscosidad está definida por medio de esquemas Newtoniano y no Newtoniano ligados adecuadamente, de manera de que el modelo puede representar tanto materiales puramente fluidos, como fluidos con material en suspensión (de mayor o menor concentración) y hasta sedimentos con un alto grado de empaquetamiento. Para valores de concentración de la mezcla por debajo de un cierto umbral el modelo se comporta como Newtoniano mientras que para valores muy altos de concentración de partículas el esquema será el de un fluido de Bingham. En L05 las ecuaciones primitivas son discretizadas por medio de diferencias finitas utilizando un esquema explícito para su integración numérica. El modelo implementado es empleado para la simulación numérica de algunos casos bidimensionales: una cavidad forzada con un fluido de Bingham, la deposición de partículas en flujo de Couette y finalmente para el estudio de la socavación bajo una

tubería en un fluido estacionario y laminar. En los casos estudiados el modelo muestra resultados acordes con los presentados por otros autores.

En este trabajo se extiende el modelo para ser utilizado con volúmenes finitos, mallas multi-bloque, paralelismo y un método de integración implícito; considerando además la interacción con la turbulencia por medio de la utilización del método de los grandes vórtices (LES - Large Eddy Simulation, Smagorinsky 1963).

El código CFD seleccionado es el `caffa3d.MBRi` (`caffa3d`). Este modelo presenta grandes potencialidades para su aplicación a diversos problemas de ingeniería del tipo de los ya descritos y en especial para el estudio de la dispersión de partículas en el seno de un flujo turbulento. Varios casos de aplicación han sido ya estudiados con este modelo, que han permitido concluir la robustez del mismo (Fernández et al. 2018, Sassi et al. 2017, Guggeri et al. 2017, Draper et al. 2016, López et al. 2015, Berg et al. 2015, Mendina et al. 2014, Usera et al. 2010 a,b; entre otros).

El `caffa3d` presenta varias cualidades que lo tornan atractivo a la hora de elegir un modelo numérico:

a) Modelo de código abierto.

Además de la ventaja económica que resulta de esto el acceso al código permite adaptar el programa a las necesidades específicas, estando en el Uruguay los mayores recursos humanos en cuanto al conocimiento y manejo del modelo por ser el mismo de desarrollo Nacional.

b) Mallas estructuradas por bloque.

Permiten mantener la eficiencia de la organización de datos mediante un esquema fijo a la vez que el refinamiento en zonas de particular interés. De esta manera se evita el problema típico de las mallas estructuradas en los CFD donde para contemplar las regiones críticas, como por ejemplo las cercanías de un objeto, se requiere un mallado muy fino en todo el espacio con un consecuente exceso de cómputo en regiones en las que es innecesario.

c) Modularidad.

Brinda cierta independencia para la programación del código lo que facilita la tarea de incorporar al modelo nuevos "submodelos" sin necesidad de retocar aquellas subrutinas que no son de interés específico para ello. Este tipo de programación permite además la fácil interacción entre los módulos eliminando la necesidad de programar una misma rutina para ejecutarse en diferentes situaciones, facilitando el trabajo entre los investigadores desarrolladores del código.

d) Programación en paralelo (MPI - Message Passing Interface).

Otorga ventaja debido a que posibilita el abordaje de aplicaciones que antes resultaban demasiado largas y costosas. La utilización de memoria distribuida permite dividir un problema en varios problemas menores que se resuelven en forma simultánea optimizando de esta manera los tiempos de cómputo.

1.4 Principales contribuciones del trabajo

En este trabajo el modelo es implementado sobre la base de un CFD de acceso libre, código abierto y de desarrollo Nacional, donde la discretización de las ecuaciones se desarrolla mediante el método de volúmenes finitos con un esquema implícito de alta resolución para la integración de las mismas. Existen escasas referencias en la bibliografía a la aplicación de esquemas implícitos en esta familia de modelos para el transporte de partículas.

Otros aspectos novedosos de este trabajo son:

- el abordaje de flujos tridimensionales bajo la utilización del método LES para la parametrización de la turbulencia (lo que a diferencia de los modelos RANS permite representar situaciones fuertemente no estacionarias tal como se describe en la sección 2.5) ;
- la implementación de una modificación del modelo de partículas, extendiendo su aplicación a flujos que se encuentran fuera del régimen de Stokes (valores del número de Reynolds de partículas inferiores a la unidad), hipótesis base en la propuesta original.

1.5 Contenido del documento.

En el capítulo 1 de este documento se presenta una introducción y se hace una revisión del estado del arte en la temática relacionada con el mismo. Se plantean además los objetivos de este trabajo, se hace una breve descripción de los modelos seleccionados como herramienta de trabajo y se resumen los principales aportes del trabajo.

En el capítulo 2 se profundiza en el código base `caffa3d` mientras que en el capítulo 3 se describe en detalle el modelo de mezcla fluido-partículas seleccionado y se describe la metodología adoptada para su implementación en el CFD.

En el capítulo 4 se procede a la validación del modelo haciendo una descripción de los diferentes ejemplos seleccionados para ello.

El capítulo 5 presenta un resumen de los resultados del trabajo y se elaboran las conclusiones finales del mismo.

Finalmente, en el capítulo 6 se enumeran las referencias bibliográficas del trabajo.

2.1 Descripción general del modelo

El código numérico `caffa3d` implementa el método de los volúmenes finitos en mallas curvilíneas estructuradas por bloques, para flujos incompresibles viscosos, laminares o turbulentos, mediante el método SIMPLE de acople velocidad - presión. Ha sido desarrollado en Fortran 90, e incorpora estrategias de paralelización masiva en memoria distribuida mediante las librerías MPI que junto a la flexibilidad para el mallado geométrico facilitan la simulación numérica de dominios dotados de hasta cientos de millones de celdas (Mendina et al. 2014; Usera et al. 2008). El código implementa el método de los volúmenes finitos para las ecuaciones de Navier-Stokes utilizando un método implícito para la integración numérica. Si bien estos métodos requieren por su complejidad un cómputo algo mayor que los métodos explícitos, los mismos se tornan más eficientes permitiendo pasos temporales mayores.

Actualmente el código, tiene incorporado un modelo básico de turbulencia (Smagorinsky 1963, Mendina et al. 2012), de transferencia de calor por radiación entre el piso, el aire y el espacio exterior (Liou et al. 1988), considera la interacción fluido estructuras mediante el método de condiciones de borde inmersas (Liao et al. 2010), dispone de un módulo para estudiar procesos de aire húmedo (Usera et al. 2010-a), considera transporte de escalares e incorpora el método Volume of Fluid (VOF) para tratar flujos a superficie libre (Ubbink et al. 1999, Usera et al. 2010-b).

El modelo matemático que se utiliza es el de un fluido newtoniano incompresible bajo la acción del campo gravitatorio que considera los efectos de flotación mediante la aproximación de Boussinesq, contemplando además el transporte de escalares pasivos. En esta sección se hace un breve resumen de las ecuaciones que describen el modelo matemático empleado en el `caffa3d` y su discretización para la resolución numérica de manera de analizar únicamente los términos que se verán afectados por el cambio en las ecuaciones del movimiento al trabajar con una mezcla fluido-partículas como la que se introduce en el capítulo 3. Una descripción más completa puede encontrarse en Usera et al. 2008 y Ferziger y Peric 2002.

La versión discretizada del modelo consiste en aplicar las siguientes ecuaciones a cada uno de los elementos de volumen que componen la malla, y que se escriben en su forma integral de acuerdo al método de volúmenes finitos:

- Ecuación de continuidad (escrita como ecuación de incompresibilidad):

$$\int_S (\vec{u} \cdot \hat{n}_s) dS = 0 \quad \text{Eq. 2.1}$$

- Ecuación de balance mecánico:

$$\int_{\Omega} \rho_f \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} d\Omega + \int_S \rho_f \vec{u} (\vec{u} \cdot \hat{n}_s) dS = \int_{\Omega} \rho_f \beta (T - T_{ref}) \vec{g} d\Omega + \int_S -p \hat{n}_s dS + \int_S 2\mu D\hat{n}_s dS \quad \text{Eq. 2.2}$$

- Ecuación de transporte de escalares:

$$\int_{\Omega} \rho_f \frac{\partial \Phi}{\partial t} d\Omega + \int_S \rho_f \Phi (\vec{u} \cdot \hat{n}_s) dS = \int_S \Gamma (\nabla \Phi \cdot \hat{n}_s) dS \quad \text{Eq. 2.3}$$

Donde:

- \vec{u} velocidad del fluido
- \vec{g} aceleración gravitatoria
- $p = p_T - \rho_f \vec{g} \cdot \vec{x}$ presión dinámica con p_T presión absoluta y \vec{x} posición
- D tensor velocidad de deformación
- ρ_f densidad del fluido
- μ viscosidad dinámica
- Ω porción del dominio
- S frontera de Ω
- \hat{n}_s vector normal saliente a S
- β coeficiente volumétrico de expansión térmica
- T temperatura del fluido
- T_{ref} temperatura de referencia
- ϕ escalar pasivo
- Γ coeficiente de difusión de ϕ

2.2 Representación de la geometría

El dominio es representado mediante diferentes bloques de malla estructurada que pueden ser en una malla cartesiana ortogonal o una malla curvilínea adaptable al sólido (body fitted grids). Sin embargo, tanto las propiedades geométricas como las propiedades del flujo siempre son expresadas en un sistema de coordenadas cartesianas. Cada bloque se compone de un arreglo estructurado de hexaedros, donde cada hexaedro tiene seis vecinos que no se superponen y no dejan espacios vacíos entre ellos (Figura 2.1).

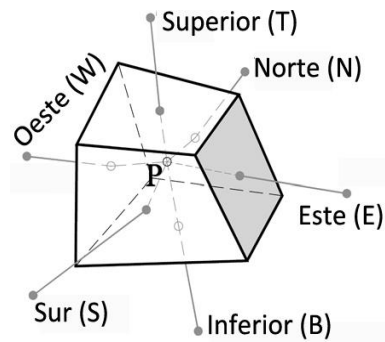


Figura 2.1: Hexaedro individual no regular con sus vecinos. Figura adaptada de Usera et al. 2008.

La aproximación de las ecuaciones integrales (Eq. 2.1 a Eq. 2.3) puede realizarse en forma eficiente gracias al cálculo previo de algunas propiedades geométricas: el volumen del elemento, las coordenadas de su centro P, el vector normal a cada cara y las coordenadas del baricentro de cada una de éstas. Cada cara del hexaedro es un cuadrilátero (no necesariamente plano) y por lo tanto el cálculo de sus propiedades puede realizarse considerando dos superficies triangulares.

El hecho de trabajar con mallas curvilíneas estructuradas por bloques facilita la resolución numérica de flujos en situaciones intrincadas dando gran versatilidad en el diseño del dominio de cálculo. Este sistema de malla sólo requiere atención especial en la interface entre bloques. Ejemplos de posibles interfaces entre diferentes bloques pertenecientes a un mismo dominio se resumen en la Figura 2.2.

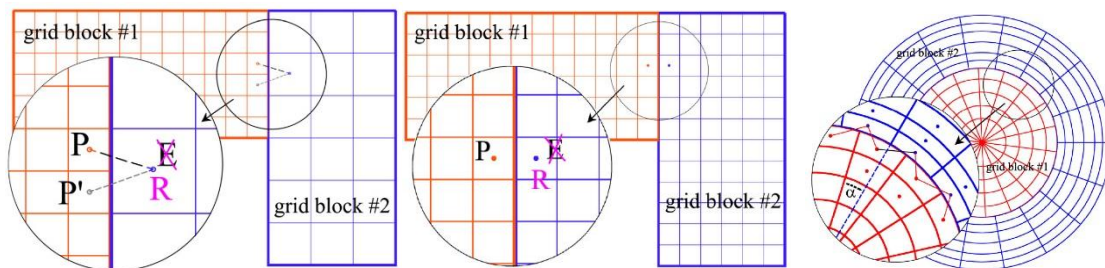


Figura 2.2: Ejemplos de uniones entre interfaces de bloques en el caso 3D. Figura adaptada de Usera et al 2008.

2.3 Discretización de las ecuaciones:

A partir de la Eq. 2.2 se obtendrá para cada uno de los N elementos de volumen de la malla y para cada componente de la velocidad $\vec{u} = \sum_{i=1}^3 u_i \vec{e}_i$ un sistema lineal de ecuaciones de la forma:

$$A^u u_i = Q^u \quad \text{Eq. 2.4}$$

Siendo A^u una matriz de coeficientes de tamaño NxN, u_i y Q^u los vectores incógnita y el término independiente respectivamente. Donde la matriz A^u es heptadiagonal, correspondiendo al volumen de control representado en la Figura 2.1.

Para un elemento genérico (P) se tiene:

$$A_P^u u_{P_i} + A_W^u u_{W_i} + A_E^u u_{E_i} + A_S^u u_{S_i} + A_N^u u_{N_i} + A_B^u u_{B_i} + A_T^u u_{T_i} = Q_P^u \quad \text{Eq. 2.5}$$

Se analizarán los términos de la Eq. 2.2 en cada una de las componentes de la velocidad. En las consideraciones que siguen se ejemplifica la contribución de cada término mediante el cálculo de los coeficientes asociados a la cara Este vistos desde la celda P. Este cálculo deberá reproducirse en todas las caras del volumen de control de manera de representar la Eq. 2.5.

Término convectivo:

$$\begin{aligned} F_e^{cu} &= \int_S \rho_f u_i (\vec{u} \cdot \hat{n}_s) dS \approx \dot{m}_e u_{ie} = \\ &= \overbrace{\max(\dot{m}_e, 0) u_{iP} + \min(\dot{m}_e, 0) u_{iE}}^{\text{IMPLICITO}} + \overbrace{\gamma_{CDS} [\dot{m}_e u_{ie} - \max(\dot{m}_e, 0) u_{iP} - \min(\dot{m}_e, 0) u_{iE}]}^{\text{EXPLICITO}} = \\ &= \underbrace{A_P^{cu,e} \cdot u_{iP} + A_E^{cu,e} \cdot u_{iE}}_{\text{IMPLICITO} = I_{cu}} - \underbrace{Q_P^{cu,e}}_{\text{EXPLICITO} = E_{cu}} \end{aligned} \quad \text{Eq. 2.6}$$

$$\dot{m}_e = \int_S \rho_f (\vec{u} \cdot \hat{n}_s) dS$$

Donde \dot{m}_e representa el flujo másico respecto a la cara Este en el elemento de volumen P con interface lateral en elemento E (el subíndice “e” refiere a valores interpolados al centro de cara). El término convectivo se computará entonces mediante un término implícito de primer orden con un esquema upwind y un término explícito de corrección diferida (computado a partir de los valores disponibles de los campos) de segundo

orden mediante una aproximación interpolada al centro de cara (CDS), equivalente a un esquema centrado, cuyo aporte se pondera de acuerdo a un coeficiente γ_{CDS} . El uso de la corrección diferida permite un mayor orden de aproximación preservando la simplicidad y la robustez del método implícito (Lehnhauser et al. 2003).

Término difusivo:

A los efectos de este trabajo el término difusivo permanece invariante entre los esquemas tal como se explica en el capítulo 3. Por este motivo, simplemente se detalla la fórmula final discretizada (para cada componente de la velocidad).

$$F_e^{du_i} = \int_S (2\mu D\hat{n}_s) e_i dS = \underbrace{A_p^{due} u_{ip} + A_E^{due} u_{iE}}_{\text{IMPLICITO} = I_{du_i}} - \underbrace{Q_p^{du_e}}_{\text{EXPLICITO} = E_{du_i}} \quad \text{Eq. 2.7}$$

La componente implícita de este término considera únicamente la contribución directa de la velocidad mientras que la componente explícita contempla la expresión del tensor de deformación proveniente de realizar una corrección diferida de mayor orden (Usera et al. 2008). Expresiones similares se obtienen para el resto de las caras del elemento de volumen.

Término de flotación:

Esta contribución se computa en forma completamente explícita:

$$\int_{\Omega} \rho\beta(T-T_{ref})\bar{g}e_i d\Omega \approx \rho\beta(T-T_{ref})\bar{g}e_i \Delta\Omega = Q_p^{gu_i} \quad \text{Eq. 2.8}$$

Derivada temporal:

$$\int_{\Omega} \rho_f \frac{\partial u_i}{\partial t} d\Omega \approx \frac{\rho_f}{\Delta t} (u_{ip} - u_{ip}^{old}) \Delta\Omega = A_p^{tu_i} \cdot u_{ip} - Q_p^{tu_i} \quad \text{Eq. 2.9}$$

Donde el supra índice "old" se utiliza para referir al valor del campo en el paso temporal anterior.

Se ejemplifica en la Eq. 2.9 el caso en que se aproxima la derivada temporal con un esquema de Euler hacia atrás de primer orden. Actualmente el código tiene implementados además dos esquemas de segundo orden: Three Time Level (Euler hacia atrás Eq. 2.10) y Crank Nicolson (Eq. 2.11) .

$$\int_{\Omega} \rho_f \frac{\partial u_i}{\partial t} d\Omega \approx \frac{\rho_f}{2\Delta t} (3u_{ip} - 4u_{ip}^{old} + u_{ip}^{old-1}) \Delta\Omega = A_p^{tu_i} \cdot u_{ip} - Q_p^{tu_i} \quad Eq. 2.10$$

$$\int_{\Omega} \rho_f \frac{\partial u_i}{\partial t} d\Omega \approx \frac{\rho_f}{\Delta t} (2u_{ip} - 2u_{ip}^{old}) \Delta\Omega = A_p^{tu_i} \cdot u_{ip} - Q_p^{tu_i} \quad Eq. 2.11$$

Término de las presiones y balance de masa:

$$\int_s -p \hat{n}_s \vec{e}_i dS \approx - \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_p \Delta\Omega = Q_p^{pu_i} \quad Eq. 2.12$$

La discretización de la ecuación de cantidad de movimiento por sí sola no garantiza la incompresibilidad del flujo (Eq. 2.2) y se utiliza un acople SIMPLE entre los campos de velocidad y presión de manera de garantizarlo. La actualización del campo de presiones se realiza por lo tanto por medio de la ecuación de balance de masa (Usera et al. 2008; Lehnhauser et al. 2003).

Se introducen correcciones para la presión y la velocidad de acuerdo a:

$$\bar{u} = \bar{u}^* + \bar{u}' ; p = p^* + p' \quad Eq. 2.13$$

Donde \bar{u}^* y p^* son los campos velocidad y presión disponibles para el instante actual (que satisfacen las ecuaciones de balance de cantidad de movimiento), \bar{u}' y p' son las correcciones para imponer el balance de masa mientras que \bar{u} y p son los valores de los campos corregidos. A partir de las expresiones Eq. 2.5 y Eq. 2.12 se obtiene la relación entre la velocidad y la presión corregidas:

$$\bar{u}'_p = - \left(\frac{\Delta\Omega}{A_p} \right) (\nabla p') \quad Eq. 2.14$$

Los flujos máxicos ($\dot{m} = \dot{m}^* + \dot{m}'$) pueden calcularse entonces a partir de Eq. 2.13 y Eq. 2.14. Imponiendo el balance de masa (Eq. 2.15) se obtiene una ecuación para la corrección de la presión (Eq. 2.16) similar a la expresada en Eq. 2.5.

$$\sum \dot{m} = \sum \dot{m}^* + \sum \dot{m}' \quad \text{Eq. 2.15}$$

$$A_p^p p_p' + A_w^p p_w' + A_E^p p_E' + A_S^p p_S' + A_N^p p_N' + A_B^p p_B' + A_T^p p_T' = Q_p^p \quad \text{Eq. 2.16}$$

Esquema de resolución

En cada paso temporal se resuelven, en forma sucesiva y alternada, el sistema dado por la Eq. 2.5 para cada componente de la velocidad, la ecuación Eq. 2.16 para la corrección de la presión y una ecuación similar para el transporte de escalares (no descripta aquí). El sistema de ecuaciones no lineal acoplado (Eq. 2.1 a Eq. 2.3) es aproximado mediante una sucesión de sistemas de ecuaciones lineales. Para cada ecuación en el modelo matemático, se emplea un esquema de iteración interno y externo para cada paso de tiempo, como se esquematiza en la Figura 2.3. Los sistemas lineales para cada ecuación en el modelo matemático se ensamblan y se resuelven con iteraciones internas pudiendo utilizarse un solver tipo SIP o AMG-SIP (Lilek et al. 1997; Mora 2001; Usera et al. 2008), en forma sucesiva de manera que el acoplamiento entre las ecuaciones se actualiza después de la iteración de cada ecuación. El bucle externo se repite dentro de cada paso de tiempo hasta que se alcanza el nivel deseado de convergencia antes de continuar al siguiente paso temporal (t_{n+1}).

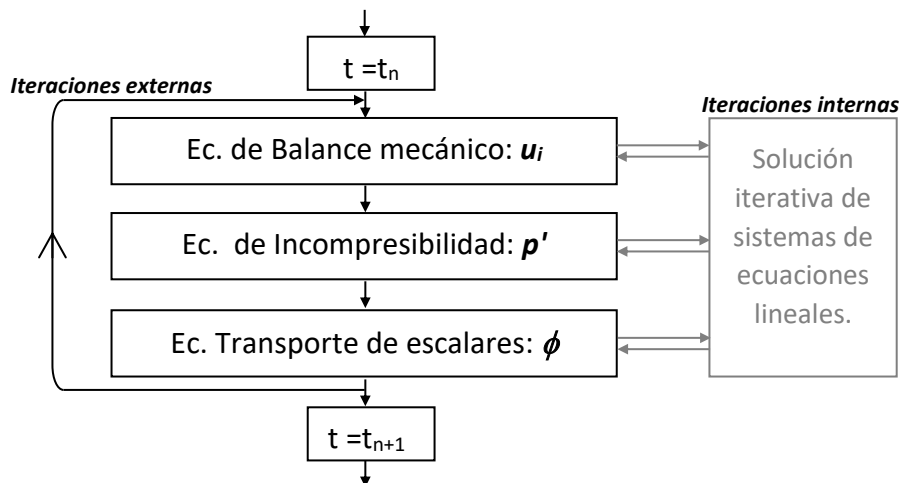


Figura 2.3: Esquema general del proceso iterativo implementado en el *caffa3d* para un paso temporal.
Figura adaptada de Usera et al. 2008.

2.4 Paralelismo mediante MPI

El modelo utiliza el método de paralelización masiva mediante la utilización de librerías MPI que puede ser ejecutado en sistema de memoria distribuida. Se vale de la estrategia de programación paralela por descomposición de dominio, utilizando la infraestructura de los bloques de malla.

Los bloques de la malla se organizan en regiones, pudiendo asignarse a cada región uno o varios bloques, que a su vez se asignan biunívocamente a los procesos de MPI. La distribución de bloques entre regiones se ideó para maximizar el balance de cómputo y minimizar las comunicaciones, siendo actualmente estática y resuelta en tiempo de compilación. Mientras que la grilla está estructurada dentro de cada bloque, las relaciones entre éstos son de naturaleza no estructurada, ya que cada uno de ellos podría interactuar con cualquier número de otros bloques de la malla (Lilek et al. 1997). Por lo tanto, las listas indexadas se construyen para las denominadas interfaces intra región e interfaces inter región. Interfaces intra región son aquellos entre los bloques de la misma región y no requieren comunicación explícita o lugares de almacenamiento adicionales. Las interfaces de inter región por otra parte relacionan celdas que pertenecen a bloques asignados a diferentes regiones o procesos MPI, y por lo tanto requieren una comunicación explícita y almacenamiento extra (halo). Para minimizar las comunicaciones, a expensas de algunas regiones de halo adicionales, cada campo se proporciona con su propio halo. La Figura 2.4 muestra un esquema de una malla estructurada por bloques construida con cuatro bloques distribuidos en dos regiones. Los bloques (1) y (2) pertenecen a una región (negro), mientras que los bloques (3) y (4) pertenecen a otra región (gris). En la figura se pueden identificar ejemplos de interfaces intra-región e interfaces inter-región entre los bloques. Una descripción más detallada de la estrategia MPI utilizada puede encontrarse en Mendina et al. 2014.

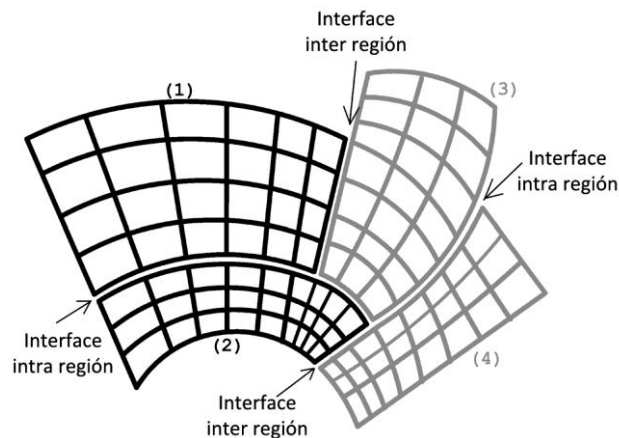


Figura 2.4: Esquema de una malla estructurada por bloques, compuesta por 4 bloques (1,2,3 y 4) en dos regiones (negro y gris), con ejemplos de interfaces intra región (intra región interfaces) e inter región (inter region interfaces).
Figura adaptada de Mendina et al. 2014

2.5 Simulación de la turbulencia.

La modelación numérica de la turbulencia, desde el punto de vista ingenieril, ha sido abordada desde varios enfoques diferentes. Sin embargo, ningún modelo computacional puede resolver por completo en forma eficiente y en tiempos de cómputo razonables la multiplicidad de escalas involucradas en los problemas de estudio, siendo la parametrización de la turbulencia un hito a la hora de mejorar la eficiencia de los modelos CFD.

La aproximación más precisa para resolverlas numéricamente se consigue mediante la utilización de la Simulación Numérica Directa (DNS por sus siglas en inglés), método que consiste en resolver directamente las ecuaciones de Navier Stokes (Eq. 2.1 y Eq. 2.2) en forma discretizada (Pope 2000). En este método se resuelven todas las escalas espaciales y temporales del flujo turbulento sin parametrizaciones de ningún tipo, los errores que se acarrean en este método son por tanto únicamente aquellos derivados de las aproximaciones numéricas. Dado que la DNS resuelve directamente el flujo es necesario recurrir a tamaños de malla que capturen todas las escalas participantes en el problema representado, lo que implica en muchos casos altos costos computacionales, siendo razonable su aplicación siempre que se manejen bajos números de Reynolds (Re) y geometrías no demasiado complejas (Bagget et al. 1997).

Otra alternativa para la representación de la turbulencia son los modelos basados en métodos estadísticos de estudio, como lo son los modelos fundados en el promedio de Reynolds de las ecuaciones de Navier-Stokes, o modelos RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes). El método consiste en realizar un promedio temporal de las ecuaciones de Navier Stokes y obtener una nueva ecuación a resolver donde el efecto de la turbulencia queda condensado en el tensor de Reynolds (Pope 2000), cuyas componentes dependen de las componentes fluctuantes de la velocidad. La clave del método consiste en modelar el efecto del tensor de Reynolds para obtener la clausura del sistema de ecuaciones, existiendo diversos esquemas propuestos para esto que van desde métodos simples como lo son por ejemplo el método de longitud de mezcla, pasando por el clásico $k-\varepsilon$ o esquemas más complejos como el método de las tensiones de Reynolds (Pope 2000). Los RANS son una excelente opción para simular un gran número de problemas ingenieriles ya que son fáciles de implementar con la ventaja adicional de ser muy eficientes desde el punto de vista del costo computacional. La desventaja principal radica en que sólo son capaces de calcular propiedades medias del flujo y toda la turbulencia es representada por el mismo modelo, empezando a mostrar ciertas dificultades en la descripción de patrones fuertemente no estacionarios.

Como alternativa surgen los modelos de grandes vórtices, o modelos LES (Large Eddy Simulation), que se encuentran a mitad de camino entre la DNS y los RANS. El esquema LES básico fue formulado inicialmente por Smagorinsky (Smagorinsky 1963) y consiste

en resolver explícitamente las grandes escalas y modelar las escalas más pequeñas. Para hacer esta separación se procede a realizar un filtrado espacial de Navier Stokes, donde, a diferencia de los RANS, las ecuaciones filtradas seguirán siendo dependientes del tiempo. La clave del éxito de estos modelos se centra en la forma en que se modelan las escalas de subgrilla (SGS, sub grid scales).

En el modelo simple de Smagorinsky las componentes del tensor de subgrilla τ_{ij}^{SGS} se representan según:

$$\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{SGS} = -2\mu_{SGS} \bar{S}_{ij} \quad Eq. 2.17$$

Donde μ_{SGS} es la viscosidad de subgrilla modelada, comúnmente llamada viscosidad turbulenta μ_T y \bar{S}_{ij} las componentes del tensor deformación del campo filtrado. La viscosidad turbulenta es calculada asumiendo que las pequeñas escalas están en equilibrio y por tanto la producción de energía es igual a la disipación. Esto lleva a una expresión del tipo:

$$\mu_{SGS} = (C_s \Delta)^2 |\bar{S}| \quad ; \quad \Delta = (\Delta_{ij})^{1/3} \quad Eq. 2.18$$

En este esquema, la constante de Smagorinsky C_s permanece invariante en todo el dominio y su valor ha sido estudiado empíricamente por varios autores (Germano et al. 1991, Moin et al. 1982, Jones 1995).

A los efectos del cálculo en el modelo *caffa3d*, la viscosidad total considerada al discretizar la ecuación de cantidad de movimiento será la viscosidad total dada por la suma de la viscosidad molecular μ_m y la viscosidad turbulenta.

$$\mu = \mu_m + \mu_T \quad Eq. 2.19$$

2.6 Condiciones de borde inmersas

El modelo consta de un módulo de Condiciones de Borde Inmersas (CBI) que sigue el método descrito en el trabajo de Liao et al. 2010. El método consiste esencialmente en la simulación de cuerpos inmersos en un flujo mediante la utilización de mallas que no se ajustan a la superficie de éstos y que pueden ser tan sencillas como las Cartesianas.

La geometría de las superficies es representada por un campo de fuerzas de masa externo al fluido que actúa sobre el mismo de igual forma que lo haría la frontera si fuera realmente reproducida. En la Figura 2.5 se muestra una esquematización de la geometría utilizada para representar un cuerpo rígido inmerso en un fluido.

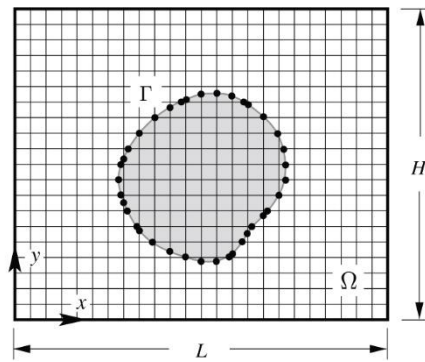


Figura 2.5: Esquema de la representación de un objeto rígido de frontera Γ en una malla cartesiana mediante la implementación del método de condiciones de borde inmersas. Figura extraída de Liao et al. 2010.

La ventaja de este método es que optimiza los tiempos de cómputo y de mallado, ya que la misma tiene un buen desempeño teniendo la precaución de la elección de una grilla capaz de representar el objeto adecuadamente. La utilización de mallas no estructuradas puede ser una estrategia alternativa bajo el requerimiento de un esfuerzo considerable para la realización del mallado, especialmente si se tiene en cuenta lo intrincada que puede ser la malla global.

3.1 Descripción del modelo matemático

El esquema elegido para representar el transporte de partículas en un fluido consiste en un método completamente euleriano que considera el sistema fluido-partículas como un cuerpo pseudo-continuo de una sola fase. El movimiento de las partículas es analizado en su conjunto, incorporando su efecto por medio de una viscosidad efectiva que depende de las características locales de la fracción volumétrica de éstas en la mezcla. El modelo matemático empleado fue presentado previamente L05, modificando el esquema numérico de manera de adaptarlo a las discretizaciones y métodos de resolución del esquema propio del `caffa3d`.

Se asume para la fase dispersa un comportamiento Newtoniano en regiones con suspensiones diluidas donde la viscosidad dependerá únicamente de la concentración de partículas mientras que para mayores concentraciones se utiliza una superposición del modelo Newtoniano y el modelo de Bingham para considerar la influencia de las tensiones de corte. De aquí en adelante se hace referencia al modelo como MFP: Modelo Fluido Partícula.

3.1.1 Ecuaciones del movimiento de la mezcla.

Sea χ la fracción volumétrica de partículas presentes en una región de volumen ΔV definida, en el caso discreto por:

$$\chi = \frac{\sum_{k=1}^{N_p} V_k}{\Delta V} \quad \text{Eq. 3.1}$$

Donde N_p es el número de partículas y V_k el volumen individual de éstas. χ representa por tanto el empaquetamiento de partículas y $1-\chi$ la porosidad del material (α).

El modelo introduce dos campos de velocidades para el material pseudo-continuo: u y v , campos promedio en volumen y masa respectivamente, que se calculan según:

$$u = \chi v^p + (1-\chi)v^f \quad \text{Eq. 3.2}$$

$$\mathbf{v} = \frac{\chi\rho_p\mathbf{v}^p + (1-\chi)\rho_f\mathbf{v}^f}{\rho} \quad \text{Eq. 3.3}$$

$$\rho = \chi\rho_p + (1-\chi)\rho_f \quad \text{Eq. 3.4}$$

Donde ρ es la densidad de la mezcla (\mathbf{v}^p , ρ_p) y (\mathbf{v}^f , ρ_f) representan la velocidad y densidad de las fases de partículas (p) y de fluido (f) respectivamente.

Las ecuaciones del modelo de mezcla están dadas por la ecuación de Navier-Stokes generalizada, y las ecuaciones de continuidad del fluido, y de la fracción de volumétrica de partículas (Ungarish 1993):

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{Eq. 3.5}$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} \right) = - \nabla p + \chi (\rho_p - \rho_f) \vec{\mathbf{g}} - \nabla \cdot \left[\chi (1 - \chi) \frac{\rho_p \rho_f}{\rho} \mathbf{v}^r \mathbf{v}^r \right] + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^p \quad \text{Eq. 3.6}$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}^p \chi) = 0 \quad \text{Eq. 3.7}$$

Siendo $\boldsymbol{\tau}^p$ el tensor de tensiones adicional donde se considera el efecto de las partículas a la mezcla y \mathbf{v}^r la velocidad relativa de las partículas respecto a la velocidad del fluido definida como $\mathbf{v}^r = \mathbf{v}^p - \mathbf{v}^f$. Cuando el tamaño de las partículas es pequeño, la velocidad relativa de las mismas también lo será y por lo tanto el efecto del tercer miembro de la derecha de la Eq. 3.6 se vuelve despreciable frente a los efectos de la flotación (L05).

Estas ecuaciones a diferencia de lo expuesto en la sección 2.1 están escritas en forma puntual. Su forma integral se presenta más adelante en la sección 3.2.

La ecuación de continuidad para los escalares pasivos permanece incambiada respecto a lo expuesto en el apartado 2.1, por lo tanto no se pondrá especial atención en ella en el desarrollo de este capítulo.

3.1.2 Ecuación constitutiva

Un fluido newtoniano es aquel cuya viscosidad tiene un valor definido que puede considerarse constante a lo largo del tiempo. En el caso incompresible, la relación entre la tensión rasante y su velocidad de deformación es lineal y su estado tensional (T) puede expresarse de acuerdo a:

$$T = -pI + 2\mu D \quad \text{Eq. 3.8}$$

En contrapartida, en los fluidos no newtonianos la viscosidad puede variar con la temperatura y la tensión de corte que se le aplica. En particular, los fluidos plásticos de Bingham son aquellos en los que el fluido se comporta como un sólido hasta que se excede un valor mínimo de la tensión rasante (tensión de fluencia), a partir del cual muestra una relación lineal entre ésta y la velocidad de deformación.

Para el cálculo de las tensiones adicionales en el modelo propuesto por L05 (τ^p) se considera la ecuación constitutiva generalizada de un fluido viscoso Newtoniano:

$$\tau_{ij}^p = 2\mu_p S_{ij} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{Eq. 3.9}$$

Donde S_{ij} representa las componentes del tensor deformación (D) y μ_p la viscosidad dinámica efectiva que incorpora el efecto de las partículas en la mezcla. El comportamiento newtoniano (que depende exclusivamente de la concentración de partículas) se tiene en cuenta por medio de la fracción $\tilde{\mu}$ mientras que el comportamiento no newtoniano se considera mediante la fracción $\hat{\mu}$; el cambio entre estos comportamientos estará dado a partir de un valor umbral χ_{lm} según la siguiente expresión:

$$\left. \begin{aligned} \mu_p &= \tilde{\mu}(\chi) & \text{si } \chi < \chi_{lm} \\ \mu_p &= \tilde{\mu}(\chi_{lm}) + \hat{\mu}(\chi, S) & \text{si } \chi_{lm} < \chi < \chi_{IM} \end{aligned} \right\} \quad \text{Eq. 3.10}$$

Siendo χ_{IM} el valor de máximo de empaquetamiento de partículas, que típicamente toma valores entre 0.5 y 0.7 para partículas sólidas (L05). Las expresiones para $\tilde{\mu}$ y $\hat{\mu}$ se describen en Eq. 3.11.

$$\left. \begin{aligned}
 \tilde{\mu}(\chi) &= \mu_m \left(1 + \frac{\frac{3}{2}\chi}{1 - \frac{\chi}{\chi_{IM}}} \right)^2 \\
 \hat{\mu}(\chi, S) &= \frac{1}{2} \tau_o (S_{II} + \varepsilon)^{-1/2} \quad ; \quad S_{II} = \frac{1}{2} S_{ij} S_{ij} \\
 \tau_o &= \frac{\chi - \chi_{Im}}{\chi_{IM} - \chi_{Im}} \tan \varphi (\rho_s - \rho_f) g \int_{x_2}^{x_2^*} \chi dx_2'
 \end{aligned} \right\} \text{Eq. 3.11}$$

Siendo φ el ángulo de fricción interna del material y x_2^* la altura de un punto arbitrario en donde el valor de χ es nulo. La reología de la suspensión de un fluido de Bingham es representada por el parámetro τ_o (tensión de fluencia) y ε un parámetro que se agrega para des-singularizar la ecuación y controlar la magnitud de la viscosidad, de manera que el límite cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ es el material visco elástico. La influencia de este parámetro en la solución ha sido discutida en L05 y previamente en Lalli et al. 1997.

3.1.3 Movimiento de las partículas

Además de la ecuación constitutiva el movimiento relativo de las partículas juega un rol fundamental a la hora de comprender la dinámica de la mezcla fluido-partícula. De acuerdo a L05 y Armenio y Fiorotto 2001, la sedimentación de partículas consideradas como esferas rígidas puede estudiarse en muchas situaciones tomando en cuenta únicamente el efecto de la flotación y los esfuerzos de Drag para el caso donde es válida la aproximación de Stokes: $C_D = 24 / Re_p$ con $Re_p < 1$ (con C_D coeficiente de Drag y Re_p número de Reynolds de partícula Eq. 3.15). La migración de partículas en suspensión se suele atribuir a los efectos de flotación por medio de la velocidad de sedimentación \tilde{w} y a la difusión turbulenta. Otro fenómeno físico que puede tener lugar, aún para valores muy pequeños de Re , es la re-suspensión de partículas (re-suspensión viscosa), considerada en la velocidad \hat{w} . Por último, se considera también el efecto difusivo generado por el gradiente de concentración presente en la mezcla, cuyo coeficiente de difusión llamaremos η . De esta manera, y de acuerdo a los resultados resumidos por Schaflinger et al 1990 y Zhang y Acrivos 1994, el movimiento de las partículas (sin la mezcla) se puede resumir por medio del conjunto de ecuaciones siguiente:

$$Q = \chi v_i^p = \chi (v_i + w_i - \eta \frac{\partial \chi}{\partial x_i}) \quad \text{Eq. 3.12}$$

Donde:

$$\left. \begin{aligned}
 \mathbf{w}_i &= \tilde{\mathbf{w}}_i + \hat{\mathbf{w}}_i \\
 \tilde{\mathbf{w}}_i &= \frac{(1-\chi)^2}{(1+\Theta\chi)} \frac{2\rho_f r_p^2}{9\mu} \Theta \mathbf{g}_i \quad ; \quad \Theta = \frac{\rho_p}{\rho_f} - 1 \\
 \hat{\mathbf{w}}_i &= -\frac{r_p^2}{\mu} \delta(\chi) \frac{\partial(\mu S_{||}^{1/2})}{\partial \chi_i} \\
 \eta &= S_{||}^{1/2} r_p^2 \gamma(\chi) \\
 \gamma(\chi) &= \frac{\chi}{3} \left(1 + \frac{e^{8.8\chi}}{2}\right) \\
 \delta(\chi) &= \frac{3}{5} \chi
 \end{aligned} \right\} \text{Eq. 3.13}$$

Para el cálculo de la velocidad de sedimentación \vec{w} se admiten en este modelo partículas esféricas bajo el régimen de Stokes, tal como se señaló anteriormente. En este trabajo se propone ampliar dicha expresión hacia aquellos casos donde Stokes pierde validez, introduciendo el coeficiente de Drag en el cálculo de esta velocidad de acuerdo a la expresión Eq. 3.14, (Rouse 1938).

$$\vec{w} = \frac{(1-\chi)^2}{(1+\Theta\chi)} \sqrt{\frac{8}{3} \Theta r_p^2 |\vec{g}|} \frac{1}{C_D} \frac{\vec{g}}{|\vec{g}|} \quad \text{Eq. 3.14}$$

$$R_{ep} = \frac{|\vec{w}| 2r_p}{\nu} \quad \text{Eq. 3.15}$$

Con ν la viscosidad cinemática de la mezcla. En cada instante de tiempo se calcula el R_{ep} en cada celda y se aplica un $C_D = 1$ en aquellos casos donde $R_{ep} > 24$, como una primera aproximación del ábaco de C_D para esferas (Rouse 1938).

A partir de las ecuaciones anteriores se puede obtener la siguiente expresión para la velocidad relativa de las partículas respecto del movimiento del fluido:

$$\mathbf{v}^r = \mathbf{v}^p - \mathbf{v}^f = (\mathbf{w} - \eta \nabla \chi) \frac{1 + \Theta\chi}{1 - \chi} \quad \text{Eq. 3.16}$$

De L05 se obtiene la siguiente relación para los campos u y v :

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} + \Theta \frac{1 - \chi}{1 + \Theta\chi} \mathbf{v}^r \quad \text{Eq. 3.17}$$

Combinando estas dos últimas ecuaciones se obtiene la siguiente relación:

$$v = u + \Theta \chi (w - \eta \nabla \chi) \quad \text{Eq. 3.18}$$

3.2 Implementación del MFP en el `caffa3d`

Para la implementación numérica del MFP se asumirá que el campo de velocidades que resuelve el `caffa3d` es el campo promedio en el volumen \bar{u} . Dado que este campo es incompresible esto implica que no es necesario modificar el módulo de balance de masa del modelo, gracias a la equivalencia de las Eq. 2.1 y Eq. 3.5. La ecuación de continuidad para escalares pasivos también permanecerá incambiada en este esquema. El sistema determinado por las Eq. 3.5 a Eq. 3.7 se sustituirá entonces por el nuevo sistema que contempla la forma integral de las mismas Eq. 2.1, Eq. 3.19 y Eq. 3.20:

$$\left. \begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} d\Omega + \int_s \rho \bar{v} (\bar{v} \cdot \hat{n}_s) dS &= \int_{\Omega} \chi (\rho_s - \rho_f) \bar{g} d\Omega + \int_s -p \hat{n}_s dS + \dots \\ \dots + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\chi (1 - \chi) \frac{\rho_s \rho_f}{\rho} v^r v^r) d\Omega + \int_s 2\mu D \hat{n}_s dS & \end{aligned} \right\} \quad \text{Eq. 3.19}$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \chi}{\partial t} d\Omega + \int_s \chi (\bar{v} + \bar{w}) \cdot \hat{n}_s dS = \int_s \eta \chi (\nabla \chi \cdot \hat{n}_s) dS \quad \text{Eq. 3.20}$$

Para discretizar la ecuación de cantidad de movimiento de la mezcla se adaptará el esquema descrito en el capítulo 2 modificando los coeficientes A_p y Q_p de manera de compatibilizar los términos de las Eq. 2.2 y Eq. 3.19 (sección 2.1).

El transporte de partículas seguirá un esquema similar al descrito en el capítulo 2 valiéndose de la analogía de la Eq. 3.20 con la ecuación de transporte de escalares, aplicando un método inspirado en VOF (Volume of fluid) para preservar la presencia de una interface bien definida como la que podría generarse entre el sólido y el fluido (sección 3.2.2).

Para esto, se incorpora un nuevo módulo al `caffa3d`: `FluidParticleLalliModelManager` donde se calcula además la viscosidad efectiva μ_p que recibe un tratamiento similar al de la viscosidad turbulenta generada con los modelos de Smagorinsky (sección 3.2.3) y se resuelve la ecuación de transporte de partículas (Eq. 3.20)

La ecuación de continuidad del fluido (ecuación de incompresibilidad) permanece incambiada por lo que no se modificará la rutina del `caffa` involucrada en su resolución (`IncompressibleMassBalanceEq`).

El nuevo esquema iterativo se resume en la Figura 3.1.

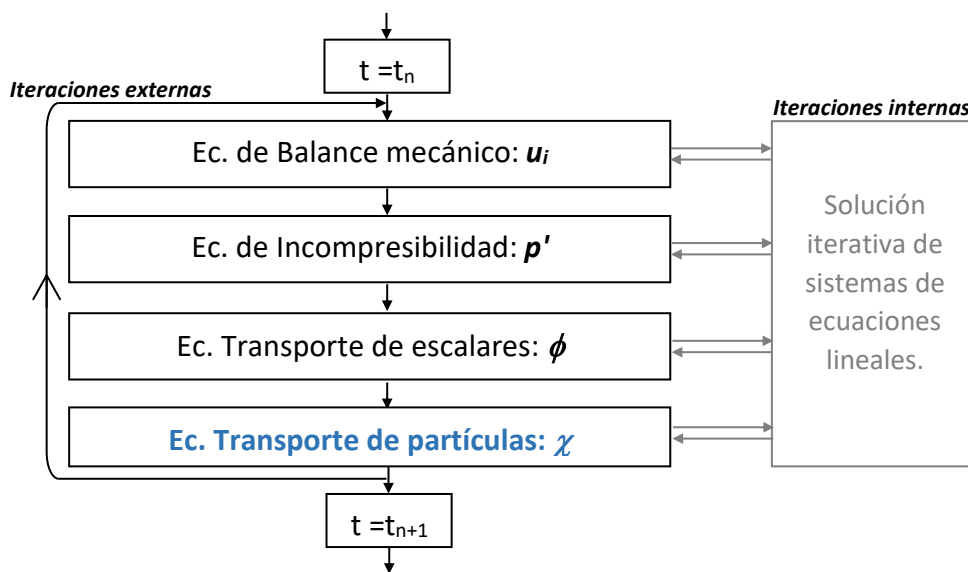


Figura 3.1: Esquema general del proceso iterativo implementado en el `caffa3d` para un paso temporal incorporando el modelo de Partículas.

3.2.1 Ecuación de cantidad de movimiento de la mezcla.

Para resolver con el `caffa3d` la ecuación de cantidad de movimiento de la mezcla se utilizará el mismo esquema implementado en el módulo `ViscousFluidEquation`, adaptando los coeficientes de la matriz (descritos en el capítulo 2) para trabajar con la mezcla en lugar de un fluido viscoso Newtoniano.

Término convectivo:

En el esquema original del modelo, el término convectivo queda representado por la siguiente expresión proveniente de Eq. 2.6:

$$F_e^{cu_i} = \int_S \rho_f u_i (\vec{u} \cdot \hat{n}_s) dS \approx \underbrace{A_P^{cu_i e} \cdot u_{iP} + A_E^{cu_i e} \cdot u_{iE}}_{\text{IMPLICITO} = I_{cu_i}} - \underbrace{Q_P^{cu_i e}}_{\text{EXPLICITO} = E_{cu_i}}$$

En el caso de la mezcla fluido-partícula los flujos convectivos deben calcularse a partir de los campos (v, ρ) . El procedimiento utilizado para la corrección se hará modificando únicamente el cálculo explícito. Los términos que corresponderían a los cálculos implícitos se incorporan como un sumidero o fuente, encargado de quitar un aporte análogo al término I_{cu_i} y sumando el aporte correcto I_{cv_i} calculado a partir de (v, ρ) , mientras que el término explícito se calcula directamente como E_{cv_i} :

$$\left. \begin{aligned} F_e^{cv_i} &= \int_S \rho v_i (\vec{v} \cdot \hat{n}_s) dS \approx \dot{m}_{ive} v_{ie} = \underbrace{I_{cu_i-v_i}'}_{\text{IMPLICITO}} + \underbrace{(I_{cv_i}' + E_{cv_i}' - I_{cu_i-v_i}')}_{\text{EXPLICITO}} \\ E_{cv_i} &= \gamma_{CDS} [\dot{m}_{ive} v_{ie} - \max(\dot{m}_{ive}, 0) v_{iP} - \min(\dot{m}_{ive}, 0) v_{iE}] \\ \dot{m}_{ve} &= \int_S \rho (\vec{v} \cdot \hat{n}_s) dS \\ I_{cu_i-v_i}' &= A_P^{cv_i e} \cdot u_{iP} + A_E^{cv_i e} \cdot u_{iE} \quad ; \quad A_P^{cv_i e} = \max(\dot{m}_{ve}, 0) \quad A_E^{cv_i e} = \min(\dot{m}_{ve}, 0) \end{aligned} \right\} \text{Eq. 3.21}$$

Donde los I' son los términos que se calcularían regularmente en forma implícita (Eq. 2.6) pero que al agregarlos como una fuente son calculados a partir de los campos disponibles (provenientes de la iteración externa anterior), asumiendo que en la convergencia estos valores tienden a los valores en el instante actual.

Término difusivo y de presiones:

El tratamiento de la componente difusiva así como la de las presiones permanecen invariantes para la discretización ya que dependen del campo de velocidades \vec{u} , viéndose afectado únicamente por el cambio en la viscosidad dinámica del material. El

efecto de las partículas se contempla por medio de la viscosidad modificada tal como se describió en la sección 3.1, a partir de la implementación del MFP.

Esfuerzos de volumen:

En término de flotación (Eq. 2.8) debe considerarse el efecto de la presencia de partículas, agregando por tanto una componente adicional de la forma:

$$\int_{\Omega} \chi(\rho_p - \rho_f) \bar{g} e_i d\Omega \approx \chi(\rho_p - \rho_f) \bar{g} e_i \Delta\Omega = Q_p^g \quad \text{Eq. 3.22}$$

En este término se incorporará además el efecto de la componente de fuerza que depende de la velocidad relativa:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\chi(1-\chi) \frac{\rho_p \rho_f}{\rho} v^r v^r) d\Omega \approx \nabla \cdot (\chi(1-\chi) \frac{\rho_p \rho_f}{\rho} v^r v^r) \Delta\Omega = Q_p^v \quad \text{Eq. 3.23}$$

Término no estacionario:

Al igual que lo expresado en la sección 2.1 se tomará provecho del algoritmo existente para el cálculo del término no estacionario ya disponible en el `caffa3d`.

Para el cálculo de este término se llamará entonces a la rutina a partir de los campos (v, ρ) , donde se calculan los términos explícitos $Q_p^{tv_i}$ y los coeficientes $A_p^{tv_i}$ del término implícito que irán a la matriz de las u_i . Es necesario eliminar este último aporte y en su lugar agregar el correcto donde participa v_i . Esta corrección se hará en forma explícita mediante un término fuente:

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} d\Omega \approx \overbrace{A_p^{tv_i} u_{ip}}^{\text{IMPLICITO}} - \overbrace{Q_p^{tv_i} + A_p^{tv_i} \cdot (v'_{ip} - u'_{ip})}^{\text{EXPLICITO}} \quad \text{Eq. 3.24}$$

Análogamente a lo expresado en el cálculo del término convectivo los supraíndices ' aquí indican que los campos corresponden a la iteración externa anterior y se asume que en la convergencia estos valores tienden a los del instante actual.

3.2.2 Ecuación de continuidad de χ - módulo FluidParticleLalliModel

El módulo FluidParticleLalliModel se diseña para resolver la ecuación de transporte de partículas (Eq. 3.20) determinando el campo χ (es donde se gesta la implementación del MFP). En este módulo se calcula además la velocidad de la mezcla promedio en la masa \bar{v} y la viscosidad efectiva μ_p , que considera la viscosidad molecular del fluido más la viscosidad de partículas (Eq. 3.11).

En términos generales el algoritmo utilizado para calcular las características de las partículas sigue el diagrama de la Figura 3.2

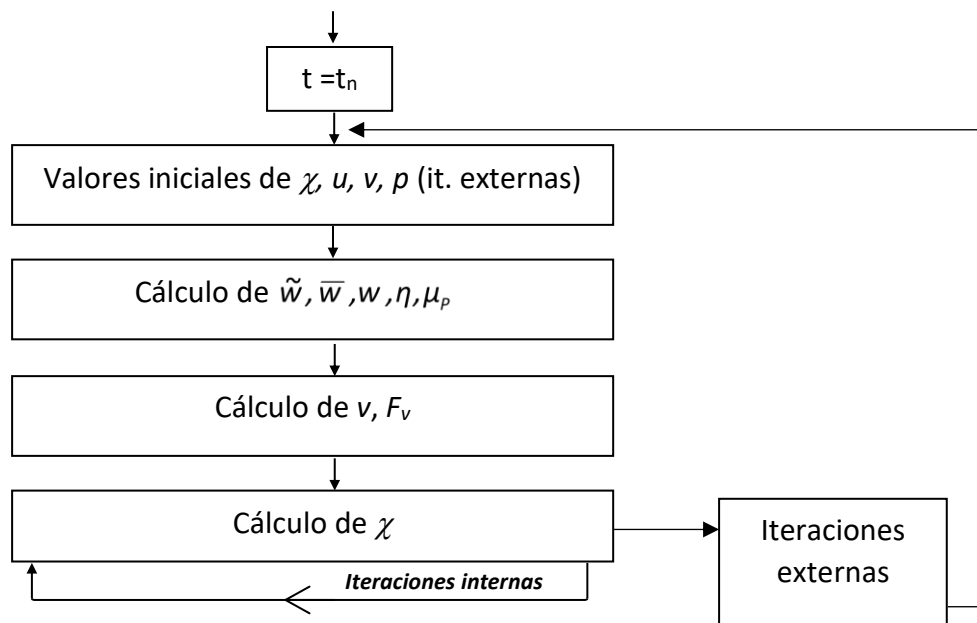


Figura 3.2: Diagrama general del módulo de partículas MFC.

Para resolver la ecuación de continuidad de χ se emplea un método inspirado en el modelo VOF, que es una técnica de seguimiento de superficie aplicada a un malla euleriana fija de utilidad para resolver el flujo de dos o más fluidos inmiscibles. El modelo VOF busca la solución de un único sistema de ecuaciones de momento, donde cada fluido es identificado localmente con un campo escalar que representa la fracción de volumen de éstos. El valor de este campo toma valores 0 en un fluido y 1 en el otro, y un valor intermedio en la interface. El conjunto de ecuaciones se cierra con el seguimiento de este campo escalar en todo el dominio, en cuya discretización se encuentra la clave para resolver adecuadamente la interface.

Al igual que en el esquema VOF tradicional se utiliza un esquema de "donante-aceptor" (del inglés donor-acceptor) para determinar la cantidad de fluido advectado a través de la cara. El valor de la fracción de volumen en la cara (χ_f) es calculado teniendo en cuenta los valores en las celda que dona y la celda que acepta (χ_D y χ_A respectivamente, Figura 3.3). El valor "downwind" (celda que acepta) se tiene en cuenta para mantener la resolución de la interface (aunque no garantiza una solución acotada) mientras que el valor "upwind" (celda donante) si bien acota los valores en convergencia promueve la difusión y por tanto difumina la zona de transición. Se emplea entonces un blending entre χ_D y χ_A de manera de garantizar valores acotados manteniendo una interface bien definida, utilizando un cambio hacia un esquema upwind en función del ángulo entre la interface y la dirección del flujo (activado abruptamente cuando el ángulo entre estos es 45°). Sin embargo, varios estudios han demostrado que la formulación "donante-aceptor" tiende a deformar numéricamente la interface por no cumplir completamente con los criterios de convergencia y por el pasaje brusco entre los esquemas (Ubbink et al. 1997). El cambio entre los esquemas downwind-upwind debe realizarse entre dos métodos de alta resolución con una transición gradual entre ellos y no en forma abrupta como se propone en el VOF original (Ubbink et al. 1997).

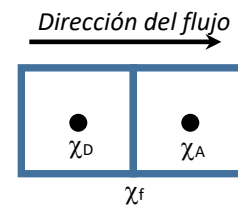


Figura 3.3: Volumen de control 1D del esquema "donante-aceptor".

El esquema utilizado en el *caffa3d* es una formulación adaptada de la expuesta en Ubbink et al. 1999. Se emplea un esquema inspirado en CICSAM (Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes) que combina una resolución nítida de la interfase con la preservación de valores acotados de χ . Esa formulación está basada en valores normalizados según el NVD (Normalised Variable Diagram).

El valor de las variables normalizadas (en la celda donante y en la cara f) se calculan según la Eq. 3.25 de acuerdo al volumen de control de la Figura 3.4:

$$\tilde{\chi}_i = \frac{\chi_i - \chi_U}{\chi_A - \chi_U} \quad \text{Eq. 3.25}$$

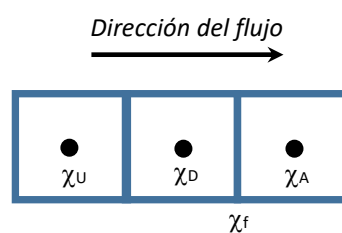


Figura 3.4: Volumen de control 1D del esquema "donante-aceptor". Celdas utilizadas para el NVD.

A diferencia del VOF, en este caso, el valor de la fracción volumétrica de volumen (representada por χ) puede tomar valores entre 0 y 1 en cualquier celda del dominio. Como esquema de discretización se adoptó el ULTIMATE-QUICKTEST (UQ), donde el valor de la variable en el centro de cara está dado por:

$$\tilde{\chi}_{f_{UQ}} = \begin{cases} \min \left\{ \frac{8c\tilde{\chi}_D + (1-c)(6\tilde{\chi}_D + 3)}{8}, \tilde{\chi}_D \right\} & \text{si } 0 \leq \tilde{\chi}_D \leq 1 \\ \tilde{\chi}_D & \text{si } \tilde{\chi}_D < 0, \tilde{\chi}_D > 1 \end{cases} \quad \text{Eq. 3.26}$$

$$c = \sum_{\text{caras}} |c_f^{\text{out}}|$$

Donde c_f^{out} representa el número de Courant para el flujo saliente de cada una de las caras de la celda donante.

Se utiliza un coeficiente de ponderación β_f (Eq. 3.27), que se obtiene operando los valores de $\tilde{\chi}_D$ y $\tilde{\chi}_f$ según Eq. 3.25 y Eq. 3.26, que contiene la información de los valores de las celdas upwind así como la información de la distribución en las celdas donante y aceptora:

$$\beta_f = \frac{\tilde{\chi}_{f_{UQ}} - \tilde{\chi}_D}{1 - \tilde{\chi}_D} \quad \text{Eq. 3.27}$$

De esta manera el valor de la fracción volumétrica de partículas en la cara f estará dada por:

$$\chi_{f_{UQ}} = (1 - \beta_f)\chi_D + \beta_f\chi_A \quad \text{Eq. 3.28}$$

Analizando ahora la componente convectiva de Eq. 3.19 y aplicando lo resumido en esta sección se obtiene:

$$\int_S \chi(\vec{v} + \vec{w}) \cdot \hat{n}_s dS = F_f \chi_f = F_f \chi_{f_{UQ}} = F_f \left((1 - \beta_f)\chi_D + \beta_f\chi_A \right) = A_D\chi_D + A_A\chi_A \quad \text{Eq. 3.29}$$

Donde F_f representa el flujo de la velocidad $(\vec{v} + \vec{w})$ a través de la cara f.

En el caso en que el flujo tiene la dirección de la Figura 3.4 la celda donante sería la celda P mientras que la que acepta sería la celda E, invirtiéndose cuando el flujo va en sentido contrario. La cara “f” tomaría el valor de la cara “e”. Al igual que lo expresado en el capítulo anterior el valor de los coeficientes se obtiene sumando los valores a lo largo de cada una de las caras del volumen de control.

Se agrega además a este esquema un coeficiente de blending γ_{MFP} ($0 \leq \gamma_{MFP} \leq 1$), de manera de acentuar el aporte upwind en aquellas situaciones que se requiera, en particular para reducir oscilaciones cuando la densidad del fluido es baja en relación a la densidad de las partículas:

Eq. 3.30

$$\begin{aligned} F_e \chi_e &= \gamma_{MFP} F_e \chi_{e_{UQ}} + (1 - \gamma_{MFP}) \max(F_e, 0) \chi_{e_{UPWIND}} = \\ &= \gamma_{MFP} F_e \left((1 - \beta_f) \chi_P + \beta_f \chi_E \right) + (1 - \gamma_{MFP}) \max(F_e, 0) \overbrace{\max(F_e, 0) \chi_P + \max(F_e, 0) \chi_E}^{\chi_{e_{UPWIND}}} = \\ &= A_P \chi_P + A_E \chi_E \end{aligned}$$

Donde $\chi_{e_{UPWIND}}$ es el valor del campo siguiendo un esquema básico upwind, que será exclusivo cuando γ_{MFP} tenga un valor igual a 0.

Para garantizar la conservación de la masa en el modelo a la vez que se mantienen los valores χ acotados ($0 < \chi < \chi_{IM}$) se genera una rutina de corrección de este campo. Se realiza un proceso iterativo de manera de acotar los valores de χ a su rango de validez, y haciendo un reparto del déficit-excedente de masa entre las celdas con valores positivos de χ y alejados de sus valores límites. Tanto el rango de χ utilizado para realizar el reparto como el número de iteraciones en las que se resuelve el proceso son predefinidos por el usuario.

3.2.3 Viscosidad dinámica total del material

La viscosidad total del material estará compuesta por la viscosidad molecular (μ_m) y la suma de las viscosidades efectivas tanto de partículas como la generada a partir del módulo de turbulencia (μ_T). Este cálculo es realizado directamente en el módulo de turbulencia del `caffa3d` (`TurbulenceLESmodelsManager`), donde la Eq. 2.19 es reemplazada por la siguiente expresión:

Eq. 3.31

$$\mu = \mu_m + \mu_p + \mu_T$$

4 VALIDACION DEL MODELO

En este capítulo se realizan una serie de simulaciones numéricas de diferentes experimentos con el objetivo de validar el código `caffa3d` con el modelo de partículas incorporado, comparando sus resultados con los de algunos artículos científicos seleccionados de manera de cotejarlos ya sea con experimentos físicos (de laboratorio) o experimentos numéricos donde se utiliza otro código que implementa un modelo de partículas similar al de este trabajo.

Los experimentos elegidos consisten en el análisis del desmoronamiento de un talud analizando el desmoronamiento del talud, una columna de sedimentación de arena y la erosión de un lecho de arena causada por chorros turbulentos sumergidos circulares y planos.

Se estudia la sensibilidad al paso temporal, a la malla elegida y a algunos parámetros numéricos del modelo.

El esquema para la integración numérica seleccionado en todos los casos es el esquema de tres niveles obtenido con el método de Euler hacia atrás de segundo orden. Cabe señalar que este punto es un aspecto novedoso en la implementación del modelo, dado que no se encontró documentación de la utilización de un esquema similar para el comportamiento de una mezcla fluido-partículas en conjunción con un esquema implícito (lo que permite la utilización de pasos temporales considerablemente mayores a los que se podrían utilizar en una implementación explícita) a la vez que se implementa un esquema LES para la simulación de la turbulencia.

El bucle de interacciones externas se realiza 10 veces ($LSG = 10$), valor de referencia empírico. La sensibilidad de las simulaciones a este parámetro es analizada también en alguno de los ejemplos.

4.1 Desmoronamiento de talud.

El ejemplo presentado a continuación reproduce el experimento numérico descrito en Lalli et al. 2006 (L06) donde se realiza la simulación numérica del desmoronamiento del talud de una presa. Con la reproducción de esta simulación se busca analizar la performance del *caffa3d* con el módulo de partículas incorporado mediante la resolución de un ejemplo sencillo de resultado conocido, comparando además con un modelo numérico diferente que discretiza las ecuaciones usando el método de diferencias finitas, implementado un método explícito de segundo orden para representar los términos tanto convectivos como difusivos y siguiendo un esquema temporal tipo Runge-Kutta de tercer orden. En este experimento es especialmente importante reflejar el comportamiento constitutivo del lecho de partículas a través de la manifestación de una tensión de fluencia y un ángulo de talud infinito.

Si bien el modelo de partículas es esencialmente el mismo, L06 considera una versión modificada para el cálculo de las tensiones de fluencia del material (τ_o), utilizando una función de ponderación que depende del tamaño de la malla cuyo propósito es el de suavizar la transición fluido Newtoniano a no Newtoniano.

Los parámetros utilizados para la simulación se exponen en la tabla 4.1. Estos parámetros fueron elegidos de manera de respetar los valores de los números adimensionados de L06: $Re = 4.6 \times 10^4$ y $Fr = 0.255$. Se conservaron además los valores de la velocidad característica $U = 0.31\text{m/s}$ y el tiempo característico $T_o = 0.48$. Como longitud característica se consideró la altura inicial del escalón h y en base a los números adimensionados aquí descriptos se obtuvo un valor de 15cm para ella. Los valores del radio de partículas y del parámetro ε no fueron documentados en L06, de manera que se utilizaron valores propios. Donde:

- | | |
|--|---|
| • $Re = UL/v$ | número de Reynolds |
| • $Fr = U/(gL)^{0.5}$ | número de Froude |
| • $U = (g'h)^{0.5}$ | velocidad característica |
| • h | altura inicial del talud |
| • $g' = \chi_{IM} g \ominus$ | g |
| • $T_o = L/U$ | tiempo característico |
| • $p = p_T - \rho_f \vec{g} \cdot \vec{x}$ | presión dinámica con p_T presiones y \vec{x} posición |
| • D | tensor velocidad de deformación |
| • v | viscosidad cinemática |

ρ_f (kg/m ³)	ρ_s (kg/m ³)	μ_m (kg/ms)	r_p (μ m)	ϕ ($^\circ$)	χ_{IM}	χ_{Im}	ε (1/s ²)	h (cm)	γ_{MFP}
1000	1100	1×10^{-3}	75	45	0.65	0.52	1×10^{-6}	15	1

Tabla 4.1: Parámetros utilizados en la simulación *caffa3d*. Taludes.

Se realizó una primer simulación de referencia, caso base TAM201, cuyo dominio consiste en un prisma rectangular definido en un único bloque (Figura 4.1), con celdas cúbicas uniformes de lado $\Delta=10.4\text{mm}$ y un paso temporal $\Delta t=1 \times 10^{-3}\text{s}$ (Tabla 4.2), más adelante en esta misma sección se realiza un estudio de sensibilidad a estos parámetros. Las condiciones de borde utilizadas fueron de pared en las caras superior e inferior y de simetría en las cuatro caras laterales.

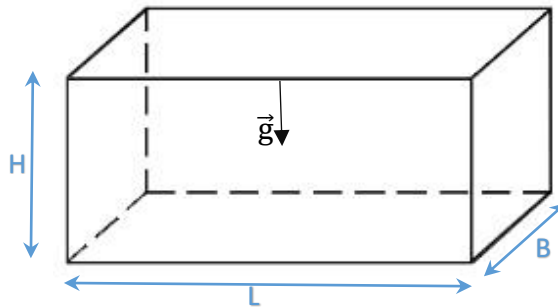


Figura 4.1: Esquema de dominio de simulación. Taludes.

Caso	L (m)	B (m)	H (m)	Δ (mm)	Δt (s)
TAM201	1	1	1	10.4	1×10^{-3}

Tabla 4.2: Resolución espacial Δ y temporal Δt de la simulación *caffa3d*. Dimensiones del Dominio: L-Largo, B-Ancho, H-Altura. Taludes.

En la figura 4.2 se presenta la configuración inicial de las partículas (que es idéntica en todos los cortes verticales del dominio) donde la interface fluido-partículas es descrita por medio de un gradiente fuerte en los valores de χ , tomando el reposo como condición inicial de la velocidad. La misma configuración inicial se utilizó en todos los casos simulados.

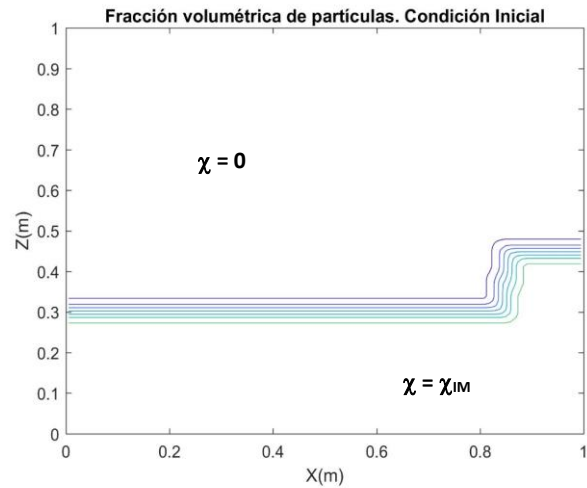


Figura 4.2: Condición inicial de χ . Curvas de nivel entre 0.02 y 0.62 cada 0.1.

Los resultados muestran que existe un buen acordamiento entre la simulación TAM201 y la simulación L06. En estados intermedios de la ruptura del talud cuando el flujo puede considerarse “cuasi-estacionario”, el ángulo de deslizamiento tiene lugar de acuerdo al ángulo de fricción interna del material ($\phi = 45^\circ$) alcanzando luego un ángulo residual de cizalla menor cuando la energía cinética es disipada. Esta observación concuerda con lo visto por Allen 1970 y Sleath 1984 (entre otros), quienes señalan que existen en realidad dos ángulos característicos de reposo del material, por un lado el ángulo de inicio de fluencia (que coincide con el ángulo de fricción interna ϕ), y el ángulo residual de cizalla que es el ángulo final del talud (ϕ_r); verificándose experimentalmente que $\phi_r < \phi$ (Allen 1970, Statham 1974). Sin embargo, la evolución es considerablemente más rápida en L06. Las conclusiones resumidas en este párrafo pueden visualizarse en la Figura 4.3, donde se presenta la evolución del campo de velocidades y del desmoronamiento del talud definido por medio de la curva de nivel $\chi = \chi_{im}$ a los efectos de interpretar los resultados. Los gráficos corresponden al plano medio del dominio ($y = B/2$) y se utiliza un filtro de 9 puntos para una mejor visualización. Los tiempos seleccionados para la representación muestran el inicio del desmoronamiento, instantes donde se refleja la “cuasi-estacionariedad” del flujo y la configuración final. Dado que la simulación numérica es “cuasi-bidimensional”, los resultados observados en cualquier plano vertical son prácticamente idénticos.

Con el propósito de analizar la resolución espacial utilizada se realizó un estudio de sensibilidad a la misma, utilizando dos mallas adicionales de mayor y menor resolución variando el número de celdas y el tamaño del dominio; manteniendo incambiados los restantes parámetros. De igual forma se realizó un análisis de sensibilidad al paso temporal. Se realizó además una simulación modificando ambos parámetros en simultáneo para contemplar posibles acoples no lineales entre ellos. Los parámetros utilizados en las diferentes simulaciones se resumen en la Tabla 4.3 y sus resultados se presentan desde la Figura 4.4 a la Figura 4.8.

Caso	L (m)	B (m)	H (m)	Δ(mm)	Δt (s)
TAL201	1	1	1	15.6	1×10^{-3}
TAP201	1	0.5	0.5	7.81	1×10^{-3}
TAM101	1	1	1	10.4	1×10^{-2}
TAM301	1	1	1	10.4	5×10^{-4}
TAP101	1	0.5	0.5	7.81	1×10^{-2}

Tabla 4.3: Resolución espacial Δ y temporal Δt de las diferentes simulaciones *caffa3d*. Dimensiones del Dominio: Largo, (L), Ancho (B), Altura. (H). Análisis de sensibilidad a la resolución espacial y temporal. Taludes.

La independencia en la elección del parámetro numérico ε también fue verificada realizándose dos simulaciones adicionales modificando su valor (Tabla 4.4) y manteniendo incambiados los restantes parámetros respecto a la simulación base (TAM201).

Caso	ε (1/s²)
TAM205	1×10^{-5}
TAM206	1×10^{-7}

Tabla 4.4: Sensibilidad al parámetro ε de la simulación *caffa3d*.

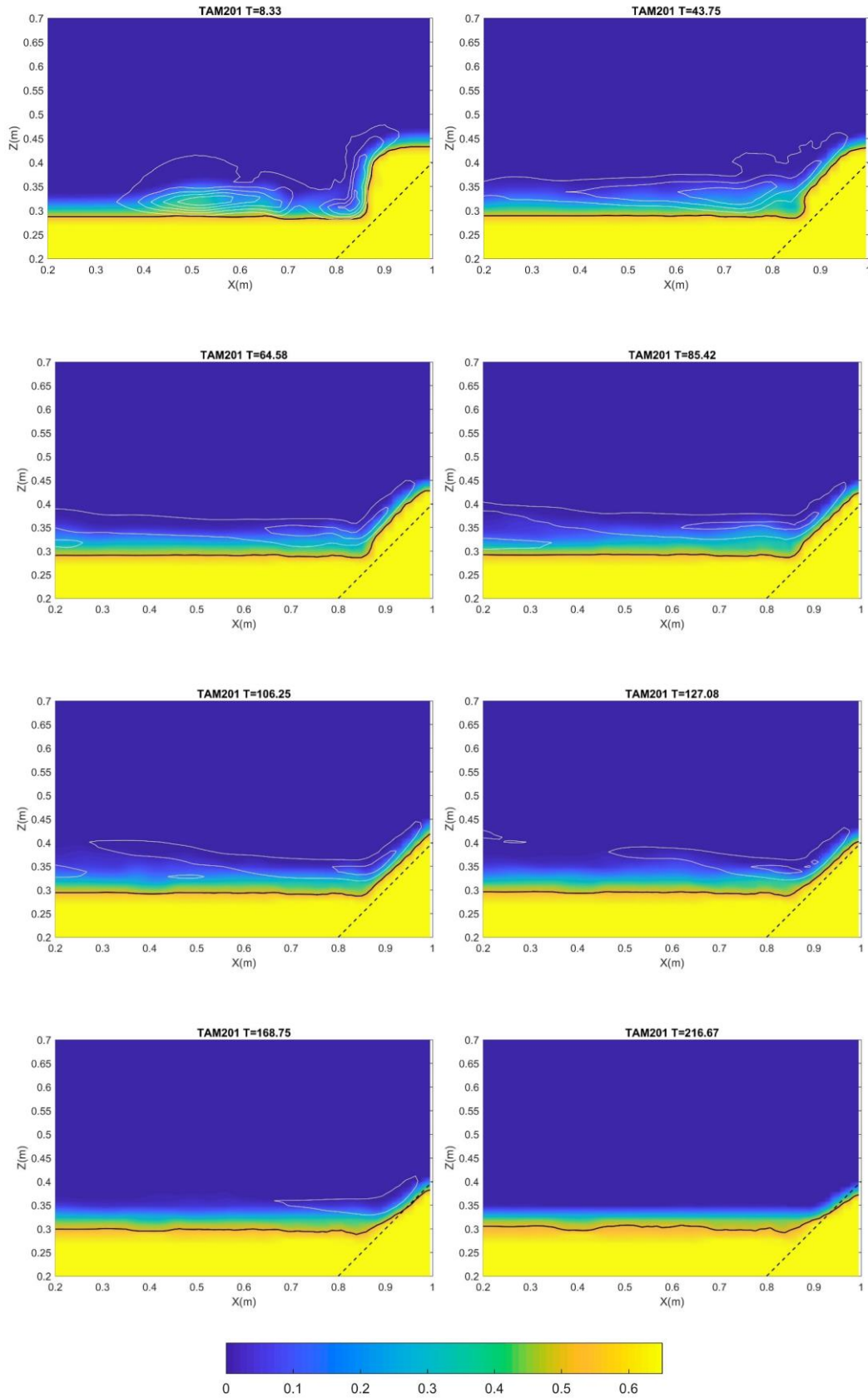


Figura 4.3: Evolución temporal de la simulación numérica (caffa3d) de la ruptura de una presa. Caso TAM201. Color: Isosuperficies de χ ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensional con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.

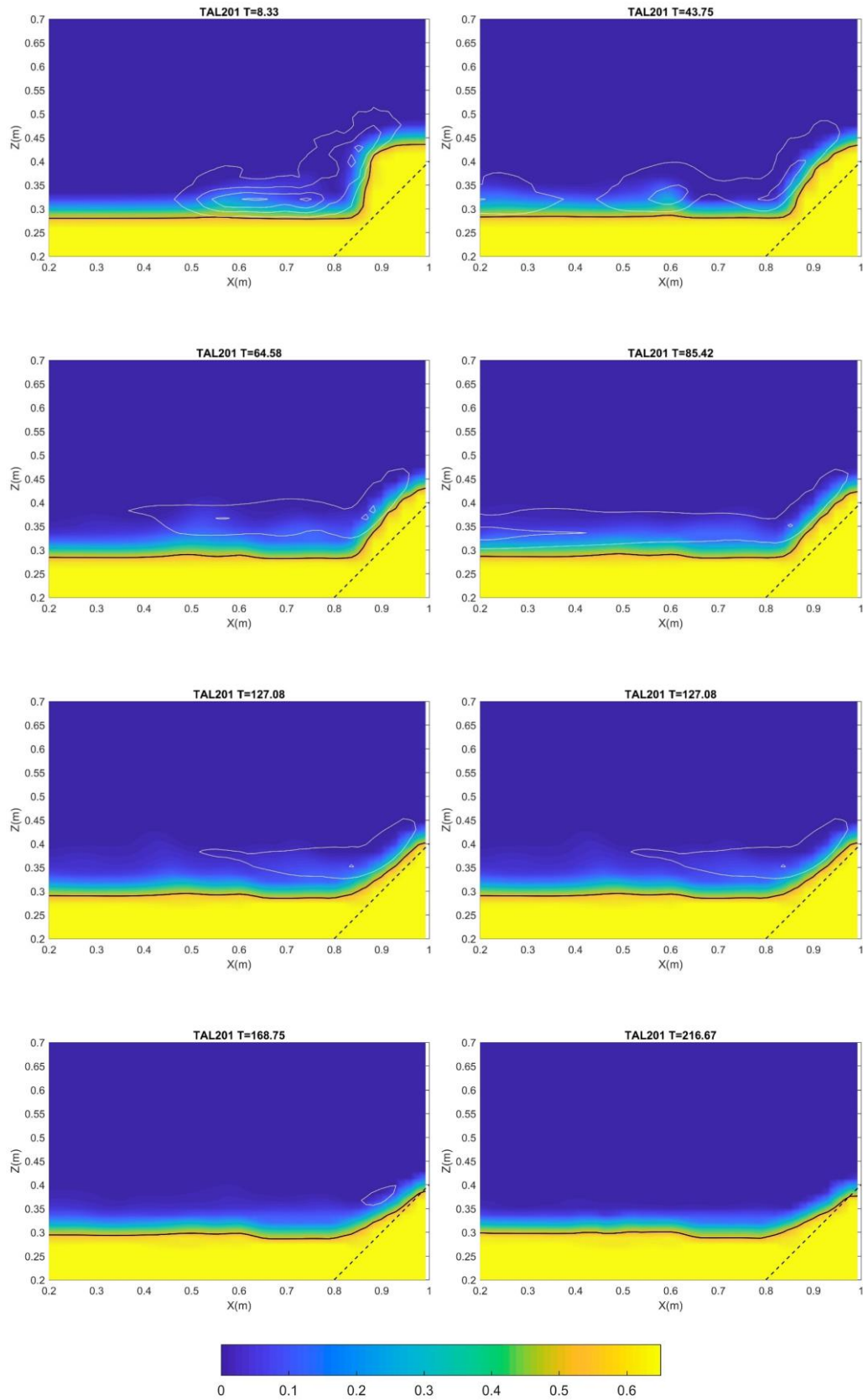


Figura 4.4: Evolución temporal de la simulación numérica (caffa3d) de la ruptura de una presa. Caso TAL201. Color: Isosuperficies de χ ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionalada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.

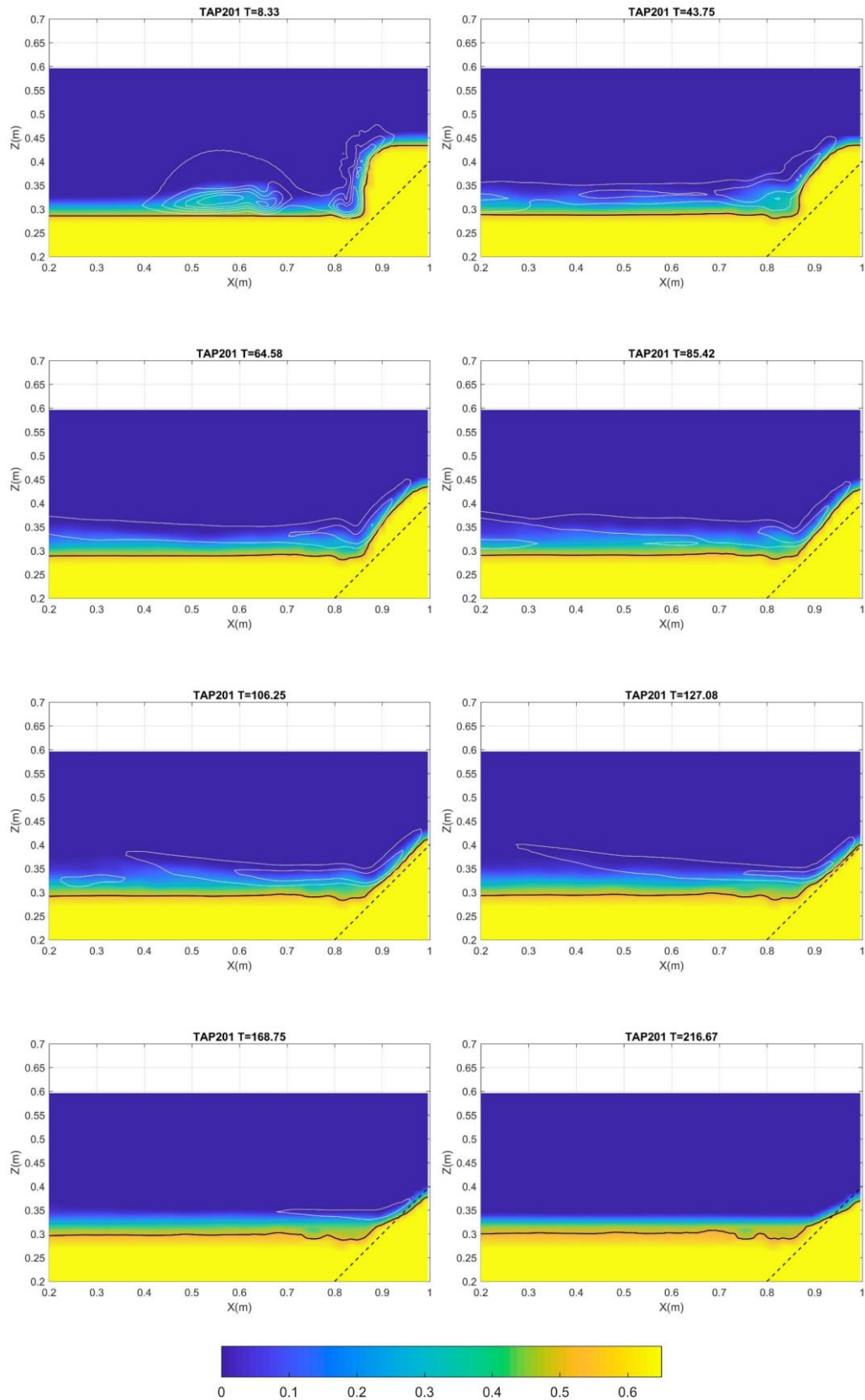


Figura 4.5: Evolución temporal de la simulación numérica (caffa3d) de la ruptura de una presa. Caso TAP201. Color: Isosuperficies de χ ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensional con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.

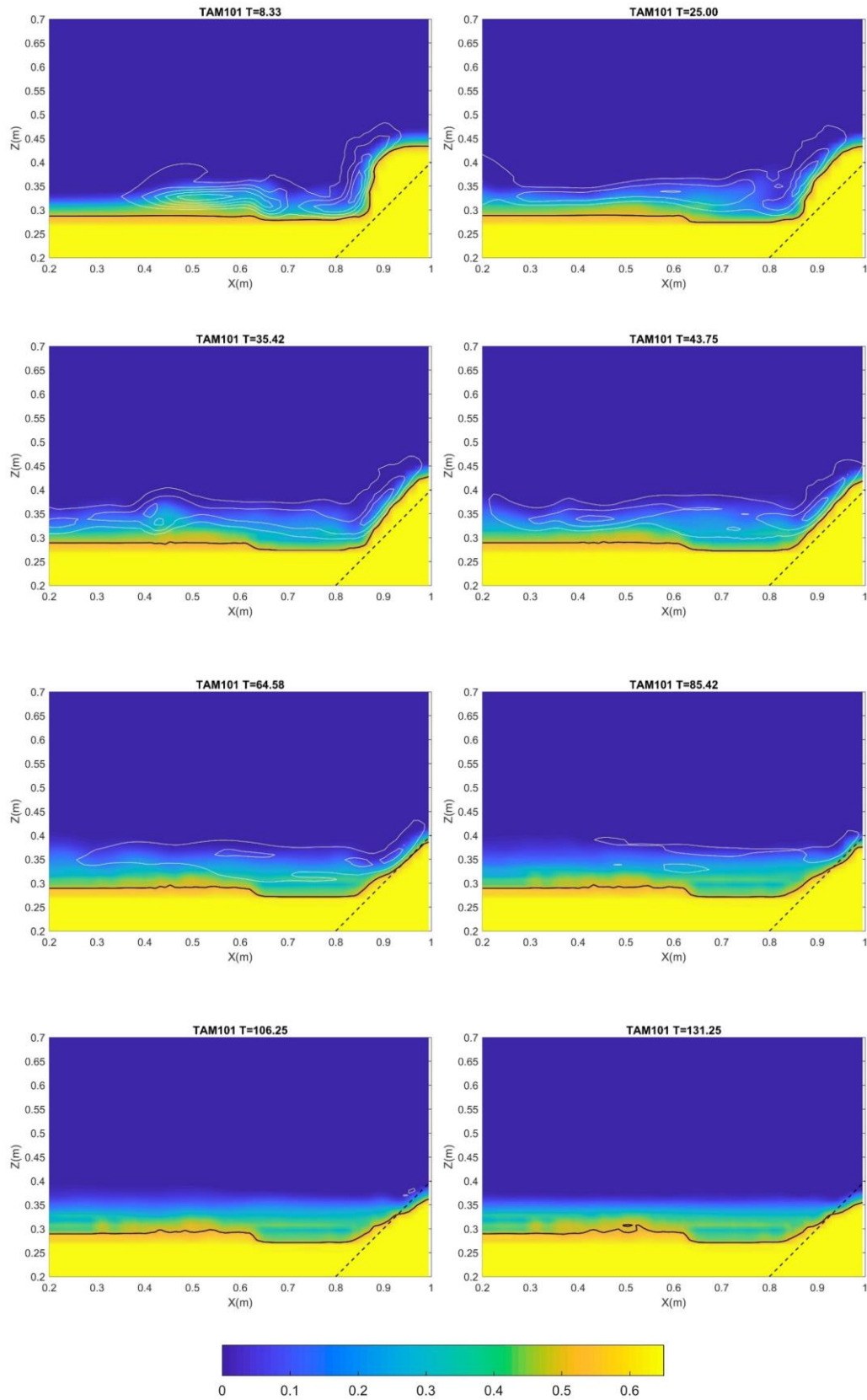


Figura 4.6: Evolución temporal de la simulación numérica (caffa3d) de la ruptura de una presa. Caso TAM101. Color: Isosuperficies de χ ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensional con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.

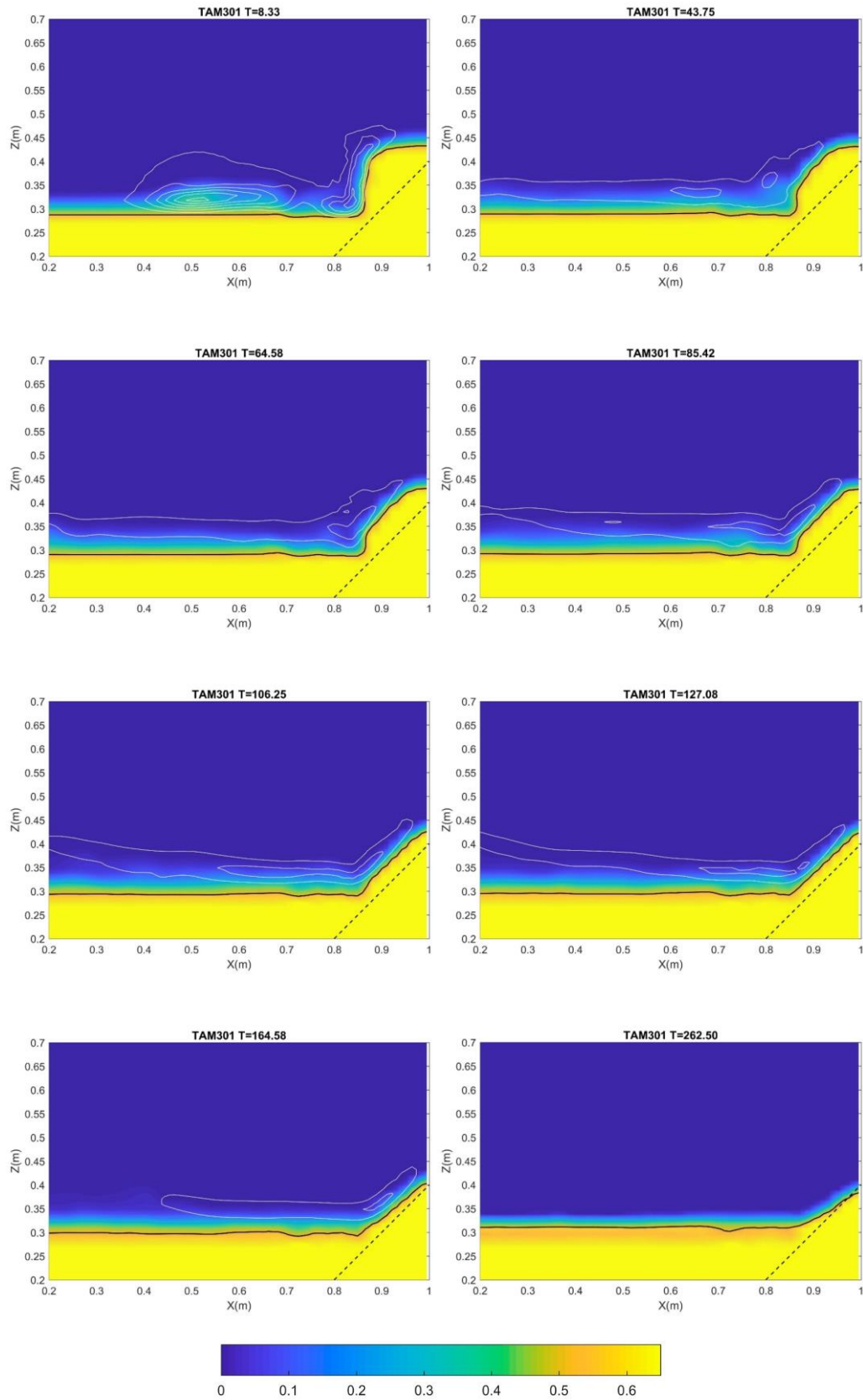


Figura 4.7: Evolución temporal de la simulación numérica (caffa3d) de la ruptura de una presa. Caso TAM301. Color: Isosuperficies de χ ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensional con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.

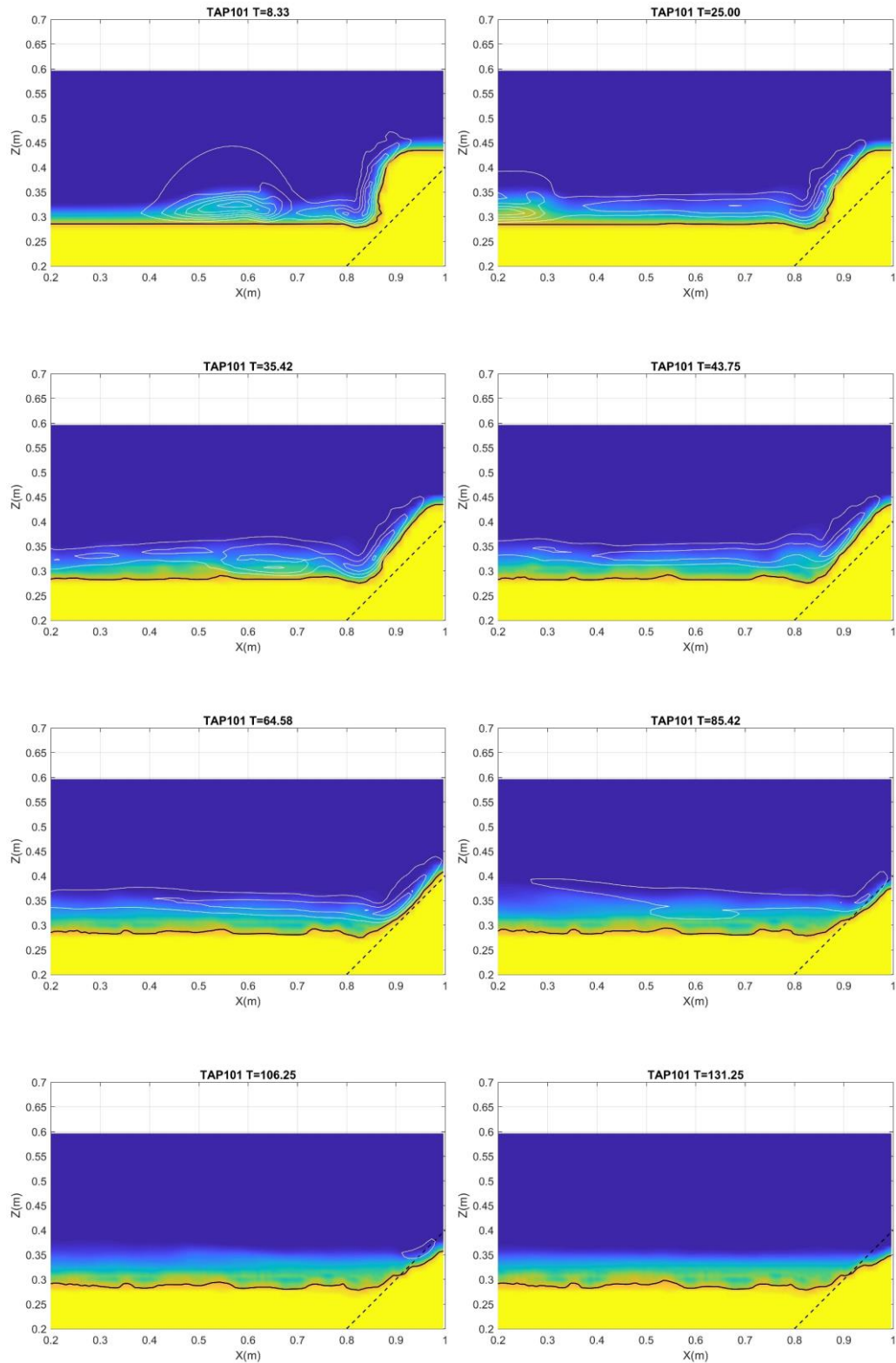


Figura 4.8: Evolución temporal de la simulación numérica (caffa3d) de la ruptura de una presa. Caso TAP101. Color: Isosuperficies de χ ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionalada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.

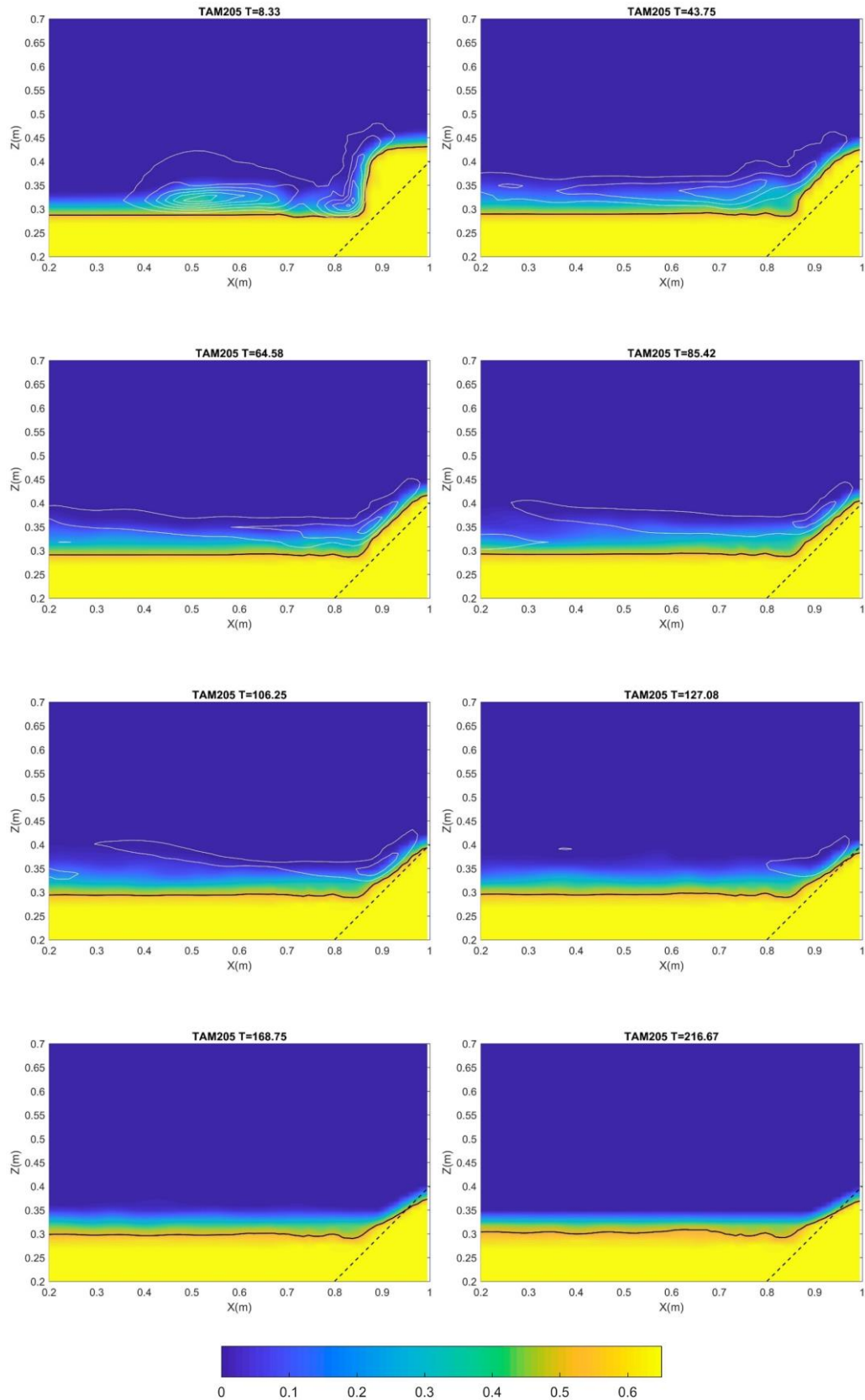


Figura 4.9: Evolución temporal de la simulación numérica (caffa3d) de la ruptura de una presa. Caso TAM205. Color: Isosuperficies de χ ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensional con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.

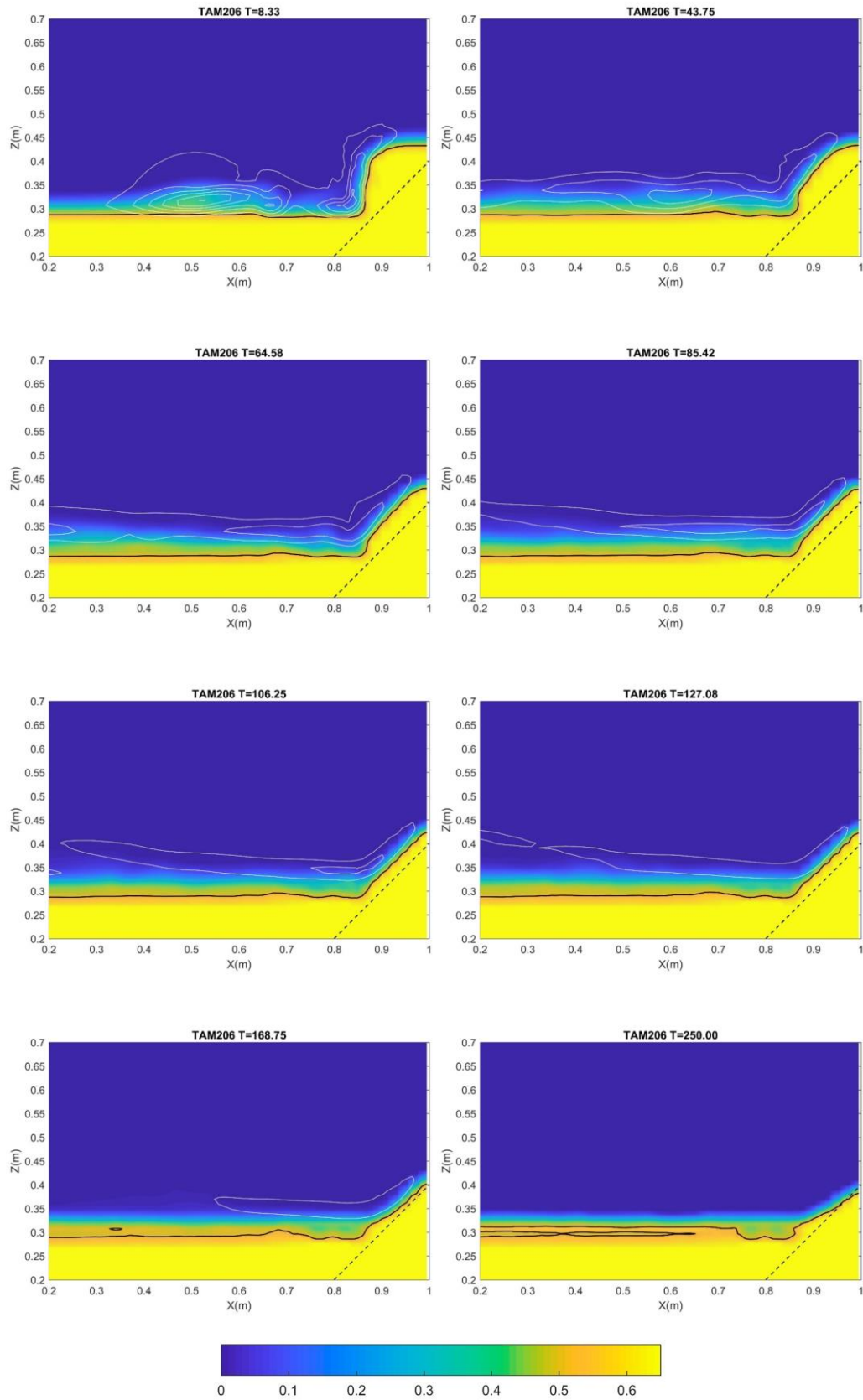


Figura 4.10: Evolución temporal de la simulación numérica (calfa3d) de la ruptura de una presa. Caso TAM206. Color: Isosuperficies de χ ; línea negra llena: curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido); contornos blancos: módulo de la velocidad adimensionalada con U desde 0.05 cada 0.05; línea negra punteada: pendiente 45°.

La conservación de la masa fue verificada en todos los casos, a modo de ejemplo se presenta para el caso TAM201 la diferencia en la distribución de χ entre la configuración final y la configuración inicial donde puede visualizarse la redistribución de las partículas sólidas (Figura 4.11), que migran desde la zona superior del talud hacia una zona dispersa próxima a la interface. Esta situación se debe probablemente a la poca diferencia entre la densidad del fluido y la densidad de las partículas, donde el fluido que se desplaza como consecuencia del derrame de partículas puede transportarlas en lugar de formar un depósito en una zona más concentrada hacia la base del talud como podría pensarse que ocurriría en un caso donde la densidad relativa de los materiales sea superior.

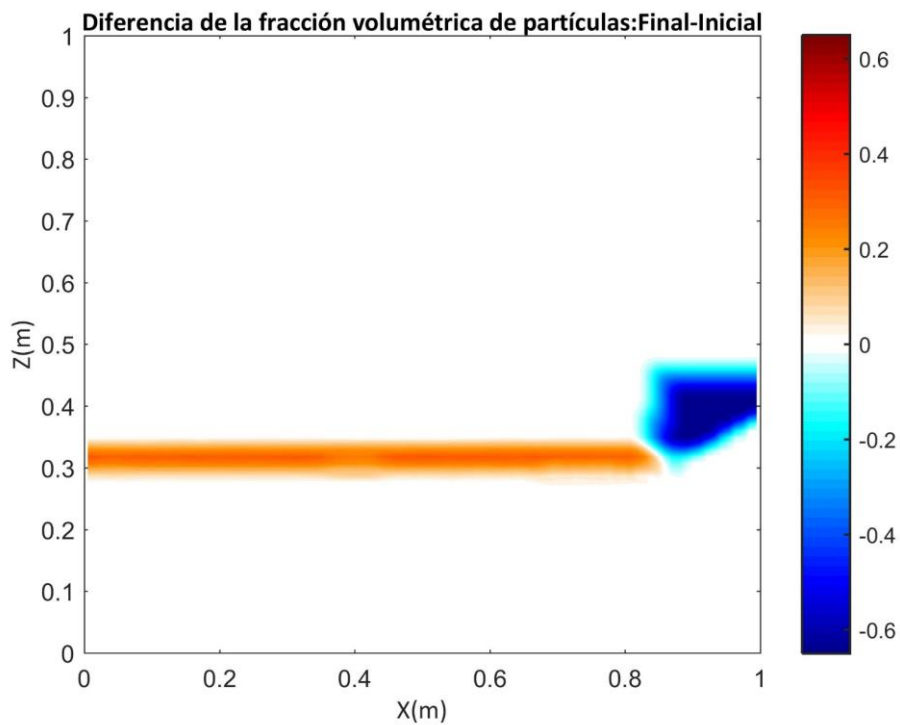


Figura 4.11: Diferencia de la distribución de χ : Configuración final – Configuración inicial. TAM201. Taludes

Para realizar una comparación más objetiva entre las diferentes simulaciones se grafica la evolución del rompimiento del talud en todos los casos, determinado por medio de $\chi=0.52$ y utilizando variables adimensionadas (Eq. 4.1) a efectos de independizar la posición del talud y el lecho sólido de la discretización espacial.

$$X_a = \frac{X}{X_{\text{Tal}_i}} ; Z_a = \frac{Z}{Z_{\text{Im}}} \quad \text{Eq. 4.1}$$

Donde X_{Tal_i} es la abscisa que determina la posición inicial del talud y Z_{Im} la ordenada donde tiene lugar el inicio del comportamiento sólido $\chi=\chi_{\text{Im}}$ en una zona alejada del talud ($X=0.2\text{m}$).

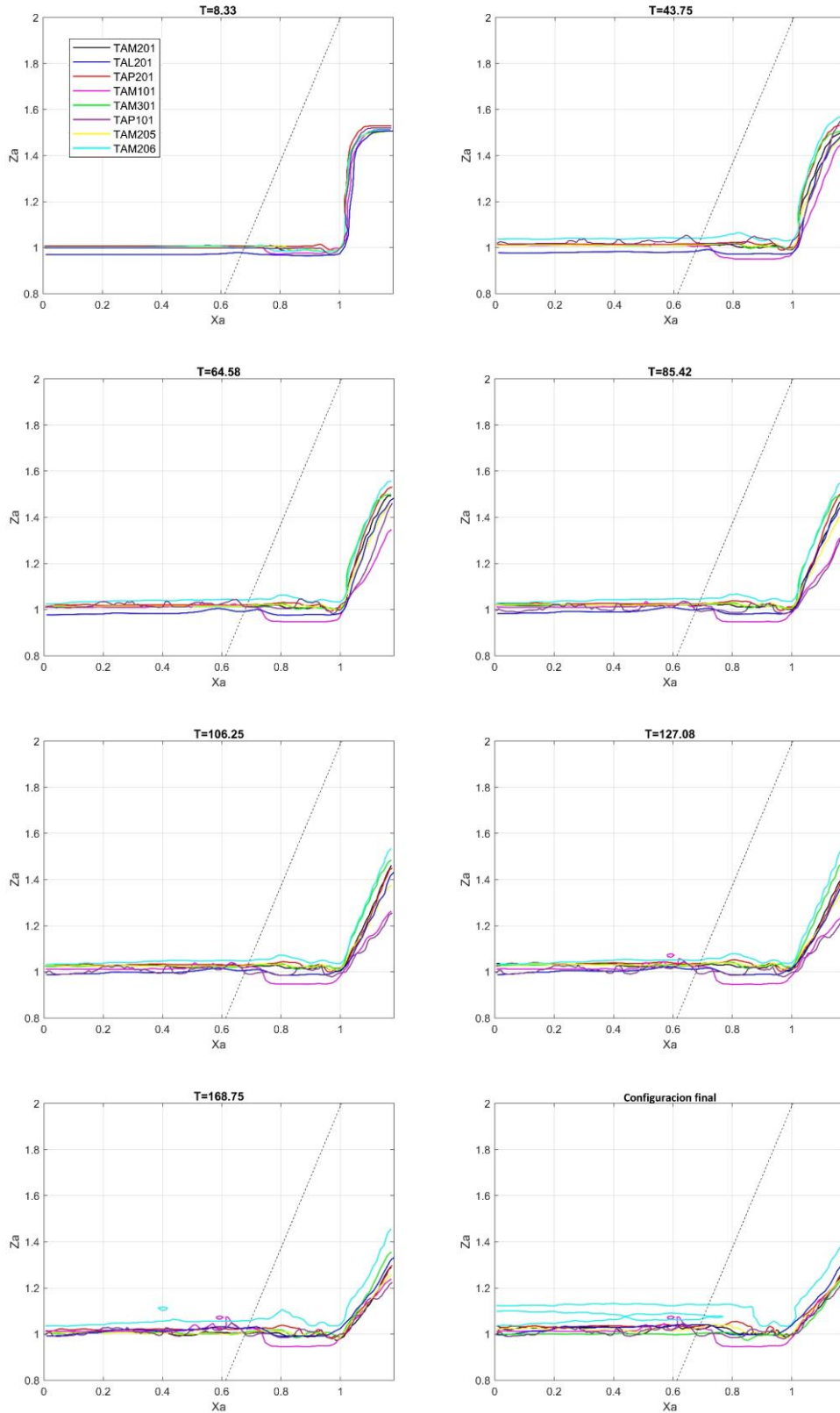


Figura 4.12: Representación en el plano adimensionado de la evolución temporal de las simulaciones numéricas (caffa3d) de la ruptura de una presa representadas con diferentes colores por medio de la curva de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido), cada color representa una simulación diferente de acuerdo a la leyenda de la figura superior izquierda. línea negra punteada: pendiente 45° representada en el plano adimensionado.

En todas las simulaciones pueden visualizarse las mismas fases resumidas con anterioridad en el proceso de derrumbe del talud de la presa, luego de la fase inicial existe una etapa donde el flujo puede admitirse “cuasi-estacionario” en el que el deslizamiento tiene lugar en un ángulo aproximado de 45° (ángulo de fricción interna del material) tomando un ángulo menor a éste en la configuración final una vez que la energía cinética es disipada. Si bien el proceso reflejado en las diferentes simulaciones no tiene la misma evolución temporal (como se describe más adelante) cabe señalar que la posición final del talud es muy similar prácticamente en todos los casos (a excepción de la simulación TAM206).

A partir del análisis de resultados de los casos donde se estudia la sensibilidad a la resolución espacial se puede concluir que existe independencia a la misma entre las mallas seleccionadas (Figura 4.3, Figura 4.4 y Figura 4.5). La resolución de la configuración base (TAM201) resulta suficiente no apreciándose diferencias significativas respecto al proceso representado en las simulaciones con las mallas más gruesa (TAL201) y más fina (TAP201). Cabe señalar que en la malla más gruesa la resolución espacial hace que desde el inicio el talud y el lecho sólido tomen una posición levemente diferente al del resto de las simulaciones (Figura 4.12).

Sin embargo, el análisis de sensibilidad al paso temporal no permite concluir que las simulaciones son independientes al mismo en el rango de Δt seleccionado. Para el mayor paso temporal (TAM101, $\Delta t = 1 \times 10^{-2} \text{s}$), si bien cualitativamente se pueden observar las mismas etapas ya reseñadas en la evolución de la ruptura, el desmoronamiento tiene un desarrollo más rápido alcanzando luego una configuración final del talud similar (Figura 4.12), aunque mostrando una mayor socavación al pie del mismo. Se observa además que los instantes de tiempo representados en la Figura 4.6 se modificaron respecto a los utilizados en el resto de las simulaciones de manera de visualizar las diferentes etapas en una evolución algo acelerada. El paso temporal menor (TAM301, $\Delta t = 5 \times 10^{-4} \text{s}$) presenta un desarrollo un poco más lento del proceso (con menor diferencia que TAM101) y con una configuración final prácticamente idéntica a la de la simulación base.

La simulación TAP101 ratifica los resultados ya resumidos, mostrando un patrón similar con un desmoronamiento algo acelerado producto del paso temporal menor. Los casos simulados con la menor resolución temporal y diferente resolución espacial no evidencian diferencias apreciables entre ellas (Figura 4.6 y Figura 4.8), al igual que lo observado con el paso temporal de la simulación base.

La simulación en la que se aumenta un orden el valor de ε (TAM205), tiene un buen acordamiento con el caso base, aunque se refleja cierta tendencia a acelerar el proceso (producto de unas tensiones rasantes algo menores por valores menores de μ_p , Figura 4.9). Se puede pensar que el valor de ε adoptado inicialmente en la configuración base permite concluir que la solución es independiente del mismo (al menos para valores de

hasta un orden menor). Si bien el campo de viscosidades generado es diferente entre estas simulaciones el comportamiento sólido está igualmente bien representado por medio de la tensión rasante que se obtiene en cada caso y se logra independencia en la solución de χ . Al disminuir un orden el valor del parámetro (TAM2016) además de observarse un enlentecimiento del desmoronamiento, generado por el aumento en las tensiones rasantes, se empiezan a observar algunos patrones oscilatorios en el campo de χ que se reflejan en una interface sólido-fluido más ruidosa (Figura 4.10). Esto sugiere que el valor de $\varepsilon=1 \times 10^{-7}$ es excesivamente pequeño no cumpliendo con el objetivo de des-singularizar la solución, motivo que justificaba su introducción originalmente. A modo de visualizar los comentarios reflejados en este párrafo se representan los perfiles de χ y μ_p en la configuración final para cada uno de estos casos en una zona alejada del talud ($X=0.2\text{m}$, $X_a \cong 0.24$), donde los perfiles de χ para los casos TAM201 y TAM205 quedan prácticamente solapados mientras que el de TAM206 muestra una oscilación a la altura de la interface (Figura 4.13).

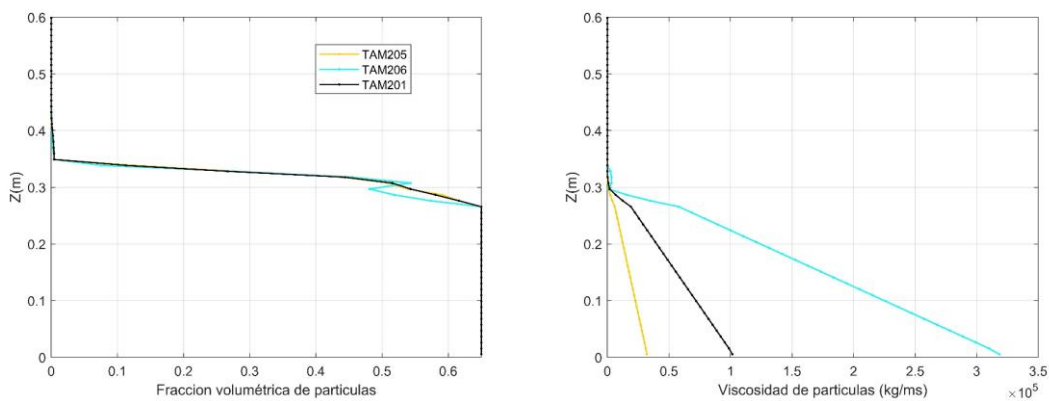


Figura 4.13: Perfiles de χ y μ_p en función del valor de ε para las simulaciones TAM201, TAM205 y TAM206 en la configuración final.

Si bien los resultados mostrados en las simulaciones realizadas con el *caffa3d* muestran patrones similares a los observados en L06, el desmoronamiento es significativamente más rápido en este último. Sin embargo a los efectos del objetivo propuesto en esta sección, se considera que a pesar de esta observación los resultados obtenidos son suficientes para una primera validación del modelo, tomando en cuenta que no se está utilizando un experimento físico que apoye los resultados numéricos (tal como se hará en la sección 4.2) y que existen además una serie de diferencias e incertidumbres en la configuración de las simulaciones que pueden contribuir a esta diferencia: valor del parámetro ε , tamaño de las partículas, las condiciones de borde e iniciales (en particular la compactación del material), una ecuación constitutiva algo diferente etc. La configuración final del talud no está registrada en el artículo original por lo que no es posible hacer una comparación rigurosa en este sentido.

4.2 Columna de sedimentación

El siguiente ejemplo reproduce uno de los experimentos físicos realizado en Cuthbertson et al. 2016 (C16), donde se hacen una serie de pruebas de columna de sedimentación de una gama de mezclas de arcilla y arena en agua para determinar las condiciones paramétricas en las que se produce la segregación de lecho. Para capturar los cambios temporales y espaciales en la densidad, porosidad y composición de los depósitos de arena-arcilla en evolución se emplea la técnica de resistividad eléctrica por ser una técnica no invasiva de medición. Los resultados muestran que la formación de capas de lecho segregado se controla en gran medida por la composición fraccionaria inicial (concentraciones relativas de arena y arcilla). Específicamente, se muestra que las mezclas con bajo contenido de arcilla forman una segregación de capas bien definidas dentro de los depósitos resultantes, mientras que contenidos más altos de ésta presentan una separación más transicional. Con base en este resultado, se seleccionó para el experimento numérico el caso con mayor contenido de arena presentado en C16 (85% arena – 15% arcilla), de forma de estudiar la fase inicial de sedimentación, donde se conforma el lecho de arena mientras que la arcilla permanece en suspensión. De esta manera se simulará numéricamente la sedimentación de arena en una mezcla fluida compuesto por agua y arcilla, sin pretender modelar la sedimentación de la arcilla. Si bien el modelo puede extender su aplicación a más de una fase sedimentable (o una fase con una distribución de granulometrías), su implementación no será abordada en este trabajo conformando una línea de trabajo futuro.

Para los ensayos de C16 se utilizó un recipiente prismático de acrílico, de 50cm de altura con una sección cuadrada de 15cm de lado. Dentro de la columna de sedimentación, las mediciones se realizaron usando una matriz vertical de conjuntos de electrodos de 35x4 incrustados en dos paredes opuestas de la columna (Figura 4.14a). El experimento numérico se realizó en un dominio con las mismas dimensiones que el recipiente original, utilizando dos bloques idénticos de 7,5cm de largo, 15cm de ancho y 50cm de altura, con un arreglo de 16x32x50 celdas uniformes (Figura 4.14b) y un paso temporal de 1×10^{-3} s. Esta descripción constituye una configuración de referencia para el experimento numérico a partir de la cual se analizó la sensibilidad a la resolución espacial y al paso temporal como se detalla más adelante. Se utilizaron condiciones de borde de pared en las caras externas de cada bloque y una condición de unión en la interface entre éstos. La densidad del fluido simulado fue calculada teniendo en cuenta las propiedades de la suspensión de arcilla en agua salada de la mezcla original, manteniendo incambiadas las propiedades de la arena (densidad y fracción volumétrica inicial). Para el diámetro de las partículas en la simulación se tomó como referencia el D_{50} de la muestra de arena experimental. En la Tabla 4.5 se presentan los valores de densidades y χ inicial utilizados en los experimentos físico y numérico. En el ensayo físico la mezcla es transferida al sedimentador en un único vertido y luego es mezclada con un

agitador de rejilla antes de dejarla sedimentar. El experimento numérico parte del reposo con una mezcla uniforme de partículas en todo el dominio caracterizada por el valor $\chi_{inicial}$ de la arena idéntico al experimental, hecho que puede generar pequeñas diferencias en los primeros instantes a la hora de comparar los resultados. En la Tabla 4.6 se muestran los parámetros generales usados en el seteo de la simulación base, haciéndose luego un estudio de sensibilidad a la resolución espacial y temporal así como a varios de los parámetros del modelo de partículas.

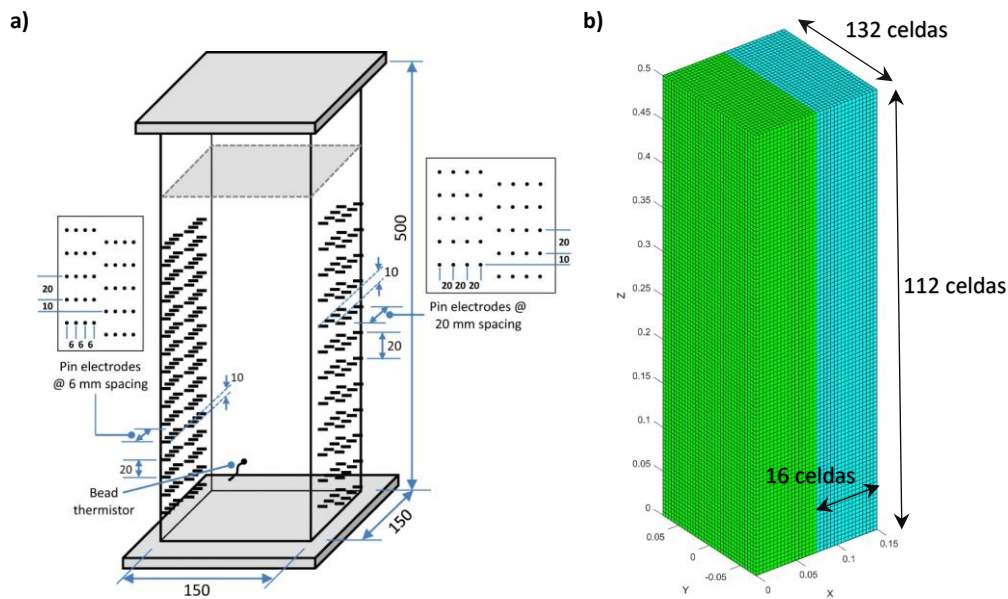


Figura 4.14: Representación esquemática de: a) la columna de sedimentación utilizada en C16 (figura extraída de C16) y b) malla de cálculo para la simulación numérica. Cada bloque se representa con un color diferente. Dominio: Prisma de sección cuadrada de lado $B=15\text{cm}$ y altura $H=50\text{cm}$.

	Arena	Arcilla	Agua salada	Fluido simulado
Densidad (kg/m ³)	2640	2592	1020.5	1071.4
$\chi_{inicial}$	0.1807	0.0324	-	-

Tabla 4.5: Valores de densidad y fracción volumétrica inicial de los diferentes materiales usados en los ensayos numérico *caffa3d* y físico C16.

CASO	r_p (μm)	φ ($^\circ$)	χ_{IM}	χ_{Im}	ϵ	$\chi_{inicial}$	Δt (s)	γ_{MFP}
SED001	75	30	0.65	0.52	1×10^{-6}	0.1807	1×10^{-3}	0.8

Tabla 4.6: Parámetros utilizados en la simulación *caffa3d*. Sedimentadores.

A partir del arreglo de electrodos descrito anteriormente se obtienen valores experimentales de la resistividad de las diferentes mezclas y se calcula el Factor de formación F, definido como el cociente entre la resistividad de una roca limpia 100% saturada (R_{bulk}) con la resistividad del fluido que la satura (R_f):

$$F = \frac{R_{bulk}}{R_f} \quad \text{Eq. 4.2}$$

Donde la resistividad de la mezcla es calculada en el caso del sistema de medición con cuatro electrodos de acuerdo a:

$$R_{bulk} = 2\pi rR \quad \text{Eq. 4.3}$$

Siendo “r” la distancia entre centros de electrodos y “R” la resistencia medida. Este valor es corregido por efecto de la temperatura de acuerdo a lo expuesto por C16.

El factor de formación es vinculado con la porosidad por medio de la siguiente relación (Archie 1994, C16):

$$F = \frac{R_{bulk}}{R_f} = a\alpha^{-m} \quad \text{Eq. 4.4}$$

Donde “a” es el coeficiente de tortuosidad y “m” el factor de cementación, que son característicos de cada material y determinados empíricamente. En el caso de los experimentos de C16 los parámetros fueron calibrados con valores de $a=1.584$ y $m=1.128$.

La densidad de la mezcla es calculada mediante:

$$\rho = \chi\rho_s + (1-\chi)\rho_f \quad ; \quad \chi\rho_s = \sum \chi_i\rho_i \quad \text{Eq. 4.5}$$

Donde $\chi\rho_s$ representa la masa de partículas de densidad ρ_s por unidad de volumen, que se calcula sumando la fracción correspondiente a cada uno de los materiales sólidos presentes en la mezcla (diferenciados por el subíndice “i”): arcilla y arena en este caso.

Combinando Eq. 4.4 y Eq. 4.5 se obtiene una expresión para calcular la densidad relativa de la mezcla a la densidad del fluido:

$$\frac{\rho}{\rho_f} = \frac{\rho_s}{\rho_f} + \left(\frac{a}{F}\right)^{1/m} \frac{(\rho_f - \rho_s)}{\rho_f} \quad \text{Eq. 4.6}$$

Sin embargo para que esta ecuación tenga validez la ecuación Eq. 4.4 debería valer para un amplio rango de condiciones de mezcla diferentes de arena, arcilla y agua, pero los valores “a” y “m” no se pueden ajustar para el caso $F \rightarrow 1$ donde $P \rightarrow 1$. Por tanto, la relación entre la densidad relativa de la mezcla y el factor de formación es calculada mediante una relación empírica determinada en C16:

$$\frac{\rho}{\rho_f} = 1.015F^{0.456} \quad \text{Eq. 4.7}$$

En la Figura 4.15 se muestra el registro fotográfico del experimento, donde se puede ver que a los dos minutos de evolución el lecho de arena está claramente definido mientras que la arcilla permanece en suspensión prácticamente en toda la columna hasta los 5 minutos aproximadamente, instante en el que comienza a visualizarse el descenso de la interface arcilla – agua.

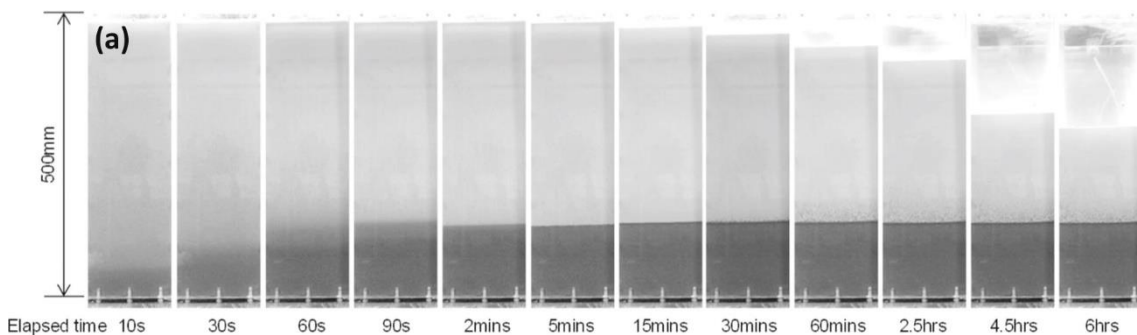


Figura 4.15: Registro fotográfico de la evolución temporal de la sedimentación de una mezcla de arcilla-arena y agua, experimento de laboratorio. Figura extraída de C16.

A continuación se muestran los valores experimentales de F obtenidos por C16 así como de la densidad relativa de la mezcla y la porosidad determinadas a partir de Eq. 4.7 y Eq. 4.4:

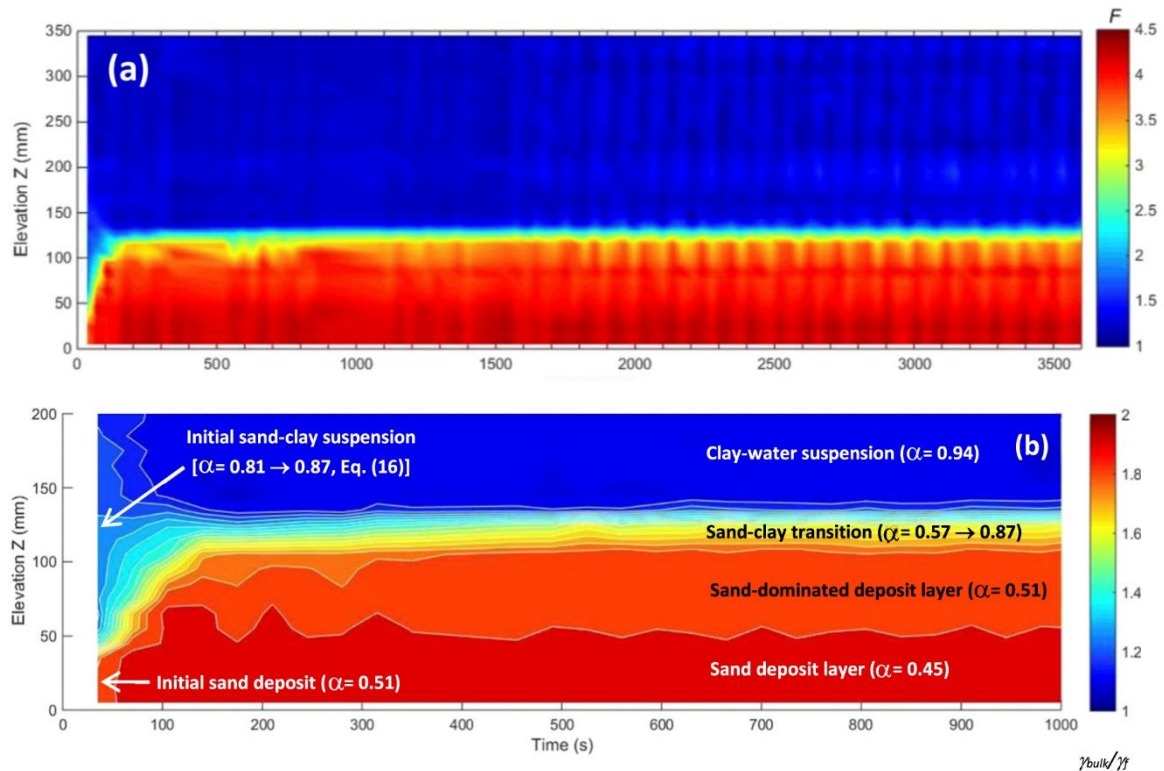


Figura 4.16: a) Valores experimentales del Factor de formación F y b) Densidad relativa de la mezcla, y la porosidad ($\alpha = 1 - \chi$) calculada a partir de los valores experimentales de F . Figuras adaptadas de C16.

Los resultados numéricos que reproducen el gráfico de la Figura 4.16 se presentan en la Figura 4.17 y la Figura 4.18 para la simulación del caso base (SIM001), donde se calcula para cada paso temporal el perfil vertical promedio espacial en cada plano horizontal (perfil vertical de aquí en adelante) de la densidad de la mezcla y de la porosidad. Para obtener el mismo factor de escala que en los resultados experimentales, la densidad de la mezcla es escalada con la densidad real del fluido y no la del fluido simulado, ya que la misma contiene la porción de arcilla en suspensión tal como se describió con anterioridad.

Si bien cualitativamente el proceso es muy similar, la segregación del lecho tiene lugar en un intervalo de tiempo algo menor que lo que se observa experimentalmente. Este hecho es esperable dado que si bien la densidad del fluido modelado es similar a la de la mezcla de agua arcillosa el efecto coloidal de ésta, que puede enlentecer la sedimentación de la arena, no está siendo representado en la modelación numérica. Tal como se resume en C16 la presencia de arcilla genera difusión en la segregación de los diferentes materiales, que si bien en el caso del experimento es una porción delgada de unos pocos centímetros (2cm aprox.) la misma no es apreciada en la modelación numérica donde la interface arena-fluido está perfectamente definida a partir de los 90 segundos de simulación aproximadamente manteniéndose constante hasta el final. Tal como se había mencionado con anterioridad, los primeros segundos de sedimentación

en el experimento no son reproducidos con la simulación dado que en esta última se parte de una condición idealizada.

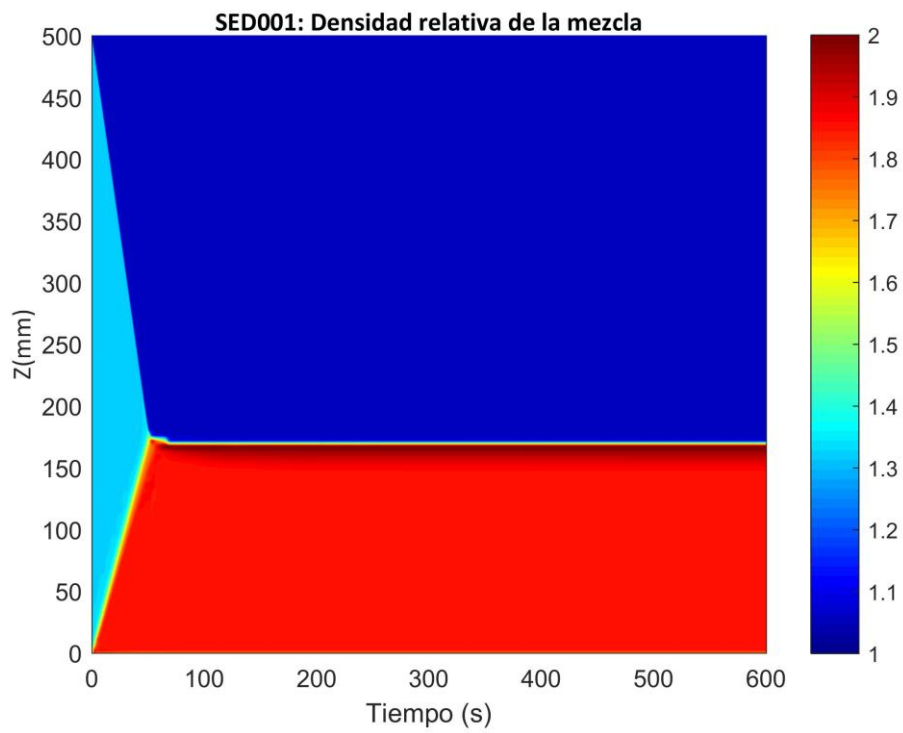


Figura 4.17: Evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla simulada SED001. Sedimentadores.

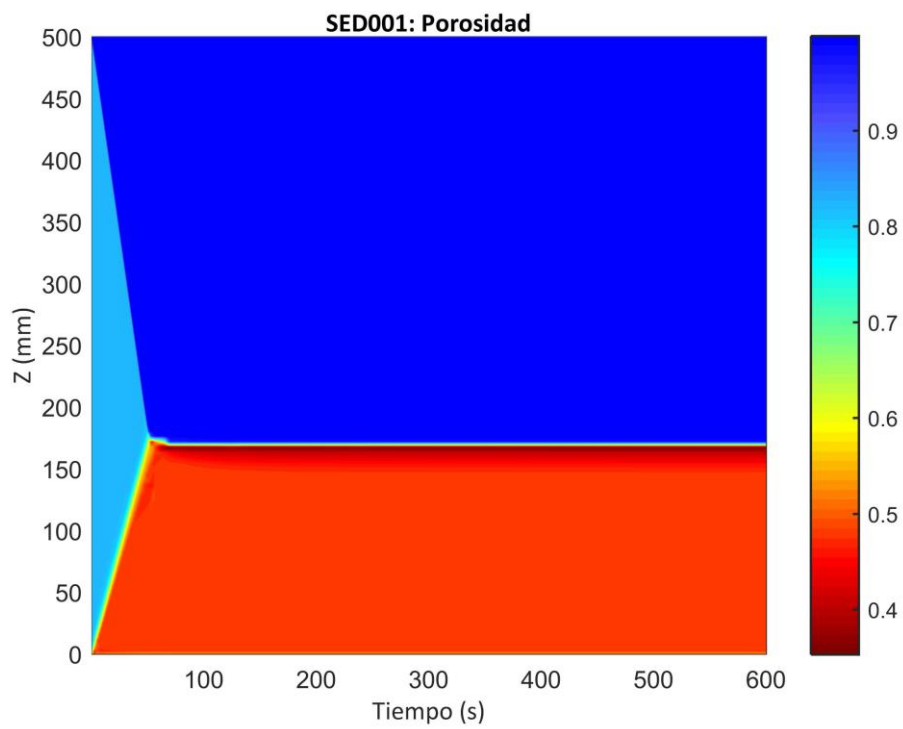


Figura 4.18: Evolución temporal del perfil vertical de la porosidad simulada SED001. Sedimentadores.

Como es esperable en una columna de sedimentación la distribución de partículas es uniforme en cada plano horizontal. A modo de ejemplo se presenta el campo de χ en diferentes cortes verticales del dominio en dos instantes diferentes (30 segundos y 2 minutos), para visualizar una situación intermedia del proceso y la configuración final del mismo (Figura 4.20 y Figura 4.21). Gracias a este resultado, se trabajará a efectos de la comparación entre simulaciones con el perfil vertical promediado horizontalmente. La evolución temporal del perfil vertical de χ es representada en la Figura 4.22.

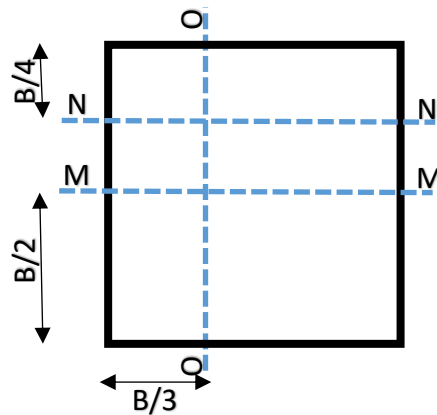


Figura 4.19: Esquematización de cortes verticales en el dominio.

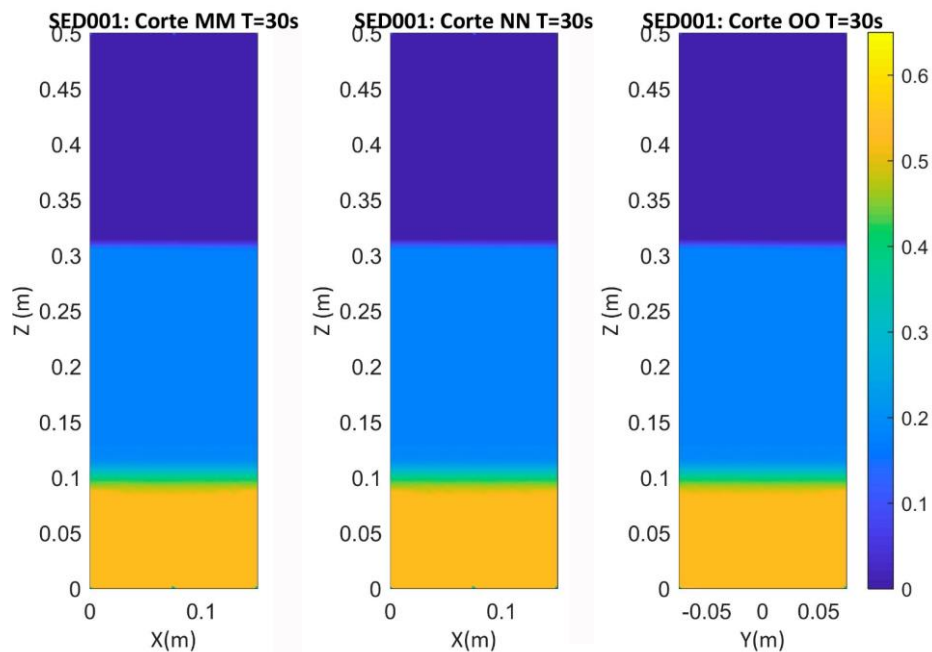


Figura 4.20: Fracción volumétrica de volumen (χ) en diferentes cortes verticales a los 30s de simulación de acuerdo al esquema de la Figura 4.19. SED001. Sedimentadores.

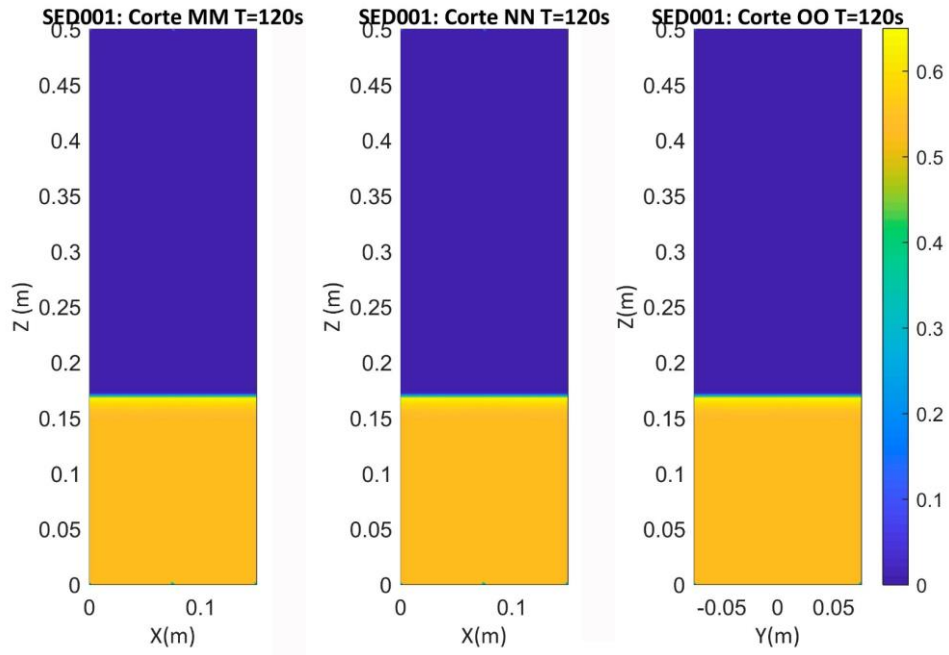


Figura 4.21: Fracción volumétrica de volumen (χ) en diferentes cortes verticales a los 120s de simulación de acuerdo al esquema de la Figura 4.19. SED001. Sedimentadores.

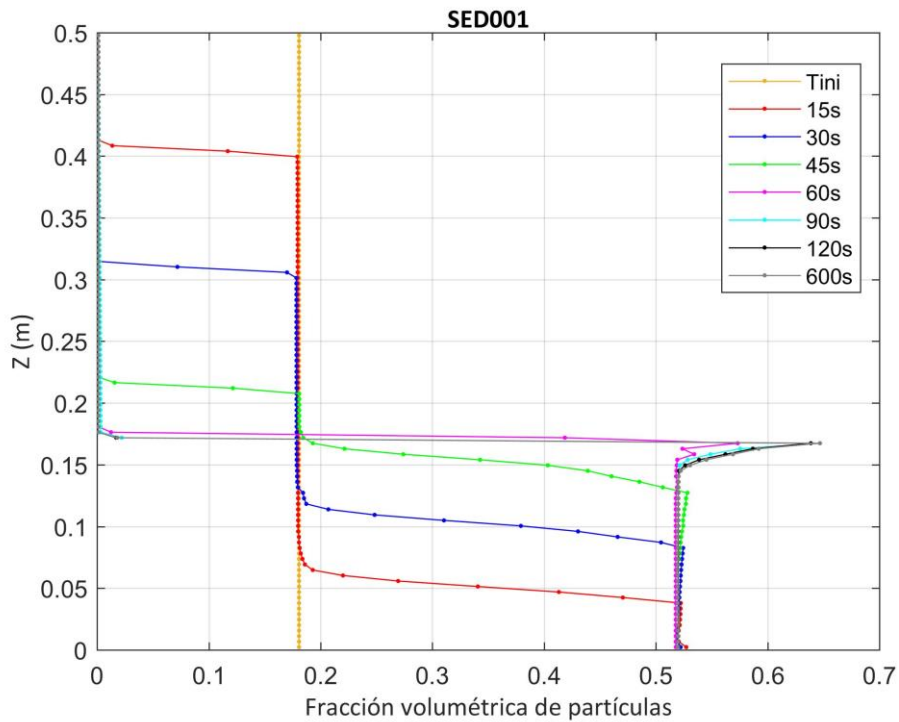


Figura 4.22: Perfiles verticales de la fracción volumétrica de volumen (χ) en diferentes instantes de tiempo. SED001. Sedimentadores.

Tal como se había resumido en párrafos anteriores el perfil de χ se mantiene prácticamente constante a partir de los 90 segundos de simulación, aunque las características del lecho ya están casi definidas a partir del minuto. En la interface sólido-fluido puede observarse un salto abrupto hacia el máximo valor de χ , hecho que puede ser consecuencia del pasaje hacia el fluido no newtoniano también brusco del modelo de partículas y que se vuelve más relevante cuando la interface con el mismo queda definida en unas pocas celdas (situación que se evidencia a partir de los 60 segundos).

Una diferencia importante que se tiene respecto al experimento físico, es que el lecho de arena simulado tiene una altura próxima a los 17cm (H_f) cuando en el experimento se alcanzan unos 13cm aproximadamente, aunque con una porosidad mayor en la simulación que es prácticamente uniforme establecida aproximadamente en 0.48 ($\chi_f = 0.522$).

Haciendo una aproximación del balance de masa del material sólido en la simulación numérica, y admitiendo un perfil aproximadamente uniforme $\chi_f = 0.522$ en la configuración final, puede verificarse que la altura teórica resultante para el lecho de arena simulado ($H_{Tf} = 17.3\text{cm}$) es adecuada:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Masa Sólido Inicial} = \rho_p \chi_{ini} B^2 H \\ \text{Masa Sólido Final} = \rho_p \chi B^2 H_f \end{array} \right\} \Rightarrow H_{Tf} = \frac{\chi_{ini} H}{\chi_f} = 17.3\text{cm} \quad \text{Eq. 4.8}$$

La desigualdad entre estas alturas podría ser consecuencia parcial de alguna diferencia en la configuración inicial de los experimentos, dado que en la simulación numérica se parte con el volumen completamente lleno mientras que en el experimento el mecanismo de mezclado inicial podría hacer que alguna fracción del recipiente quede sin completarse con el material. Un aspecto importante a tener en cuenta es que la arena utilizada es una arena extremadamente fina, con un D_{50} que se acerca al valor límite que las define, haciendo posible que un porcentaje pequeño de la fracción más fina dentro de la mezcla arenosa (con diámetros más próximos al limo) no logre sedimentar. Esta última afirmación se refleja en los valores experimentales donde la porosidad final del fluido con arcilla en suspensión muestra valores de χ (0.06) superiores a lo esperado de acuerdo a la concentración inicial de arcilla en el fluido ($\chi = 0.0324$, Tabla 4.5). Haciendo un cálculo similar al mostrado en Eq. 4.8 y utilizando la consideración de Eq. 4.5 podría estimarse la altura que debería tener el lecho en la decantación simulada (H_{f2}) admitiendo que en la porción de fluido hubiese quedado una fracción volumétrica de arena por decantar similar al experimento numérico ($\chi_{excedente} = 0.0276$):

$$H_{f2} = \frac{H(\chi_{ini} - \chi_{excedente})}{\chi_f - \chi_{excedente}} = 15.48\text{cm} \quad \text{Eq. 4.9}$$

La diferencia de alturas puede justificarse entonces por una combinación de las siguientes observaciones:

- una posible desigualdad en las condiciones iniciales entre los experimentos físico y numérico,
- la falta de consideración del efecto coloidal de la mezcla agua-arcilla que genera re-suspensión de los granos de arena,
- al tamaño de partículas simuladas, que al ser caracterizado con el D_{50} de una mezcla tan fina hace que algunas de ellas permanezcan en suspensión y no sean representadas,
- la influencia de otros parámetros numéricos que podrían estar afectando la sedimentación: el valor de ε (valor más bajo del debido) o el valor de la fracción volumétrica de partículas que establece el límite del comportamiento sólido χ_{lm} . Un estudio preliminar de la influencia de estos parámetros se realiza más adelante en esta misma sección.

La masa de arena de la simulación fue calculada en cada paso temporal y en la Figura 4.23 se presenta la evolución del cociente entre ésta respecto de la masa inicial de arena (en porcentaje), donde se observa que a lo largo de los 600000 pasos temporales se pierde únicamente un 0.05% de la masa total. Esta pérdida tiene lugar durante el proceso de sedimentación estabilizándose unos segundos después de que el lecho es conformado, y es causa de la corrección del valor de la fracción volumétrica de partículas que se establece en cada paso temporal para mantener el valor de χ acotado entre 0 y χ_{IM} .

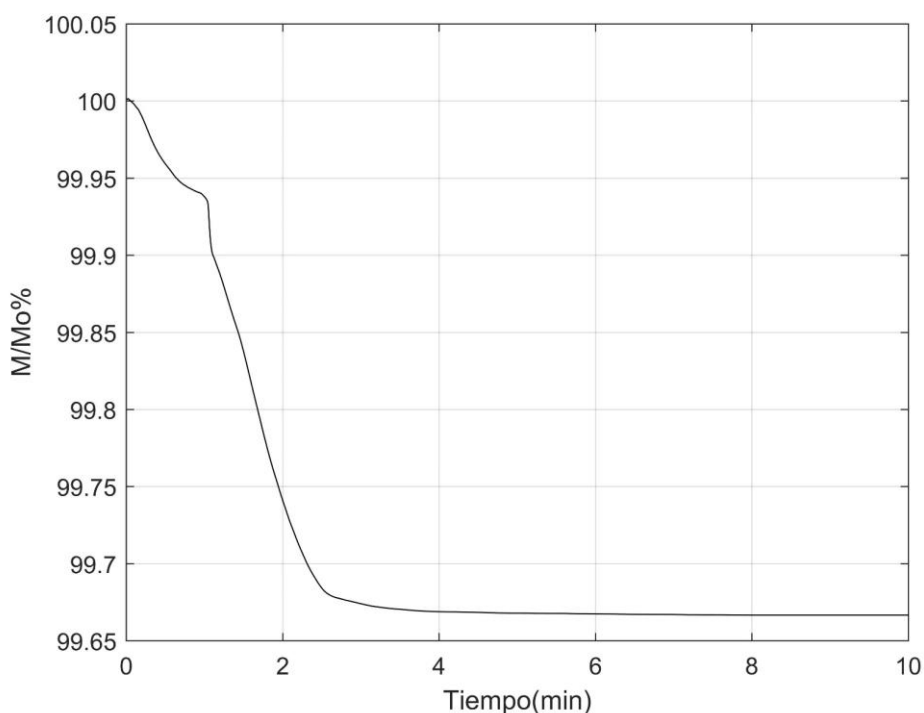


Figura 4.23: Porcentaje de masa total de arena en cada instante (M) respecto de la masa total de arena inicial (M_o). Sedimentadores.

Las resoluciones espacial y temporal fueron verificadas mediante un análisis de sensibilidad realizado con simulaciones adicionales de acuerdo a los parámetros descritos en la Tabla 4.7. En todos los casos se utilizaron dos bloques manteniendo incambiados los restantes parámetros respecto de la simulación de referencia SIM001.

Para todos los casos se presenta la evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla (Figura 4.24) a partir de lo cual puede concluirse que, a excepción de una zona muy próxima a la interface en la simulación con la malla más fina SEE001, los diagramas son prácticamente idénticos. Una visualización más detallada para algunos instantes de tiempo puede apreciarse en la Figura 4.25, donde se grafica el perfil vertical de χ para las diferentes simulaciones.

Caso	Δx (mm)	Δz (mm)	Δt (s)
SED001	4.69	4.46	1×10^{-3}
SEE001	2.34	2.23	1×10^{-3}
SED101	4.69	4.46	5×10^{-3}
SED201	4.69	4.46	5×10^{-4}
SEE101	2.34	2.23	5×10^{-3}

Tabla 4.7: Tamaño de las celdas: Δx , Δz y resolución temporal Δt de las diferentes simulaciones *caffa3d*. Dimensiones del Dominio: Lado (B), Altura. (H). Análisis de sensibilidad a la resolución espacial y temporal. Sedimentadores.

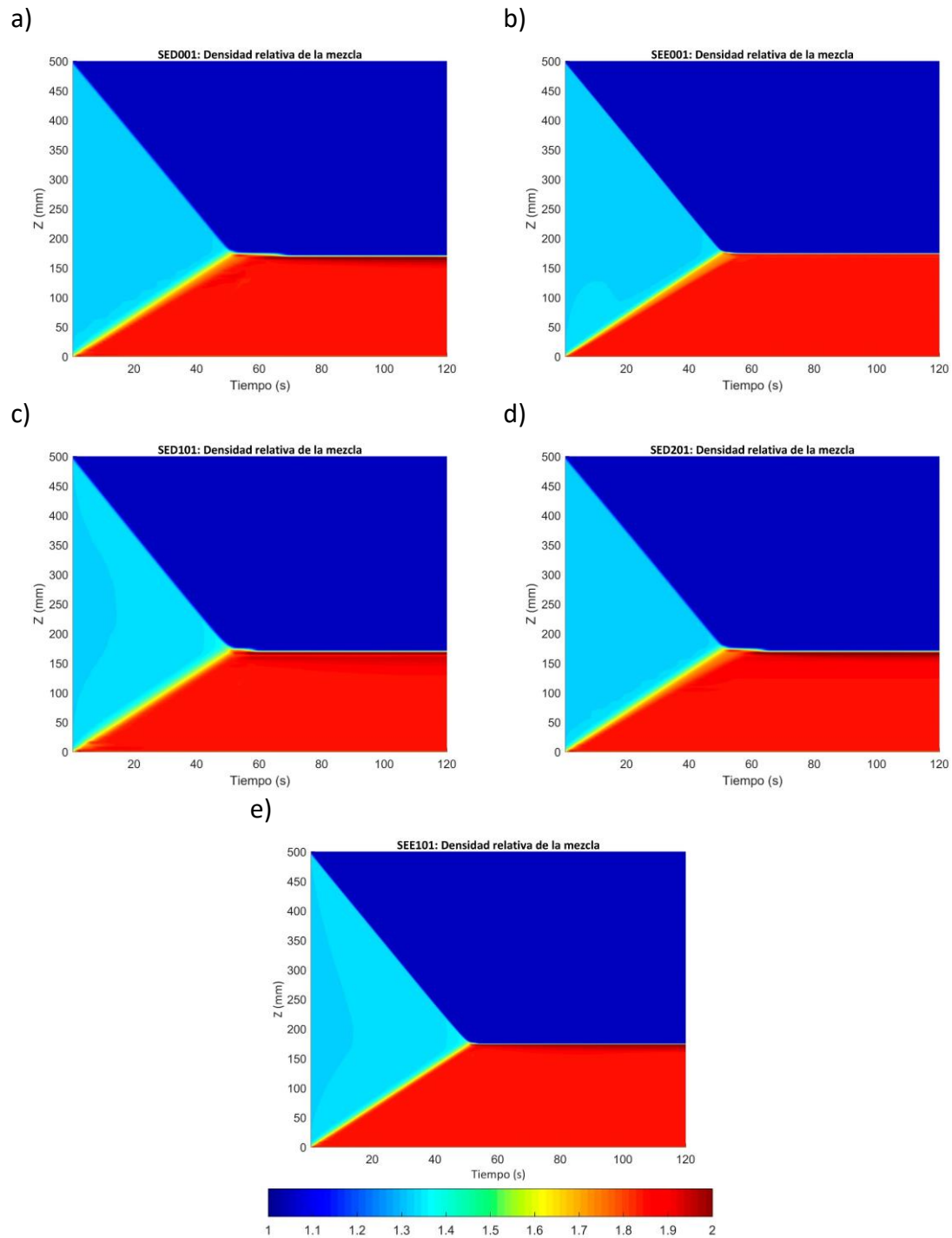


Figura 4.24: Evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla simulada. Análisis de sensibilidad a la malla y al paso temporal: a) Simulación base, b) malla fina, c) Δt mayor, d) Δt menor y e) Δt mayor en malla fina. Tabla 4.7. Sedimentadores.

A partir de los resultados expuestos se puede ver que, si bien los perfiles son muy parecidos entre las simulaciones, el aumento abrupto hacia el máximo en la zona próxima a la interface una vez que el lecho de arena se ha constituido se reduce en gran medida al aumentar la resolución espacial en la simulación base. Este salto hacia el máximo es sensible también al aumento del paso temporal, sustentando la hipótesis de su origen numérico y no a la representación del fenómeno físico. En el caso de menor

resolución temporal, además de la amplificación del máximo tienen lugar una serie de oscilaciones numéricas en la zona próxima a la interface sólido-mezcla fluida durante el proceso de sedimentación debida al pasaje abrupto del comportamiento del material entre estas fases (que es más notoria en la malla más gruesa) y que no son apreciadas en el resto de los casos ni en la interface mezcla fluida con el fluido puro. Estas oscilaciones desaparecen una vez que la masa de arena sedimentó completamente (Figura 4.26).

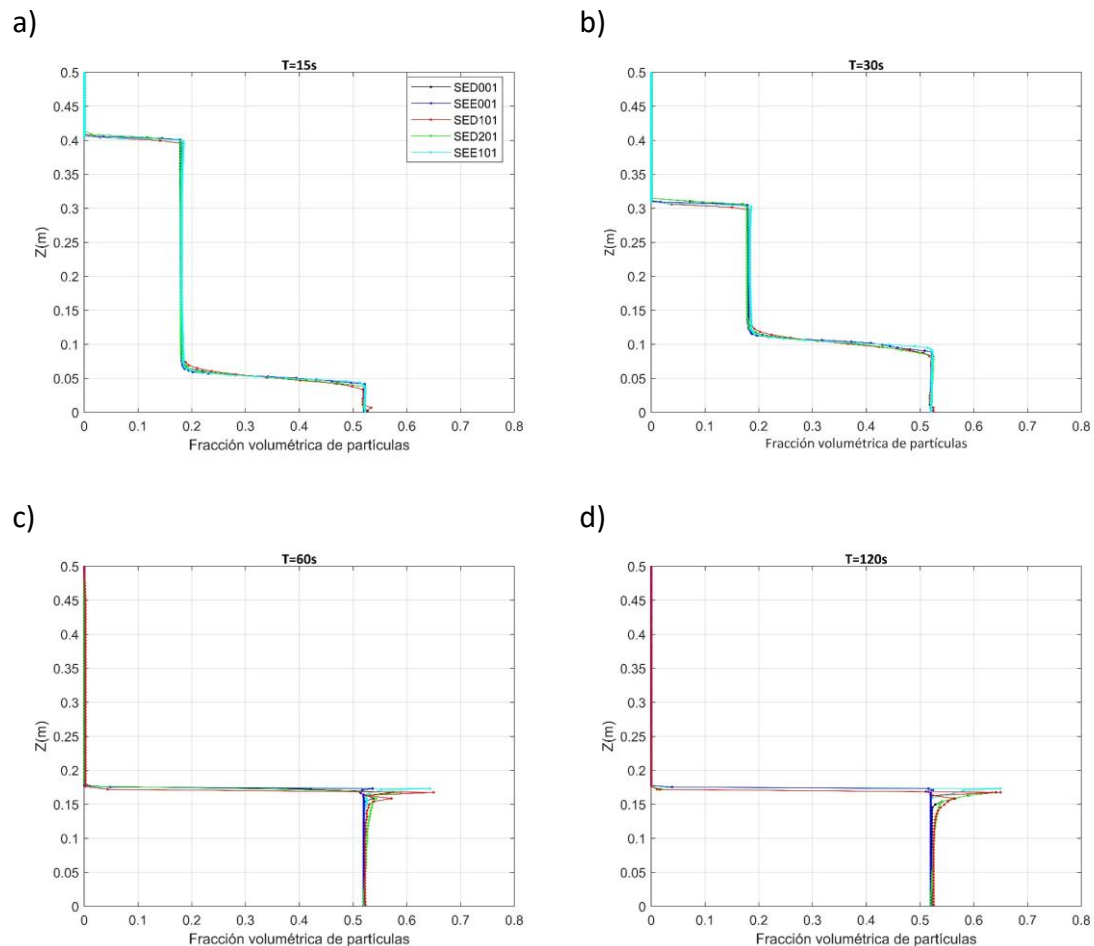


Figura 4.25: Perfiles verticales de la fracción volumétrica de partículas (χ) en diferentes instantes de tiempo. Sensibilidad a la malla y al paso temporal. Cada simulación se representa en un color diferente de acuerdo a la descripción en la figura a) y Tabla 4.7. Sedimentadores.

Tomando en cuenta los resultados expuestos anteriormente puede concluirse que el tamaño de celda y paso temporal adoptados en la simulación de referencia son adecuados para representar el fenómeno físico en estudio y se descarta el análisis en una malla con menor resolución donde es esperable la amplificación de las oscilaciones de la interface sólido-fluido.

A pesar de estas oscilaciones de interface, en términos de medias espaciales, las características que definen al lecho sólido en el caso de menor resolución temporal

(SED101) son similares a las de las restantes simulaciones. Por este motivo y con el propósito de tener una idea primaria del efecto de algunos de los parámetros numéricos que intervienen en el modelado de las partículas se realizan simulaciones adicionales variando algunos de ellos en la malla base (SED001) con la resolución temporal de SED101 de acuerdo a lo resumido en Tabla 4.8.

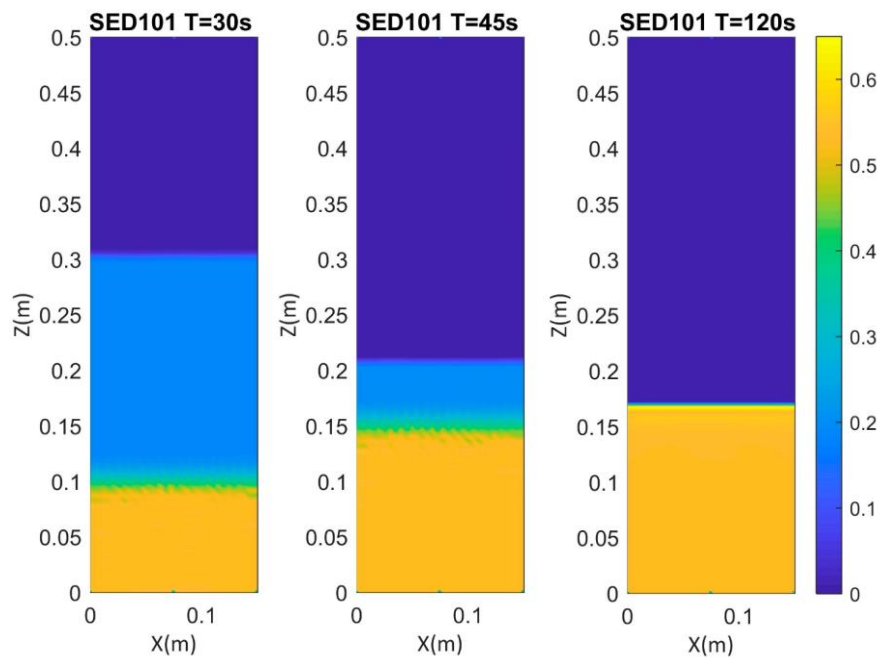


Figura 4.26: Fracción volumétrica de volumen (χ) en diferentes instantes de tiempo en el corte vertical MM de acuerdo al esquema de Figura 4.19. SED101. Sedimentadores.

Caso	χ_{lm}	χ_{IM}	ϵ	LSG	r_p (μm)
SED301	0.63	0.75	1×10^{-6}	10	75
SED302	0.63	0.75	1×10^{-4}	10	75
SED303	0.63	0.75	1×10^{-4}	30	75
SED304	0.63	0.75	1×10^{-4}	10	150

Tabla 4.8: Análisis de sensibilidad a los parámetros del modelo. Sedimentadores.

Las figuras que se presentan a continuación resumen los resultados obtenidos en estas simulaciones, analizados en forma similar a los expuestos con anterioridad (Figura 4.27 y Figura 4.28). Se puede observar que la modificación del valor límite donde cambia el comportamiento del material χ_{lm} impacta sobre la altura del lecho de arena, tal como era de esperar el espesor de éste es menor al disminuir el valor de la porosidad del depósito sólido que se conforma. Al igual que en las simulaciones anteriores (Tabla 4.7) el valor de la fracción volumétrica de volumen en la arena queda establecida en valores levemente superiores a χ_{lm} (y mayores por tanto a las simulaciones anteriores). A

excepción de la simulación SED304, las restantes corridas muestran resultados que no presentan diferencias significativas, lo que verifica la independencia a los valores de ε y de LSG elegidos inicialmente. El valor del tamaño de partículas influye en la velocidad en la que se desarrolla la decantación, tal como era de esperar el aumento del diámetro del material particulado aumenta su velocidad de decantación y por lo tanto acelera el proceso (Figura 4.27- d y Figura 4.28).

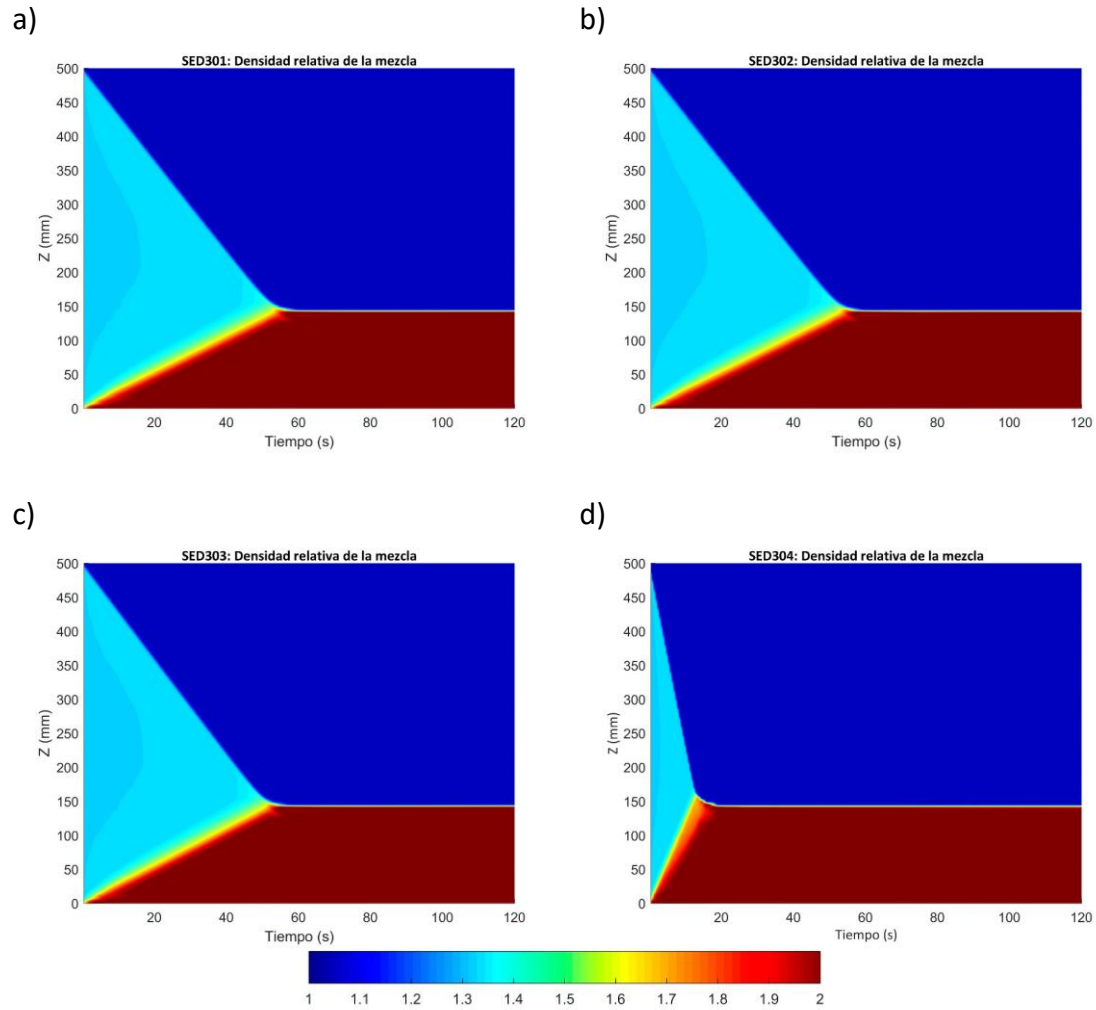


Figura 4.27: Evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla simulada. Análisis de sensibilidad a parámetros numéricos: a) Valores límite de χ para comportamiento sólido, b) LSG-iteraciones externas, c) ε y d) r_p . Tabla 4.8. Sedimentadores.

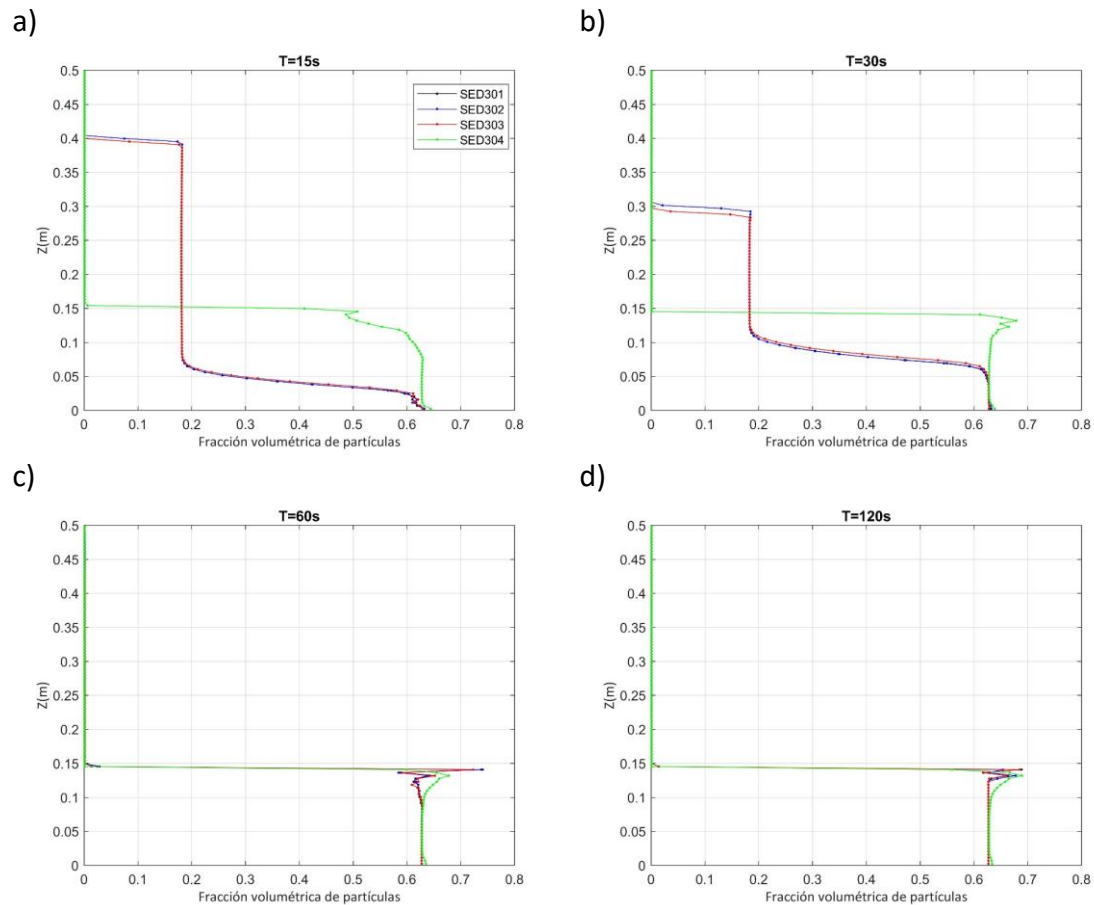


Figura 4.28: Perfiles verticales de la fracción volumétrica de partículas (χ) en diferentes instantes de tiempo. Sensibilidad a parámetros numéricos. Cada simulación se representa en un color diferente de acuerdo a la descripción en la figura a), Tabla 4.3 y Tabla 4.8. Sedimentadores.

Finalmente se evalúa la influencia del método implementado para la resolución del campo χ mediante la variación del coeficiente de blending γ_{MFP} que regula el aporte del esquema upwind básico frente al UQ descrito en la sección 3.2.2. Se realizaron dos simulaciones adicionales con valores de γ_{MFP} de 0 y 1, considerando un esquema completamente upwind básico o con el esquema UQ puro (Tabla 4.9), manteniendo incambiados los restantes parámetros respecto de la simulación base SED001.

Caso	γ_{MFP}
SED501	1
SED001	0.8
SED502	0

Tabla 4.9: Análisis de sensibilidad al método de resolución de la ecuación de continuidad χ . Sedimentadores.

Si bien los resultados de las tres simulaciones son muy similares se distingue una zona más difusa próxima a las interfaces sólido-mezcla fluida y mezcla fluida-líquido puro conforme aumenta el aporte upwind (valores menores de γ_{MFP}), que desaparece una vez que el proceso de sedimentación ha finalizado. En la representación de la evolución temporal del perfil de la densidad relativa la separación entre las diferentes mezclas se visualiza prácticamente como una recta bien definida para el caso $\gamma_{MFP}=1$ que se va difuminando al disminuir este valor (Figura 4.27 a y Figura 4.29). A modo de ejemplo se presenta la distribución de χ en un corte vertical por el plano medio, a los 30 segundos y a los 2 minutos de simulación (Figura 4.30 y Figura 4.31), donde puede apreciarse la difusión de las interfaces durante la decantación de partículas pero que una vez que ésta termina las figuras se tornan indistinguibles.

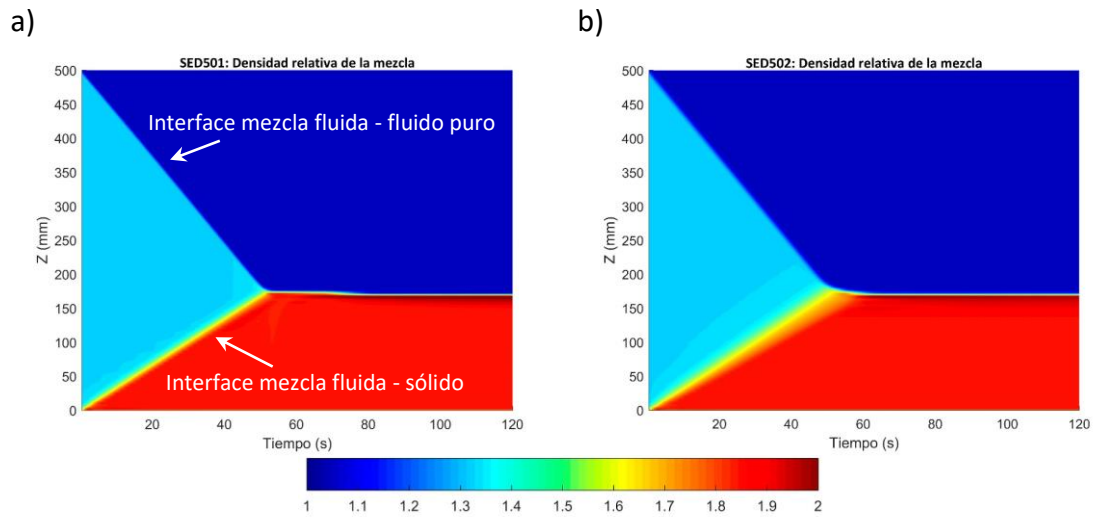


Figura 4.29: Evolución temporal del perfil vertical de la densidad relativa de la mezcla simulada. Análisis de sensibilidad a γ_{MFP} . a) UQ y b) upwind básico Sedimentadores.

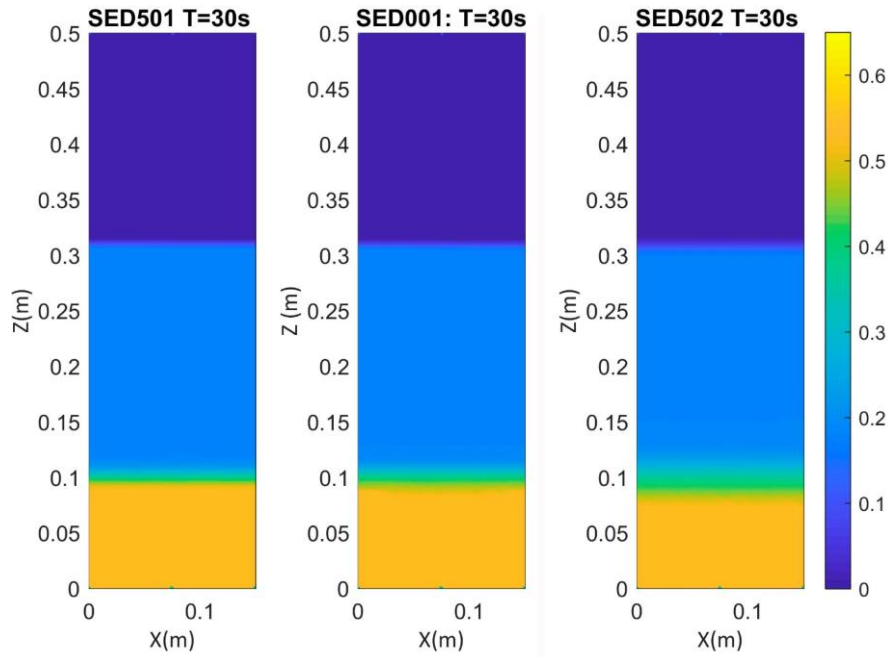


Figura 4.30: Fracción volumétrica de volumen (χ) para diferentes valores de γ_{MFP} en el corte vertical MM de acuerdo al esquema de Figura 4.19. y la Tabla 4.9 a 30 segundos de simulación . Sedimentadores.

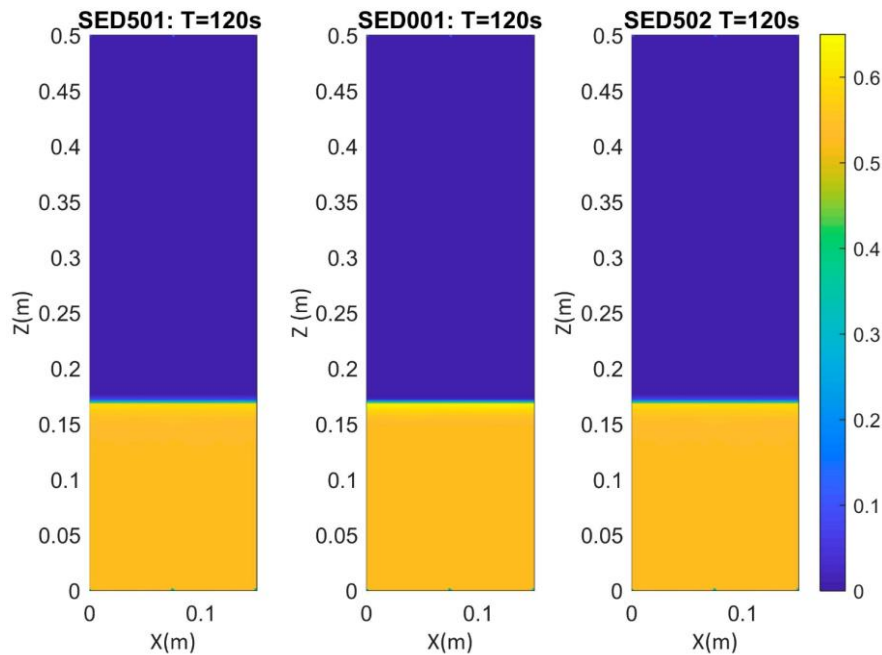


Figura 4.31: Fracción volumétrica de volumen (χ) para diferentes valores de γ_{MFP} en el corte vertical MM de acuerdo al esquema de Figura 4.19. y la Tabla 4.9 a 120 segundos de simulación . Sedimentadores.

Al analizar los perfiles para instantes de tiempos seleccionados, se observa que el esquema upwind logra atenuar los cambios bruscos producto del cambio abrupto hacia el comportamiento sólido, disminuyendo el máximo en la interface sólido-fluido puro y logrando un perfil de viscosidad más uniforme que se mantiene a lo largo del tiempo

una vez alcanzado el estado sólido (Figura 4.32). Sin embargo, cabe señalar que en los tres casos el modelo logra representar adecuadamente al material sólido obteniendo soluciones muy similares de χ entre las simulaciones.

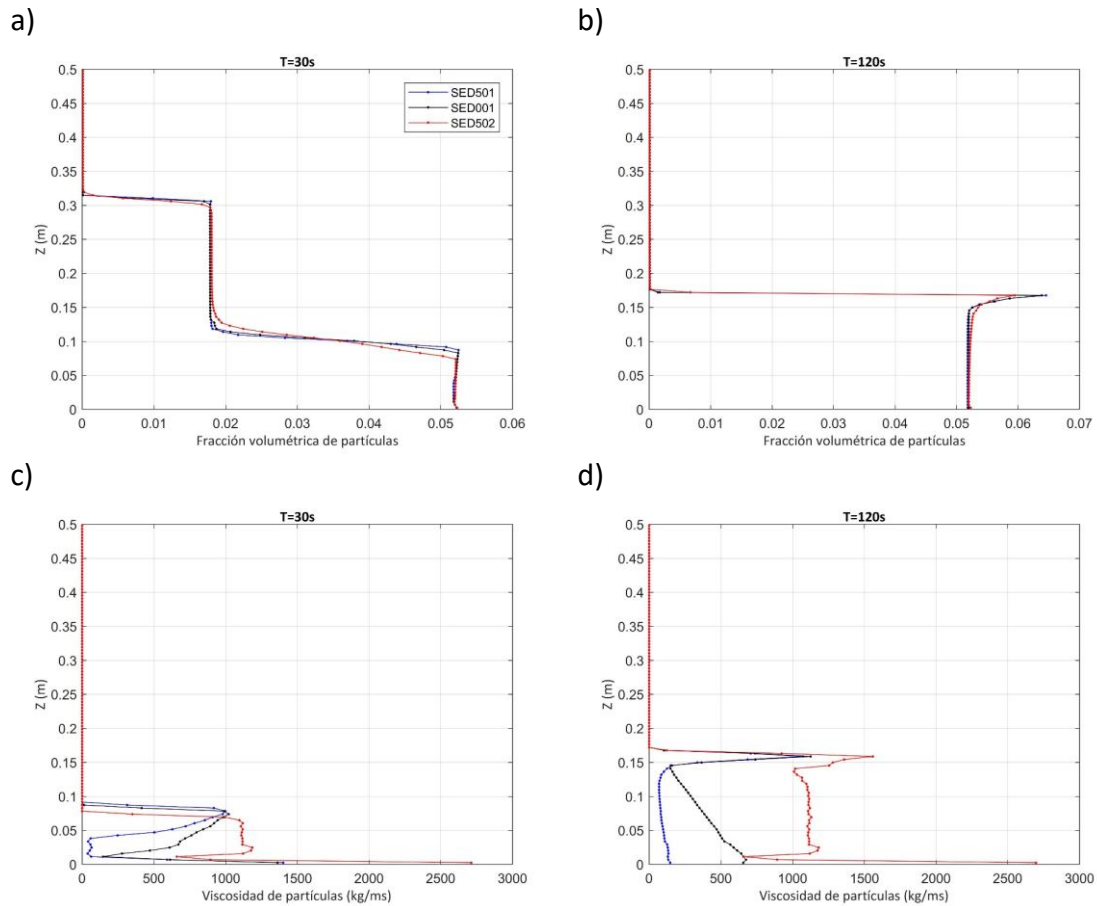


Figura 4.32: Perfiles verticales de la fracción volumétrica de partículas (χ) en diferentes instantes de tiempo (a,b) y de la viscosidad de partículas (c y d) para diferentes simulaciones de acuerdo a la Tabla 4.9. Sensibilidad al parámetro de γ_{MFP} . Cada simulación se representa en un color diferente de acuerdo a la descripción en la figura a), Sedimentadores.

Una estrategia utilizada para evitar los problemas de oscilaciones en las interfaces consiste en modificar la interpolación de la presión en ella utilizando una ponderación que considera el valor de la fracción volumétrica del campo escalar que define a cada fluido. Por ejemplo, en Denner et al. 2014 se aplica esta estrategia en el marco de un método VOF ponderando la interpolación de la presión con la densidad del fluido. Algunas variantes inspiradas en esta idea fueron testeadas en este ejemplo utilizando un esquema similar. Como resultado se encontró que la aplicación de este método, utilizando como elemento de ponderación el campo de la viscosidad de partículas, es eficiente para reducir las oscilaciones y el máximo espurio interface sólido – fluido generados numéricamente y que fueron objeto de análisis en los párrafos anteriores. La

elección de la viscosidad de partículas como valor de ponderación responde al crecimiento abrupto y de varios ordenes de magnitud que desarrolla la misma en la interface.

Se aplica además una corrección para el cálculo de τ_o (Eq. 3.11) cuyo objetivo es atenuar el pasaje abrupto desde un fluido Newtoniano a uno de Bingham. Para esto se utilizó la expresión sugerida por L06:

$$\left. \begin{aligned}
 \tau_o &= f(\chi) \tan \varphi (\rho_p - \rho_f) g \int_{x_2}^{x_2^*} \chi dx_2' \\
 f(\chi) &= \frac{1 + \tanh[K(\chi - \chi_{lm}) / \chi_{lm}]}{2} \\
 \mu_p &= \mu_m \left(\frac{1 + 3/2 \tilde{\chi}}{1 - \tilde{\chi} / \chi_M} \right)^2 + \frac{1}{2} \tau_o (S_{II} + \varepsilon)^{-1/2} \\
 \tilde{\chi} &= \min(\chi, \chi_{lm})
 \end{aligned} \right\} \text{Eq. 4.10}$$

Donde K es una constante relacionada al tamaño de la malla. Esta expresión sustituye a la propuesta originalmente en Eq. 3.11).

Se realizó una nueva simulación numérica (TED101), incorporando las modificaciones descritas en los párrafos anteriores, idéntica en su configuración a la simulación en la malla más gruesa y con el paso temporal más pequeño (SED101 - situación en la que las oscilaciones son más evidentes) pero sin considerar el esquema upwind básico $\gamma_{MFP} = 1$. Las características generales obtenidas con este método son muy similares a las del lecho conformado en la simulación SED001. Se puede observar que la nueva implementación (TED001) logra eliminar las oscilaciones en la interface y atenuar el máximo de χ en ésta desplazando el perfil hacia valores levemente más diferenciados de χ_{lm} ; observándose además una disminución en el gradiente de la viscosidad de partículas en la zona próxima a la interface (Figura 4.33)

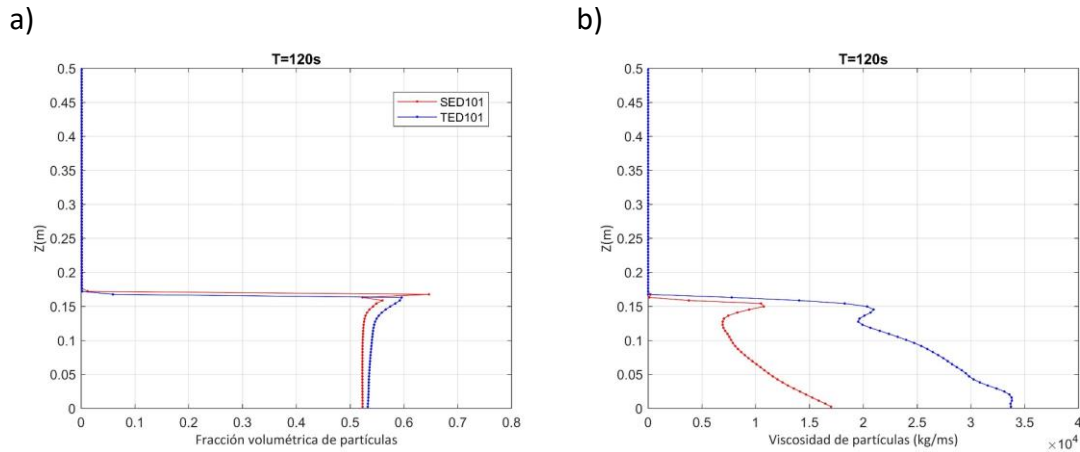


Figura 4.33: a) Perfiles verticales de la fracción volumétrica de partículas (χ) (a) y de la viscosidad de partículas (b) para en $T=120s$. Sensibilidad al esquema de interpolación de la presión. Cada simulación se representa en un color diferente de acuerdo a la descripción en la figura a). Sedimentadores.

En resumen, se puede concluir que la simulación numérica realizada representa correctamente en líneas generales el ensayo físico emulado con resoluciones temporal y espacial adecuadas. Sin embargo, surgen algunas diferencias entre los resultados del ensayo físico con la simulación numérica donde el lecho sólido se conforma más rápidamente definiéndose con un espesor mayor y una porosidad uniforme que son producto de las observaciones reseñadas con anterioridad. La existencia de oscilaciones y valores exacerbados en los perfiles de χ , producto de la implementación numérica generada por los fuertes gradientes de la viscosidad de partícula en la interface, son suavizados con la modificación de la interpolación de la presión y la corrección de la viscosidad de partículas en la zona de transición hacia comportamiento sólido.

A partir del análisis de la influencia de los diferentes parámetros del modelo las distancias encontradas entre los experimentos físico y numérico podrían acortarse encontrando un conjunto de ellos que logre representar adecuadamente las características de la fracción sólida: la altura de la capa de arena y su porosidad pueden ajustarse con el parámetro χ_{lm} mientras que la velocidad en la que se desarrolla la sedimentación parece estar asociada al diámetro las partículas. La caracterización del comportamiento de diferentes muestras de material particulado con parámetros que puedan traducirse en aquellos que usa el modelo es un aspecto de gran relevancia para la continuidad de este trabajo, pero que excede al alcance del mismo.

Finalmente se introduce en el dominio numérico una esfera rígida, mediante la utilización del método de condiciones de borde inmersas, con el propósito de obtener una representación cualitativa de la sedimentación de partículas sobre ella. Se realiza para esto una nueva simulación numérica utilizando los mismos parámetros que el caso de referencia, pero en la malla de mayor resolución (SEE001) a efectos de obtener una mejor representación de la esfera. No se pretende con este ejercicio realizar un estudio exhaustivo de este caso, sino simplemente ejemplificar el fenómeno físico a la vez que

se verifica la compatibilidad de la implementación del modelo de partículas con el módulo de condiciones de borde inmersas del *caffa3d*. La esfera tiene un radio de dos centímetros y su centro está ubicado en la intersección de los planos verticales medios del dominio a una altura de 10 cm del suelo. En la Figura 4.34 se muestran las isosuperficies de χ a 0.52 (en color gris) y a 0.2 (en color rosa) para diferentes instantes de tiempo. Se puede visualizar que a medida que tiene lugar la decantación se forma un depósito de arena sobre la esfera que se mantiene mientras que se conforma el lecho sólido, hasta que el nivel del mismo la cubre completamente. Si bien el espesor del lecho es levemente superior al obtenido en la simulación análoga sin esfera, la diferencia es difícil de apreciar dado que el volumen de la esfera es muy pequeño en comparación con el volumen total de arena.

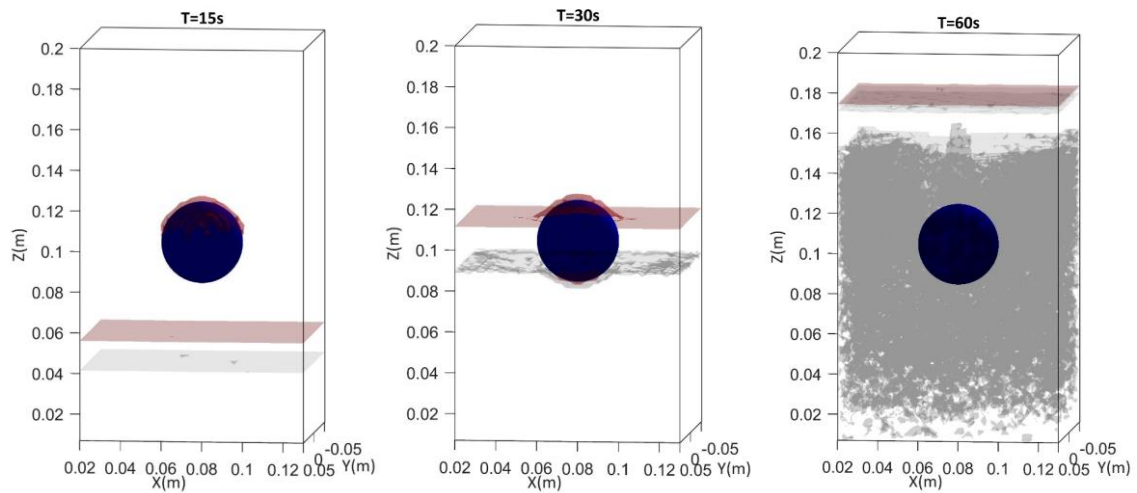


Figura 4.34: Sedimentación de arena sobre una esfera sólida. Isosuperficies de $\chi=0.2$ (rosa) y $\chi=0.52$ (gris) en diferentes instantes de tiempo. Sedimentadores.

4.3 Erosión de un lecho de arena generado por un chorro vertical sumergido

En esta sección se continua con la validación del modelo mediante la simulación numérica de una serie de chorros sumergidos turbulentos, circulares y planos, donde la velocidad del flujo tiene una interacción más importante con el lecho sólido que en los ejemplos analizados en las secciones 4.1 y 4.2. Los experimentos numéricos diseñados están inspirados en los experimentos de laboratorio con chorros circulares (erosión circular) realizados por Aderibigbe y Rajaratman 1996 (A&R), cuyos resultados servirán para la verificación de la aplicabilidad del código *caffa3d*. También se emularán los experimentos de Qian et al. 2010 (Q10) quienes extienden el trabajo experimental de A&R a chorros planos (erosión plana), haciendo además la simulación numérica de éstos y de alguno de los casos de A&R. A diferencia de lo aquí propuesto, el código numérico utilizado por Q10 implementa un modelo euleriano de dos fases.

4.3.1 Erosión circular

La prueba de erosión de chorro sumergido (JET-submerged Jet Erosion Test) constituye una de las herramientas más utilizadas para el estudio de la erodabilidad de suelos debido a su adaptabilidad a situaciones de laboratorio y de campo y su robustez en una amplia gama de materiales (Hanson 1990, Hanson y Cook 2004). JET consiste en hacer impactar sobre un depósito de material particulado de espesor uniforme un chorro vertical de diámetro “ d ” y velocidad U_0 , medida en la boquilla de entrada del mismo, desde una altura “ h ” por encima del nivel del sedimento (altura de impacto). A modo de facilitar la comprensión se realiza en la Figura 4.35 una presentación esquemática del montaje de los experimentos.

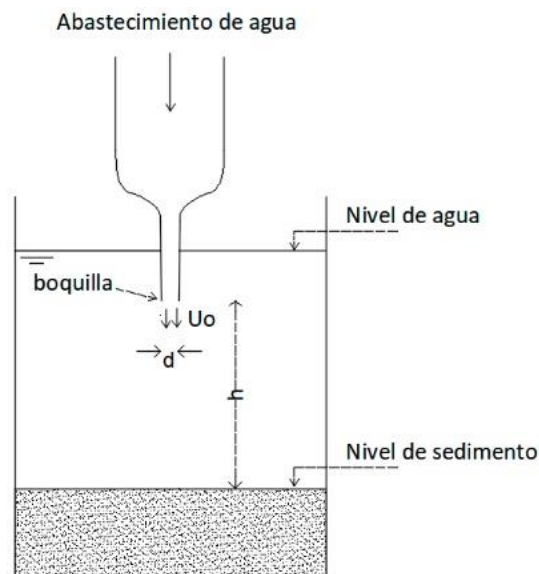


Figura 4.35: Representación esquemática de JET (prueba de erosión de chorro sumergido). Fosa circular.

Wahl 2016 y Karamigolbaghi et al. 2017 hacen una revisión del estado del arte de JET. Ambos reseñan un conjunto de métodos numéricos simples que se han desarrollado para analizar datos recolectados usando esta técnica y que permiten determinar la tensión crítica de cizalla y el coeficiente de erosión del suelo. Wahl 2016 concluye que si

bien durante un tiempo JET ha permanecido estandarizado, una nueva generación de trabajos ha marcado tendencia a regresar a la no estandarización enfatizando la importancia de seguir profundizando en la comprensión de las metodologías. Karamigolbaghi et al. 2017 usando una gran base de datos de resultados JET de la literatura, concluye que algunos de estos métodos conducen a valores poco realistas para los parámetros de erosión, y afirman que si bien las relaciones empíricas disponibles son estadísticamente significativas, el coeficiente de erodabilidad calculado para un cortante crítico dado tiene una incertidumbre de varios órdenes de magnitud. Finalmente, los autores concluyen que el conocer todos los factores que pueden afectar la erodabilidad de los suelos cohesivos y no cohesivos podría explicar por qué los resultados del JET son incapaces de predecir la erosión en algunos casos, sugiriendo precaución a la hora de la aplicación del método.

La utilización de CFD para la simulación es una herramienta útil complementaria a las herramientas experimentales que podría arrojar luz sobre algunas de las incertidumbres evidenciadas por JET. Curiosamente la bibliografía actual en esta temática es escasa, se pueden encontrar, por ejemplo, algunos trabajos que utilizan el mismo modelo de Q10 (realizados por el mismo equipo de investigadores), el trabajo de Kuang 2013 que utiliza CFD-DEM (Discrete Element Method) para simular la erosión de un chorro de aire en un depósito de esferas de vidrio y algunos otros pero empleando parametrizaciones empíricas de la erosión (algunas obtenidas a partir de resultados de JET) en lugar de modelar el lecho de sedimento como, por ejemplo, Mercier et al. 2016.

En el trabajo de A&R se realizan un conjunto de 67 ensayos en los que se utilizan dos muestras de arena cuasi uniforme de diferente diámetro y se varía la distancia de impacto (h), el diámetro de la boquilla (d) y la velocidad a la salida de ésta (U_0). Para cada experimento los autores toman medidas de la máxima erosión asintótica E_m cuando el chorro está activado (jet dinámico) mientras que los valores de erosión $E(r)$ son relevados una vez que el chorro se ha detenido y el agua es drenada cuidadosamente (jet estático). En el trabajo de Beltaos y Rajaratnam 1977 se realizan una serie de pruebas JET y se propone que para valores de “ h grandes” ($h > 8.3d$) la distancia característica del experimento es “ h ” mientras que para valores de la misma “pequeños” ($h < 5.5d$) la esta distancia debe ser sustituida por “ d ”. Beltaos y Rajaratnam 1977 encuentran que la profundidad máxima de la erosión aumenta en el tiempo y eventualmente se llega a un estado asintótico mediante ensayos realizados con arena y partículas de poliestireno.

A&R encuentran que la máxima erosión es proporcional al parámetro de erosión E_c , que es un número adimensional definido como el cociente entre el Froude densisimétrico y la distancia relativa de impacto (h/d):

$$E_c = \frac{U_0 d/h}{\sqrt{g 2r_p \frac{(\rho_p - \rho_f)}{\rho_f}}} \quad \text{Eq. 4.11}$$

Los autores dividen en dos los regímenes de flujo:

1. Régimen de chorro suavemente desviado – WDJR (Weakly Deflected Jet Regime), que tiene lugar para valores de $E_c < 0.35$ aprox. En esta situación el chorro penetra levemente en el lecho de sedimento y como resultado tiene una interacción reducida con el mismo.
2. Régimen de chorro fuertemente desviado – SDJR (Strongly Deflected Jet Regimen), que tiene lugar para valores de $E_c > 0.35$ aprox. En este caso el chorro siempre penetra el depósito de sedimento y por lo tanto es desviado abruptamente transportando en suspensión material hacia afuera de la fosa generada.

A su vez, en función del valor de E_c cada una de estas clasificaciones puede subdividirse en dos (I, II) de acuerdo a lo esquematizado en la Figura 4.36.

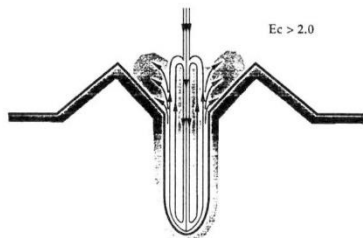


Fig. 4a. Strongly deflected jet regime I (SDJR I).

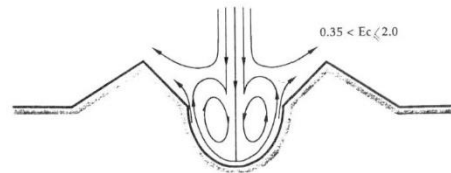


Fig. 4b. Strongly deflected jet regime II (SDJR II).

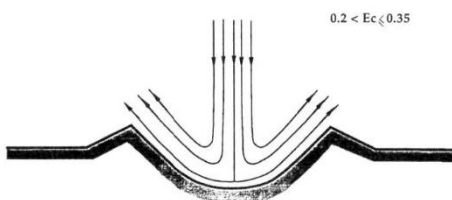


Fig. 4c. Weakly deflected jet regime I (WDJR I).

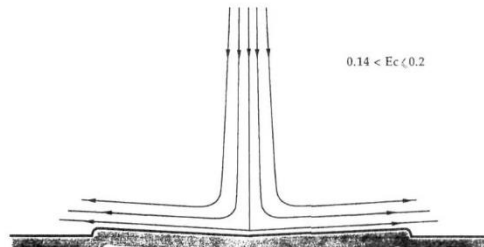
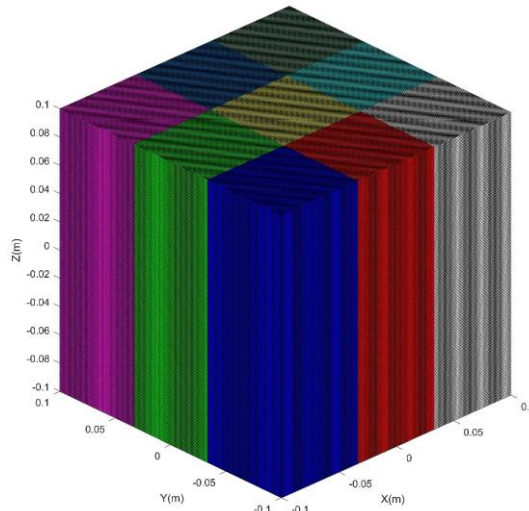


Fig. 4d. Weakly deflected jet regime II (WDJR II).

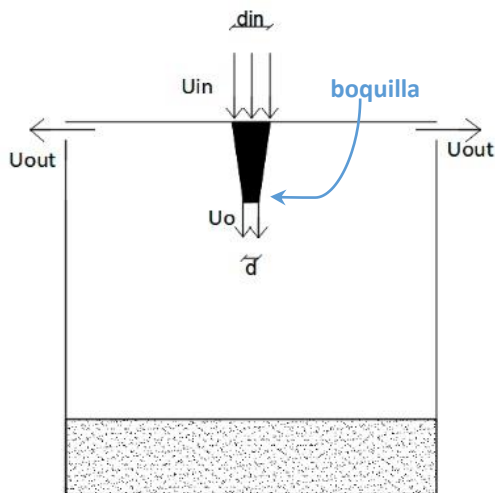
Fig. 4. Sketches of flow regimes.

Figura 4.36: Representación esquemática de los diferentes regímenes generados con JET. Figura extraída de A&R. Fosa circular.

Para la simulación numérica con el *caffa3d* se usó el esquema de la Figura 4.35. Se trabajó en un dominio cúbico de lado $B=20\text{cm}$, representado con 9 bloques geoméricamente idénticos de forma prismática de sección cuadrada de lado $(B/3)$ y altura B . Cada bloque tiene un arreglo de $64 \times 64 \times 192$ celdas uniformes y cúbicas ($\Delta=1.042\text{mm}$), lo que da un total de más de 7 millones de celdas para la simulación (Figura 4.37). Las condiciones de borde utilizadas fueron de pared en el piso y en todas



las caras laterales del dominio exceptuando los 2cm superiores de las mismas donde se impone condición de salida ($\cong 20\% h$). En el techo del dominio se utiliza una condición de borde de entrada en todas las celdas, donde se impone una velocidad “ U_{in} ” en una circunferencia central de diámetro “ d_{in} ” y velocidad nula en el resto de ellas (a los efectos de la simulación la velocidad nula actúa como condición de pared). La entrada del fluido al dominio es simulada mediante una tobera de forma troncocónica que es representada con el método de condiciones de borde inmersas. El diámetro superior de



la tobera es “ d_{in} ” mientras que el diámetro inferior es “ d ”. La velocidad de entrada “ U_{in} ” es calculada de manera de obtener en la boquilla la velocidad “ U_o ” que se desea. La velocidad de salida (U_{out}) es obtenida por el modelo a partir del flujo de entrada de manera de mantener el balance de masa en cada paso de tiempo. En la Figura 4.38 se presenta un corte vertical por el plano medio del dominio (que es idéntico en ambas direcciones).

Figura 4.38: Representación esquemática de las condiciones de borde de entrada y salida del dominio en las simulaciones *caff3d*. JET.

Para modelar la turbulencia del chorro se utiliza el método LES con la parametrización de Smagorinsky.

Se realizaron diferentes simulaciones modificando el parámetro E_c mediante la modificación de U_o y dejando invariantes los restantes parámetros entre ellas. Los parámetros numéricos y de la caracterización del sedimento utilizados en la simulación se presentan en la Tabla 4.10 y Tabla 4.11.

Caso	Δ (mm)	Δt (s)	LSG	γ_{MFP}	χ_{im}	χ_{IM}	ϵ
JET	1.042	5×10^{-3}	10	1	0.52	0.63	1×10^{-3}

Tabla 4.10: Parámetros numéricos de las simulaciones *caffa3d*. Fosa circular.

Caso	ϕ (°)	r_p (μm)	ρ_s (kg/m^3)
JET001	45	750	2650

Tabla 4.11: Características del sedimento simulado con el *caffa3d*. Fosa circular.

Algunos problemas de inestabilidades numéricas se encontraron originalmente al intentar imponer las condiciones iniciales de la simulación, en particular la imposición de los valores de la fracción volumétrica de partículas de la fracción sólida. Debido a esto la simulación se inicia con el chorro apagado, y se deja que las partículas sedimenten naturalmente para conformar el depósito de arena. Los valores χ y la altura de la mezcla agua-arena iniciales son impuestas de manera de obtener los valores de estos parámetros para la configuración del lecho sólido deseados (tal como se vio en la sección 4.2 estimaciones de estos parámetros pueden obtener mediante la ecuación Eq. 4.8). Una vez finalizada la sedimentación el chorro es iniciado paulatinamente desde el reposo hasta llegar a la velocidad U_{in} deseada. Cabe señalar que esta metodología forma parte de un transitorio de rápido desarrollo que es representativa de los ensayos experimentales y que no afecta a los valores asintóticos de erosión que son los relevados a efectos de la validación aquí propuesta.

El perfil de la fracción volumétrica de partículas que se obtiene una vez finalizada la sedimentación y su configuración inicial descritas en el párrafo anterior se muestran en la Figura 4.39. Dado que en los experimentos de A&R la porosidad del material no es tomada en cuenta como una variable de influencia en el proceso y por tanto sus valores no son reportados, se busca para los perfiles numéricos un perfil que pueda ser representativo de la arena y que se aproxime a los valores de los experimentos de C16 a modo de referencia. Cabe señalar que en trabajo de Q10 se demuestra que la porosidad es una variable influyente en el proceso de socavación por JET.

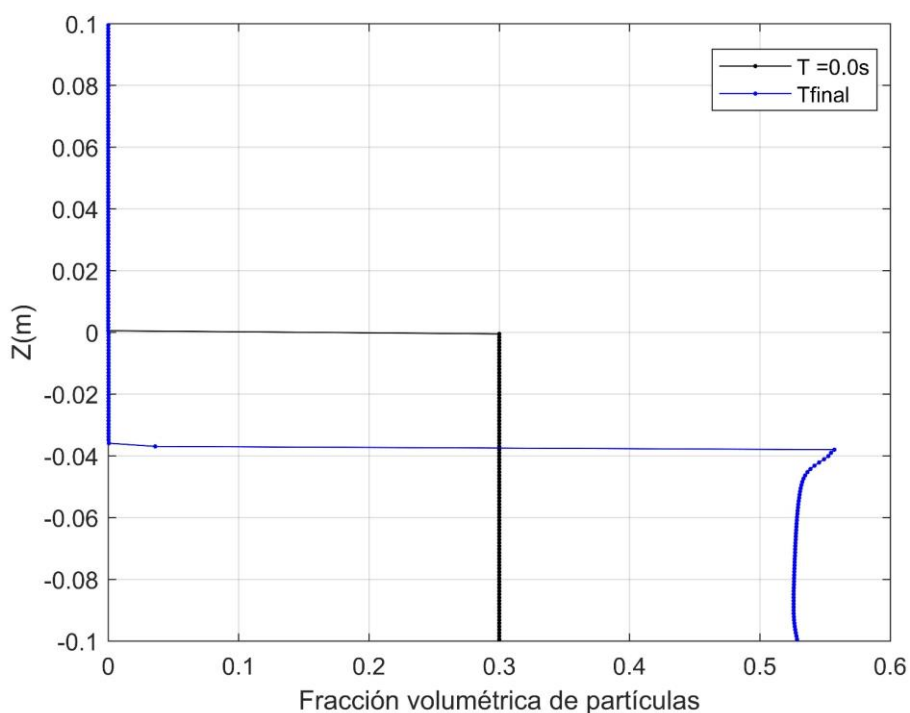


Figura 4.39: Perfiles de χ inicial y al finalizar la decantación de partículas y antes de activarse el JET. Fosa circular.

Se utilizó la modificación de la interpolación de la presión descrita en la sección 4.2. Simulaciones preliminares sin esta incorporación y con el chorro en funcionamiento resultaron en la amplificación de las oscilaciones de interface hasta niveles incompatibles con la modelación.

Los valores de la altura de impacto, el diámetro y la velocidad en la boquilla deben ser ajustados con la simulación. El valor de h se estima una vez que la sedimentación ha finalizado, y el valor de d se define en función de la boquilla que es efectivamente representada por el método de condiciones de borde inmersas mientras, que la velocidad U_0 es medida en cada simulación. Los parámetros geométricos h y d permanecen incambiables entre las simulaciones con valores aproximados de 11,8cm y 8mm respectivamente. En la Tabla 4.12 se muestran el E_c y la U_0 obtenidos de cada una de las simulaciones realizadas.

Caso	U_0 (m/s)	E_c
JET001	0.288	0.13
JET002	0.487	0.21
JET003	0.663	0.29
JET004	0.998	0.43
JET005	1.163	0.51

Tabla 4.12: Valores de la velocidad en la boquilla y del parámetro de erosión (E_c) para las diferentes simulaciones *caffa3d*. Fosa circular.

La conformación del chorro y el funcionamiento de la tobera es muy similar en todos los casos. En la Figura 4.40 se presenta para una de las simulaciones el flujo dentro de la tobera y las isosuperficies del campo de velocidad vertical adimensionado respecto de U_0 . En la Figura 4.41 se puede visualizar el perfil de este último a la salida de la boquilla ($Z=8\text{cm}$).

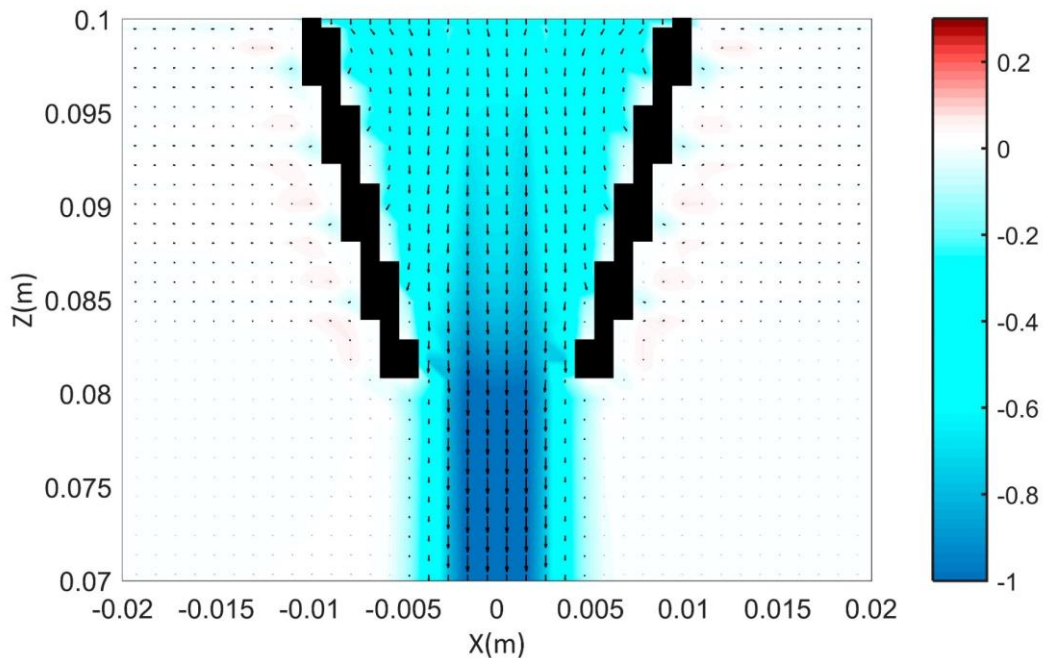


Figura 4.40: Esquema de funcionamiento de la tobera. Color: Isosuperficies del nivel del campo de velocidad vertical adimensionado respecto de U_0 , flechas: sentido del flujo en las simulaciones *caffa3d*. Líneas negras: tobera generada con el método de condiciones de borde inmersas. Fosa circular.

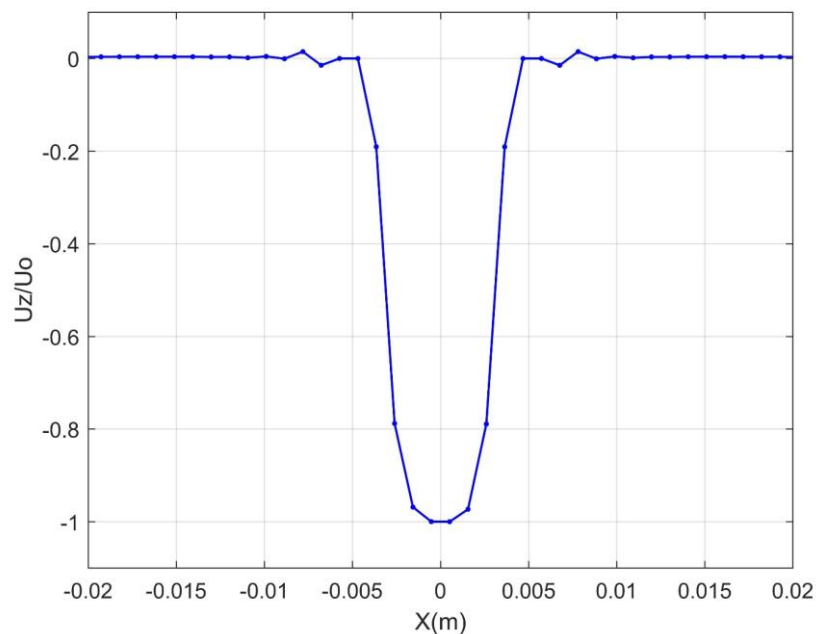


Figura 4.41: Perfil de la velocidad vertical a la salida de la boquilla ($Z=0.08\text{m}$) adimensionado respecto a U_0 en las simulaciones *caffa3d*. Fosa circular.

En la Figura 4.42 se presenta un esquema del fenómeno representado en las simulaciones. Desde la Figura 4.43 a la Figura 4.47 se puede visualizar un esquema general del chorro y de la fosa erosionada en el estado de equilibrio para cada simulación. A efectos de tener una idea del comportamiento del fluido y la arena en su conjunto se grafican isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad y el campo χ , de esta manera los valores positivos en el gráfico representan el módulo de la velocidad mientras que los valores negativos representan los valores de la fracción volumétrica de partículas con el signo cambiado (esquema general JET).

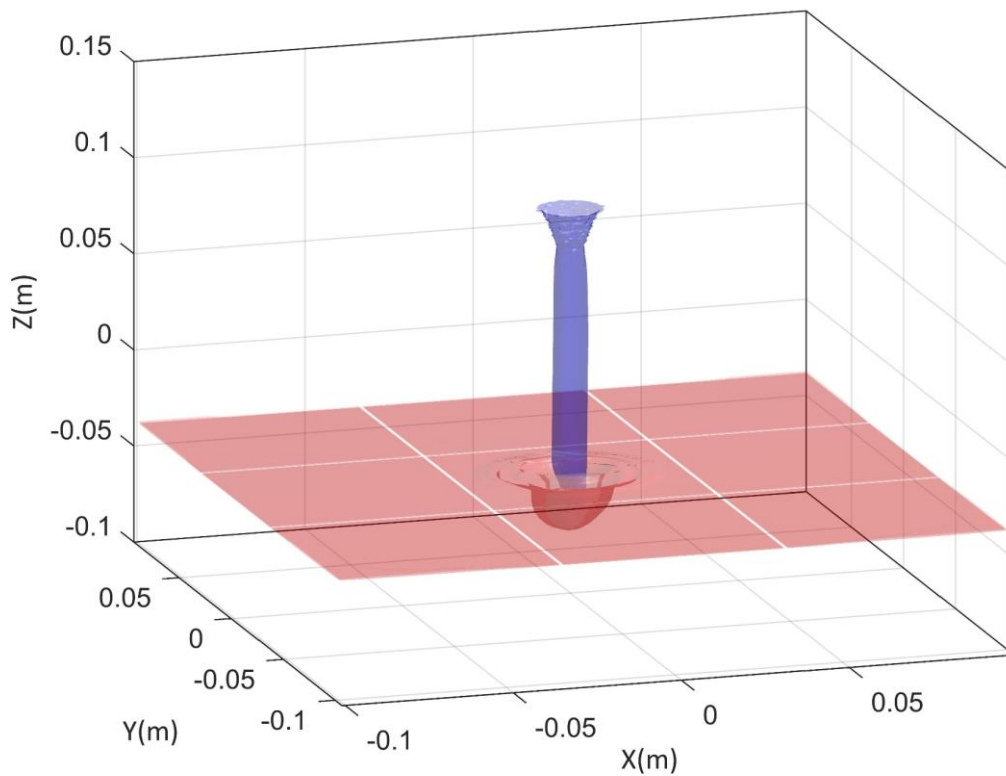


Figura 4.42 Representación esquemática del fenómeno de erosión para una simulación genérica mediante una isosuperficie de velocidad del chorro (azul) y otra de χ (rosa). Fosa circular.

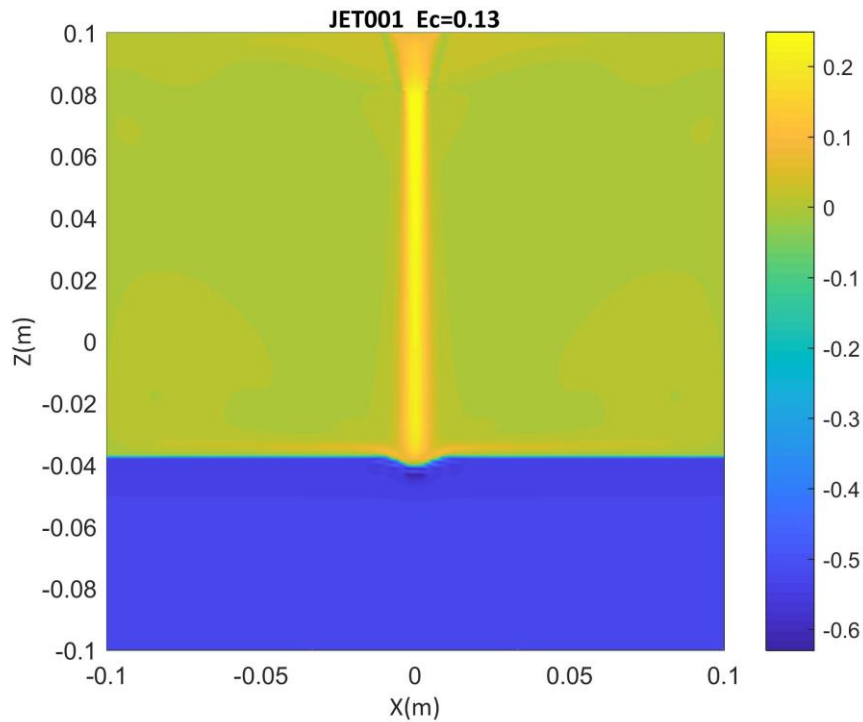


Figura 4.43 Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET001. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

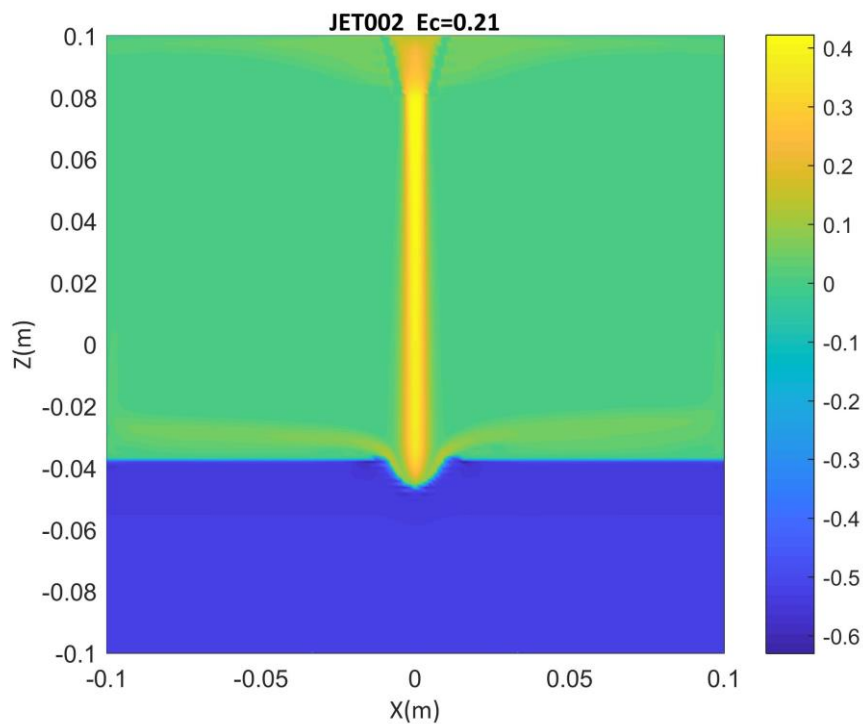


Figura 4.44: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET002. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

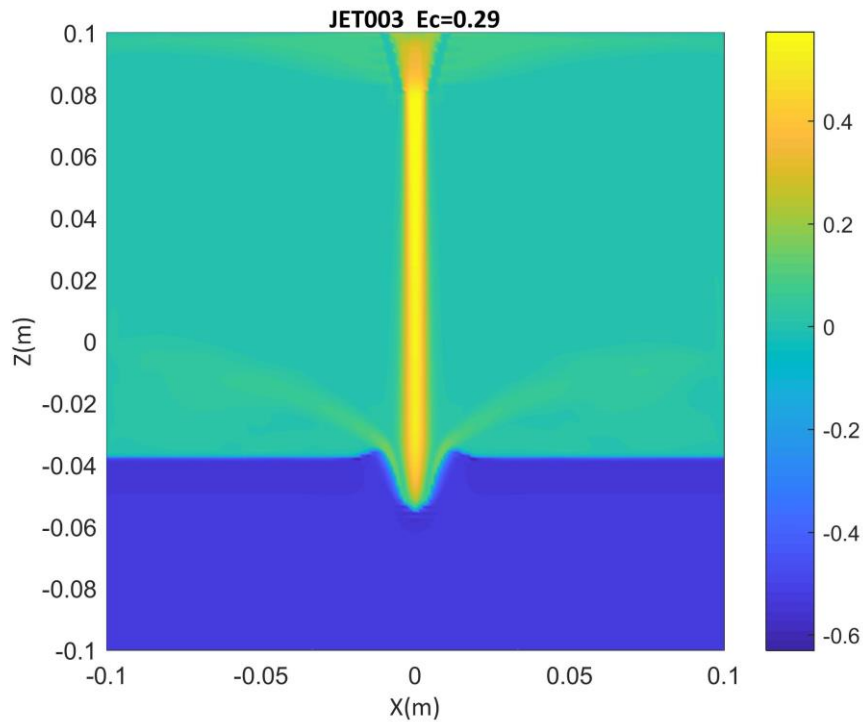


Figura 4.45: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET003. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

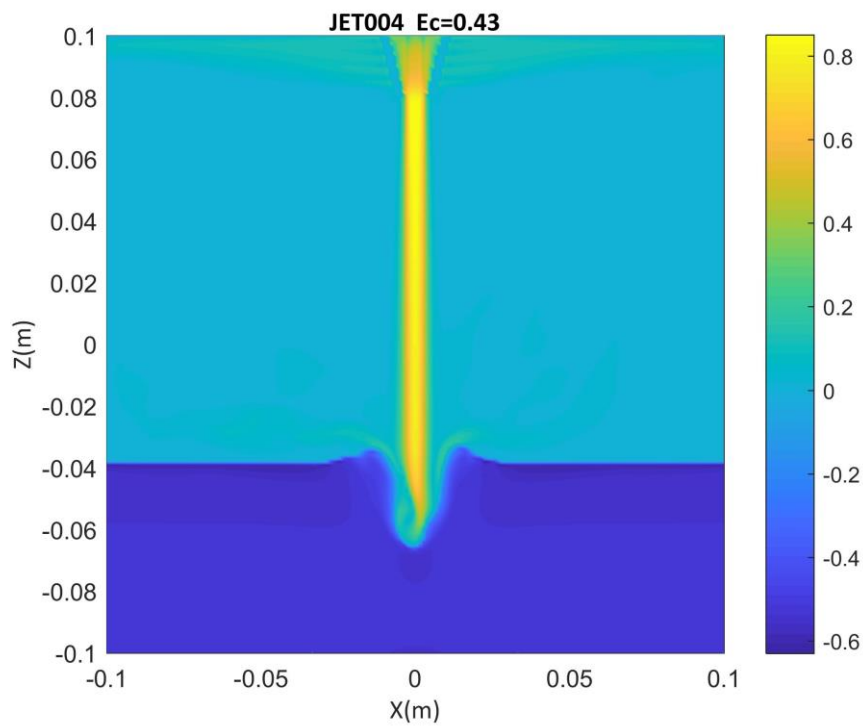


Figura 4.46: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET004. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

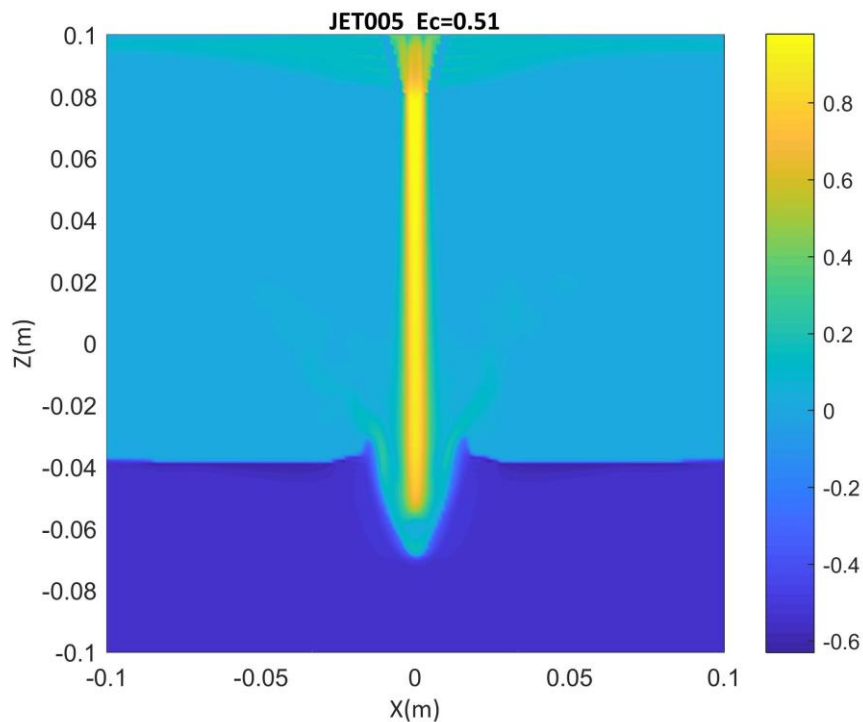


Figura 4.47: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad (m/s) y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d JET005*. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

Las simulaciones muestran que el modelo reproduce en forma adecuada los diferentes regímenes del JET descritos por A&R (WDJR y SWJR) y que fueron presentados en la Figura 4.36. Para valores más bajos de Ec la socavación es muy pequeña y el chorro prácticamente se defleca 90° al impactar con el lecho de arena. A medida que el valor de Ec aumenta, la fosa socavada se torna cada vez más profunda hasta que la misma es generada por un patrón de flujo cuasi-vertical para los valores más altos de Ec . Esto se puede apreciar aún mejor en las figuras que se presentan a continuación, que son similares al esquema general JET presentado antes pero utilizando el módulo de la velocidad adimensionada por U_0 . Se grafican además los contornos del mismo ampliando la zona erosionada (Figura 4.48 a Figura 4.52). Se puede concluir también que, tal como se resume en A&R, el valor máximo de erosión aumenta en forma proporcional a Ec .

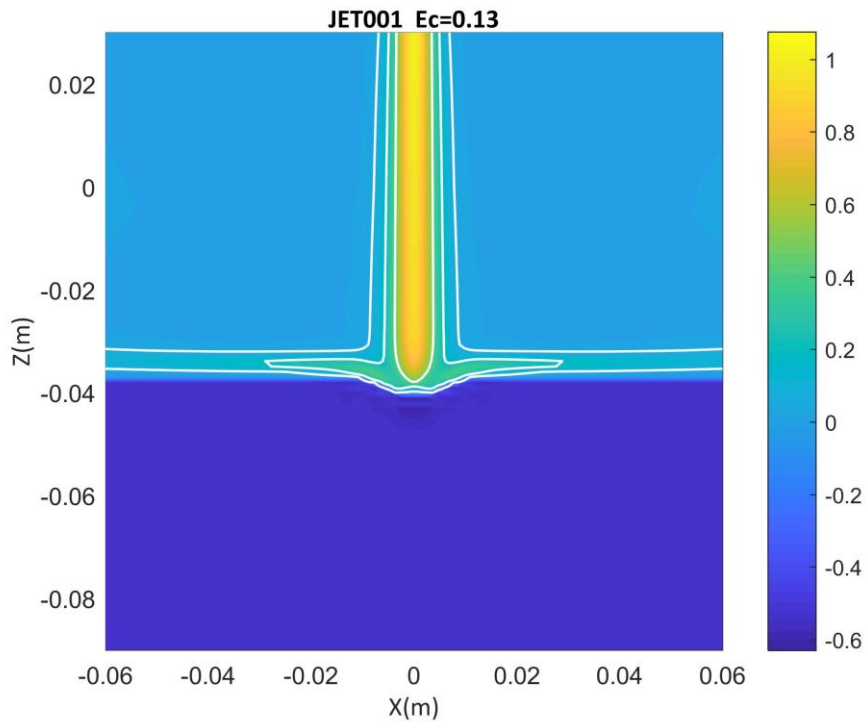


Figura 4.48: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET001. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

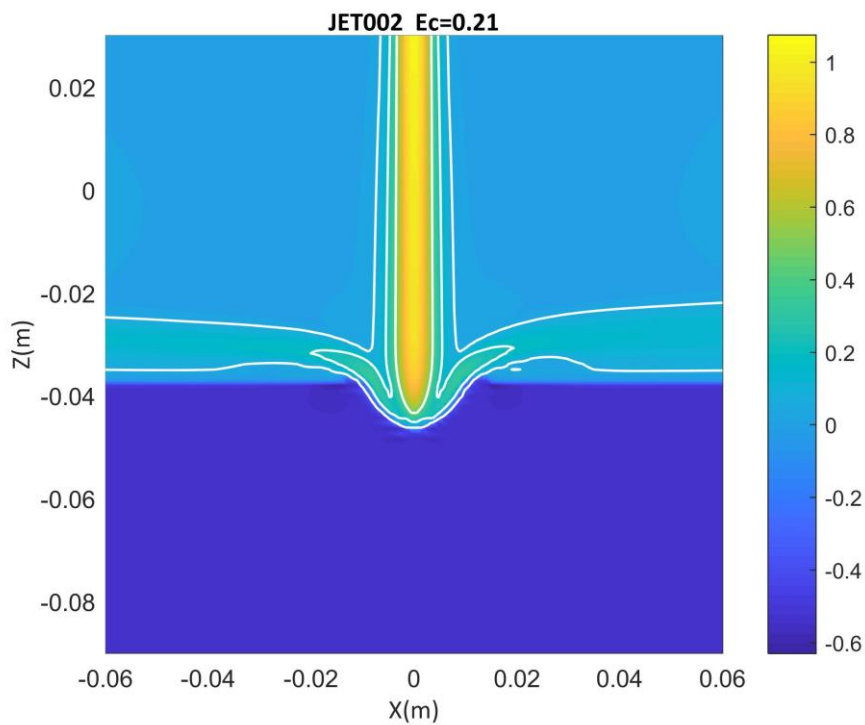


Figura 4.49: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET002. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

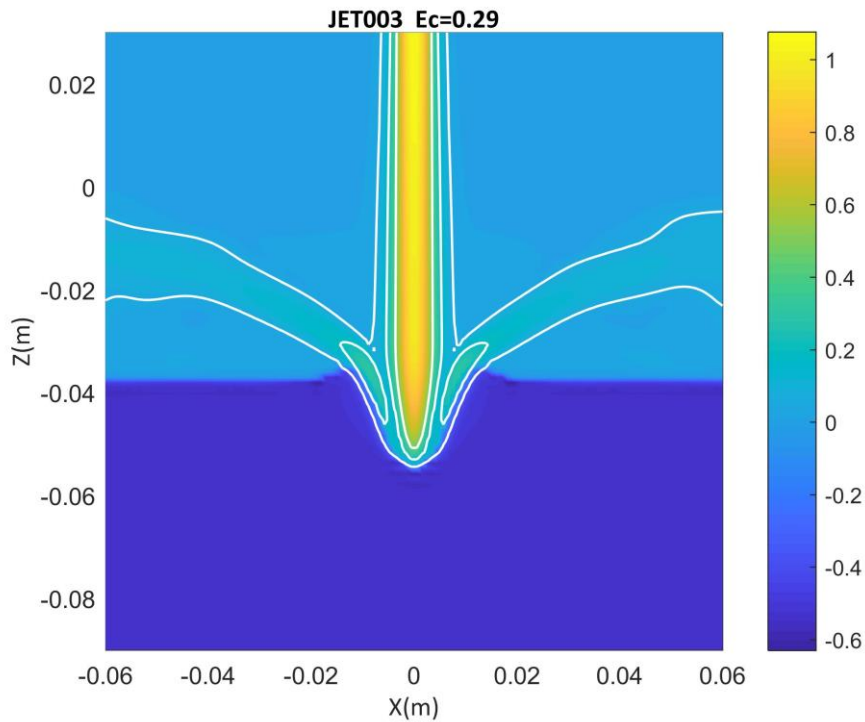


Figura 4.50: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET003. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

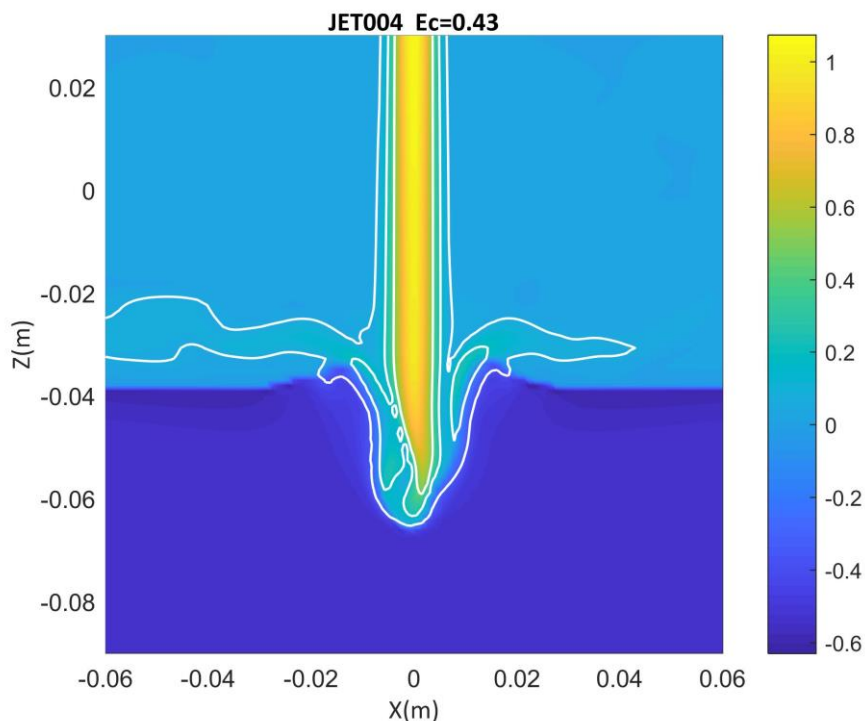


Figura 4.51: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET004. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

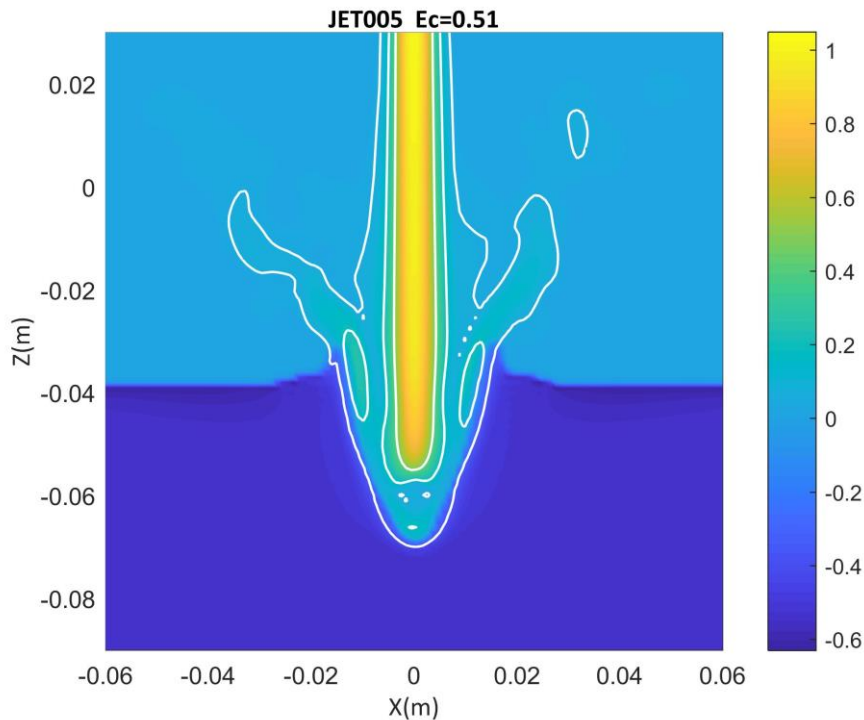


Figura 4.52: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad adimensionalizada respecto a U_0 y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JET005. Líneas blancas: contornos de la velocidad adimensionalizada: 0.05, 0.2, 0.45. Esquema general JET relativo. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa circular.

En el trabajo de A&R se presentan los perfiles del lecho erosionado adimensionalizados respecto al valor máximo de erosión, $E(r)/E_m$, en función de los diferentes valores de Ec de los ensayos en su trabajo (Figura 4.53). Para los valores mayores de Ec los perfiles se confunden, según los autores esto tiene lugar para valores mayores a 0.35 (SDJR), mientras que para rangos menores la amplitud superior de la fosa adimensionalizada aumenta rápidamente al bajar el valor de Ec (WDJR). En la Figura 4.54 se presenta un diagrama similar para todas las simulaciones realizadas con el *caffa3d*. Para determinar el perfil de la fosa se tomó la media de χ en los dos planos verticales medios y se suavizó con un filtro de 3 puntos, que si bien permite visualizar de forma menos escalonada los resultados no muestra diferencias cuantitativas ni cualitativas con un perfil individual. A modo de analizar los resultados se utiliza la curva de nivel χ_{lm} como referencia de la interface entre el lecho de arena y el agua. De esta figura se desprende que, si bien cualitativamente se pueden apreciar comportamientos similares, el radio máximo de la fosa relativa socavada es menor en este último caso. En particular, para $Ec > 0.35$ A&R reportan un radio superior de la fosa de 1.7, mientras que en las simulaciones se tiene un factor de 0.7 con este valor.

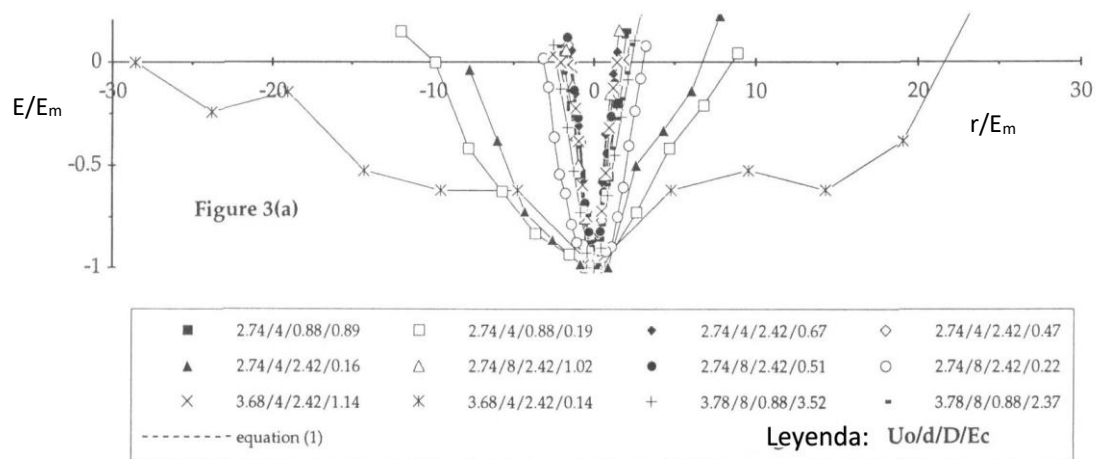


Figura 4.53: Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima para diferentes valores de E_c . Valores experimentales. Figura extraída de A&R. JET.Fosa circular.

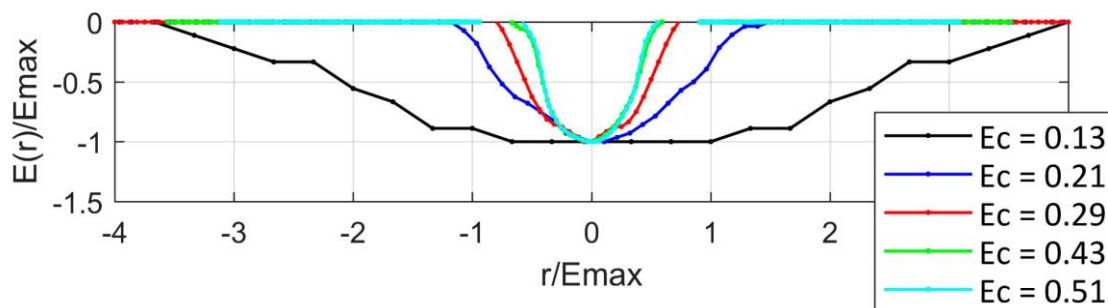


Figura 4.54: Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima, perfil medio en los dos planos verticales centrales curvas de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido). Valores de las simulaciones *caffa3d*. Cada simulación es representada con un color diferente. JET.Fosa circular.

Para el caso con menor valor de E_c se puede ver que la amplitud de la fosa relativa simulada es considerablemente menor a su equivalente en A&R, manteniendo una relación de 1:5 aproximadamente. Cabe señalar, que si bien entre estas simulaciones se mantiene el valor de E_c el régimen de flujo en la simulación a la salida de la boquilla es laminar con un valor del número de Reynolds de 1840 mientras que en el experimento el régimen es turbulento con un Reynolds de 15000 aproximadamente (tomando como referencia la velocidad y diámetro del chorro en la boca de la tobera). El número de Reynolds relativamente bajo en la raíz del chorro puede llevar a que el fenómeno en este caso tal vez no esté siendo adecuadamente representado únicamente con el parámetro de erosión. Se observa además que la fluctuación de los chorros simulados es escasa, pudiendo reflejar una relativa atenuación de las mismas por parte del esquema numérico, demorando la inestabilización natural del chorro observadas en las realizaciones experimentales. En la Figura 4.55 se presenta la viscosidad turbulenta de la simulación con mayor velocidad (JET005, Tabla 4.1) que a igualdad de los restantes parámetros es la que presenta mayor número de Reynolds, donde se puede apreciar la afirmación anterior. La viscosidad turbulenta es apreciable en el chorro pero no en las zonas próximas al mismo, con un orden de magnitud similar en su valor al de la

viscosidad molecular del fluido. Esta situación es esperable para un modelo LES y podría pensarse entonces, que desde este punto de vista, la resolución espacial empleada es suficientemente fina como para representar en forma explícita una buena parte del fenómeno simulado. No obstante lo anterior, puede ser interesante en trabajos futuros considerar simulaciones donde se estimule la inestabilización del chorro mediante la inclusión de fluctuaciones en la base del mismo.

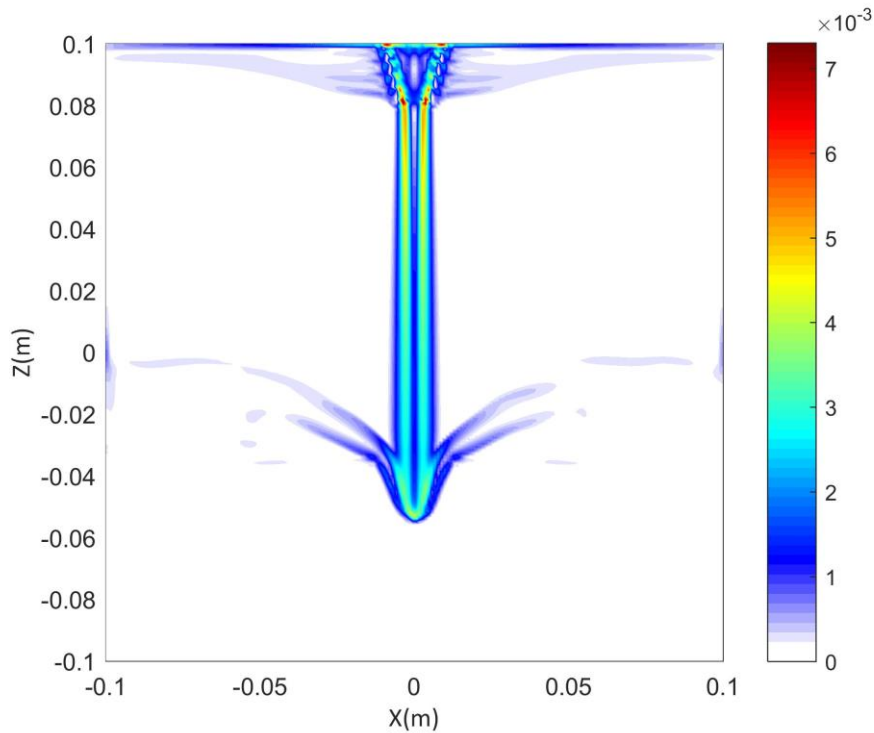


Figura 4.55: Viscosidad turbulenta (Kg/ms) para la simulación caff3d JET005. JET. Fosa circular.

A&R encuentran una ley empírica, con un ajuste potencial que vincula el valor del cociente de la erosión máxima y altura de impacto con Ec :

$$\frac{E_m}{h} = 1.26 Ec^{0.11} - 1 \quad \text{Eq. 4.12}$$

En la Figura 4.56 se comparan los valores simulados contra el ajuste de A&R y con una serie de experimentos JET recopilados por los autores. El valor de la erosión máxima relativa respecto de h tiene un andamio similar para valores menores de Ec , dando valores algo mayores a lo esperado para las modelaciones con Ec menores. A pesar de esto, los puntos modelados están sobre la nube de dispersión de los experimentos

relevados con una tendencia a sobreestimar la profundidad de erosión en relación con la apertura de la fosa.

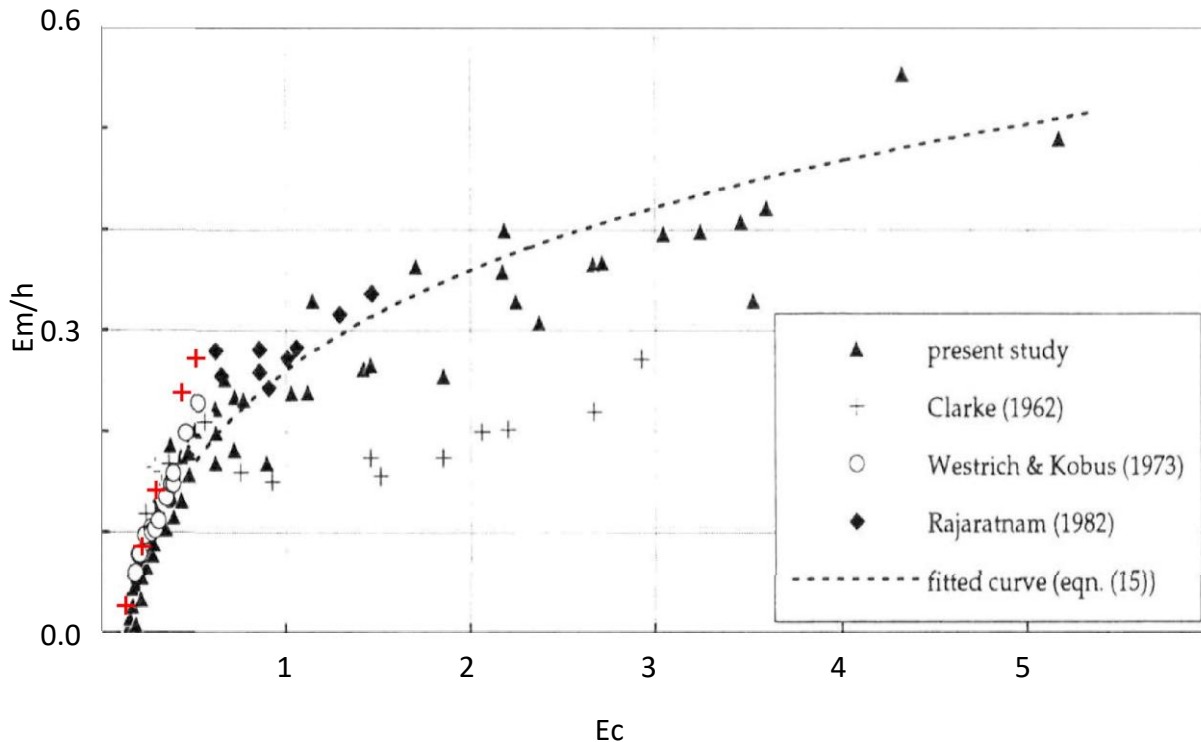


Figura 4.56: Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima. Cruces rojas: resultados de las simulaciones *caffa3d*; línea punteada: Ajuste teórico A&R; marcadores negros: resultados experimentales de varios trabajos recopilados por A&R. La figura base es extraída de A&R. Fosa circular.

Se considera que como una primera aproximación al fenómeno el modelo presenta una buena performance. El código reproduce correctamente los diferentes regímenes expuestos en A&R (WDJR y SDJR) aunque genera fosas más estrechas respecto a los experimentos A&R con valores de máxima erosión razonables. Cabe señalar que las erosiones máximas medidas en las simulaciones fueron relevadas en régimen de jet dinámico, mientras que los experimentos lo hacen en jet estático. El detenimiento del chorro puede generar que el sedimento se reacomode levemente tendiendo a formar taludes con una pendiente según el ángulo final de cizalla (sección 4.1). En estas simulaciones el ángulo de fricción interna del material se tomó como $\varphi = 45^\circ$, siendo un valor tal vez alto para la arena. Por otro lado, los valores de χ utilizados pueden también generar sesgos en los resultados, si bien la porosidad no es tomada en cuenta en A&R como un parámetro de la socavación la misma es una variable de influencia en el proceso físico estudiado (Q10). Una última observación en este mismo sentido debe hacerse sobre la caracterización del tamaño de las partículas de arena. Si bien A&R caracterizan el sedimento a partir del D_{50} de las muestras experimentales un trabajo

posterior de los mismos autores, destinado al estudio de la erosión originada por chorros horizontales, demuestra que la no uniformidad del sedimento juega un papel importante en el tamaño de la fosa socavada. En especial los autores demuestran que para obtener buenas correlaciones entre las dimensiones que caracterizan la fosa y el parámetro de erosión el diámetro efectivo de la muestra debe ser el D_{95} en el cálculo de E_c en lugar del diámetro mediano (Aderibigbe y Rajaratnam 1998).

En el dominio seleccionado para la realización de las simulaciones numéricas en el *caffa3d* no es posible representar adecuadamente el fenómeno para valores considerablemente mayores de E_c . Las dimensiones del dominio fueron seleccionadas de manera de obtener tiempos de cómputo razonables con una resolución suficientemente fina como para representar adecuadamente el chorro en la boquilla de salida a la vez que se mantienen valores del número de Courant inferiores a la unidad de manera de mantener limitadas las oscilaciones en la interface. Diferentes análisis se han realizado sin éxito con el objetivo de representar valores sustancialmente mayores de E_c , debido a diferentes fenómenos que se generan como consecuencia de la variación de los parámetros de las simulaciones: profundidad de la fosa demasiado grande que barre el lecho de arena, alturas de impacto pequeñas que quedan al límite de aplicabilidad de la teoría o generan flujos secundarios que alteran el fenómeno, tiempos de sedimentación muy altos que redundan en tiempos de cómputo excesivos entre otros. Debido a que las simulaciones realizadas permiten visualizar el comportamiento en los diferentes regímenes resumidos por A&R, la evaluación del modelo en el extremo superior de los valores de E_c de A&R constituirá parte de una línea futura que de continuidad a este trabajo.

Se reafirma aquí lo expresado en la sección 4.2, el ajuste de los parámetros del modelo para obtener una representación adecuada de las características del material particulado es un punto fundamental y que excede el alcance de este trabajo.

4.3.2 Erosión plana

En esta sección se reproduce numéricamente uno de los experimentos realizados en Q10, quienes hacen una extensión de los resultados de A&R haciendo ensayos con un chorro plano que luego es simulado con un modelo euleriano bifásico. Este ejercicio de simulación busca reproducir cualitativamente los experimentos, con el objetivo de analizar el comportamiento del modelo en una situación diferente a las anteriores, sin pretender realizar una comparación exhaustiva entre los experimentos físico y numérico, debido a la incertidumbre en algunos parámetros que los definen.

En este caso el valor del diámetro del JET es sustituido por el espesor del chorro a los efectos de calcular el parámetro de erosión (Eq. 4.1). Los autores trabajan en el

experimento con agua y arena y los detalles del ensayo físico reportados en Q10 se exhiben en la Tabla 4.13.

D_{50} (mm)	ρ_s (kg/m ³)	α (%)	h (mm)	U_0 (m/s)	d (mm)	Ec
2	2650	37	144	1.78	2.5	0.18

Tabla 4.13: Valores experimentales empleados en Q10. Fosa plana.

El esquema general para el montaje de la simulación es similar a la fosa circular. En este caso se utilizó un dominio prismático de sección rectangular de ancho $B=8\text{cm}$, longitud $L=60\text{cm}$ y altura $H=30.4\text{cm}$; representado con 5 bloques geoméricamente idénticos dispuestos de acuerdo al esquema de la Figura 4.57. Cada bloque tiene un arreglo de $8 \times 240 \times 608$ celdas uniformes y cúbicas ($\Delta=0.5\text{mm}$), lo que da un total aproximado de 6 millones de celdas en el dominio. Las condiciones de borde utilizadas fueron de pared en el piso y en las caras laterales del dominio exceptuando la zona superior de las mismas donde se impone condición de salida; mientras que en las paredes frontales se usa condición de simetría. En el techo del dominio se utiliza una condición de borde de entrada en todas las celdas, donde se impone una velocidad " U_{in} " en una longitud " d_{in} " centrada en longitud y velocidad nula en el resto de ellas (similar a una condición de pared). Un corte vertical longitudinal del experimento se esquematiza en la Figura 4.38 (al ser un caso plano la sección se repite en cualquier corte longitudinal).

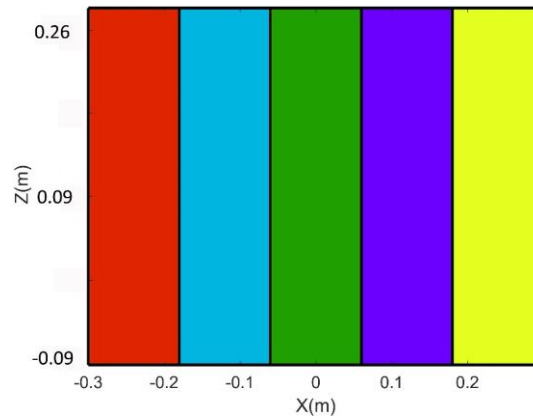


Figura 4.57: Representación del dominio de cálculo donde cada bloque se representa con un color diferente. Vista en planta. Fosa Plana.

Los valores de los parámetros numéricos utilizados en la simulación se presentan en la Tabla 4.14.

Caso	Δ (mm)	Δt (s)	LSG	γ_{MFP}	χ_{Im}	χ_{IM}	ϵ
JETP01	0.5	1×10^{-3}	10	1	0.52	0.63	1×10^{-4}

Tabla 4.14: Parámetros numéricos de la simulación *caffa3d*. Fosa plana.

Al igual que en el caso circular se deja un tiempo inicial para reproducir la decantación de la arena naturalmente antes de activar el jet, el perfil de χ resultante y su perfil inicial se presentan en la Figura 4.58. La porosidad seca de la arena ensayada por Q10 es similar a la de C16, de manera que al igual que en la sección anterior se buscó reproducir en el perfil las condiciones de empaquetamiento de las partículas para la arena saturada allí obtenidas. Se consideraron las mismas partículas que las utilizadas en Q10 tomando como referencia el D_{50} de la muestra.

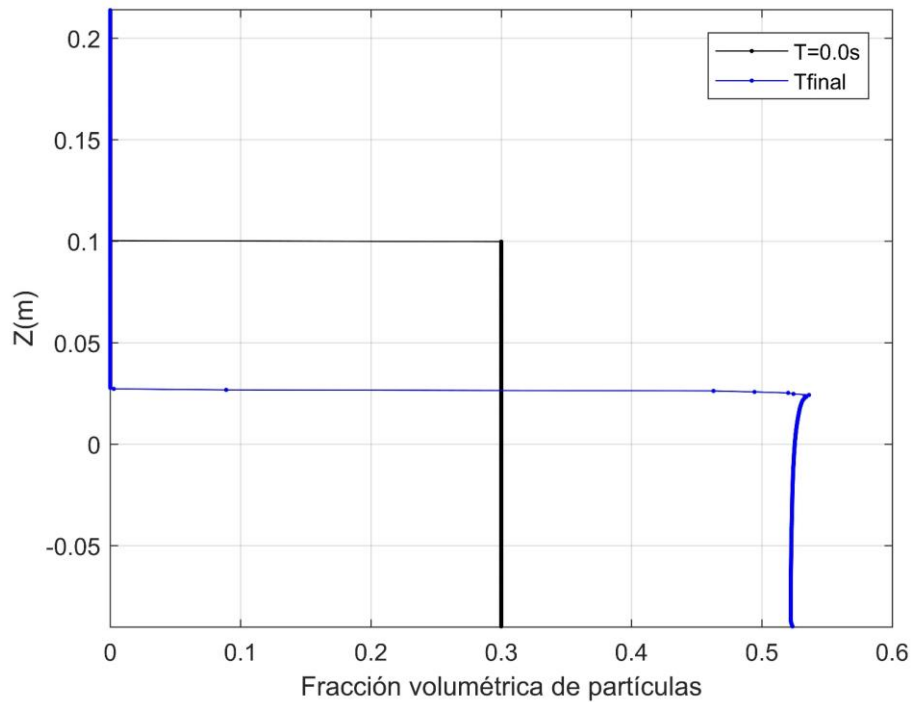


Figura 4.58: Perfil de χ al finalizar la decantación de partículas y antes de activarse el JET. Fosa plana.

Los parámetros ajustados en la modelación dan valores de $h=12\text{cm}$, $d=2\text{mm}$ y $U_0=1.1\text{m/s}$, lo que resulta en un valor de $Ec = 0.1$, valor menor que el reportado en los ensayos de referencia.

En la Figura 4.59 se presenta un registro fotográfico del resultado de uno de los experimentos de Q10 y el resultado final del perfil adimensionado de la fosa asintótica. En la Figura 4.60 se muestra una representación simplificada del fenómeno simulado. Se muestran además los resultados de la simulación numérica: esquemas general jet (Figura 4.61 y Figura 4.62) y el perfil adimensionado de la fosa respecto a la erosión máxima (Figura 4.63). En este caso se utilizó el valor en el plano medio con un filtro de tres puntos. Se puede ver que cualitativamente el fenómeno es adecuadamente representado por el modelo. En este caso la fosa erosionada es más amplia que en los casos circulares, pero no es cuantitativamente comparable a la del experimento debido al diferente valor de Ec . A pesar de esto, si se toman en cuenta los resultados

experimentales de A&R podría pensarse que el modelo muestra los mismos sesgos expuestos anteriormente.

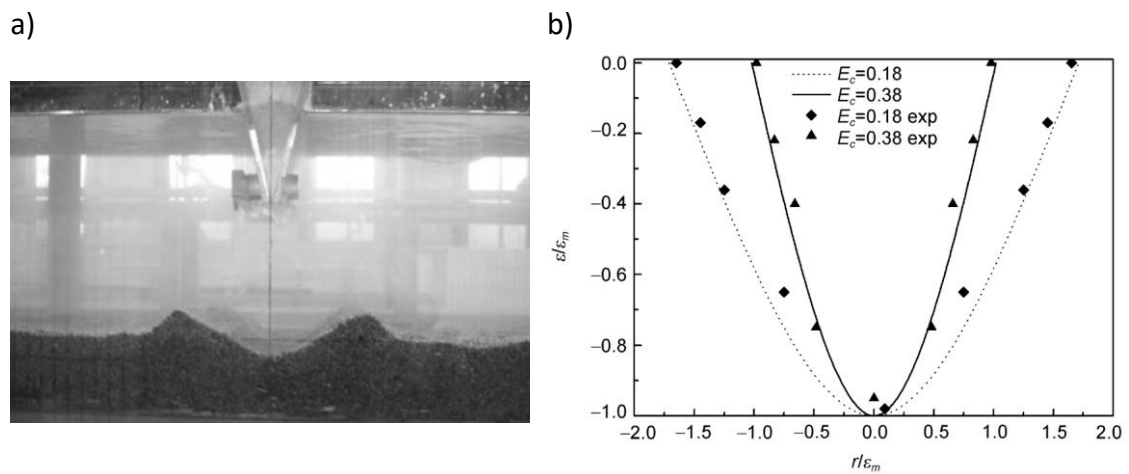


Figura 4.59: a) Registro fotográfico del experimento realizado por Q10. b) Perfil adimensional de la erosión respecto a la erosión máxima para diferentes valores de E_c . Valores experimentales. Figuras extraídas de Q10. Fosa plana.

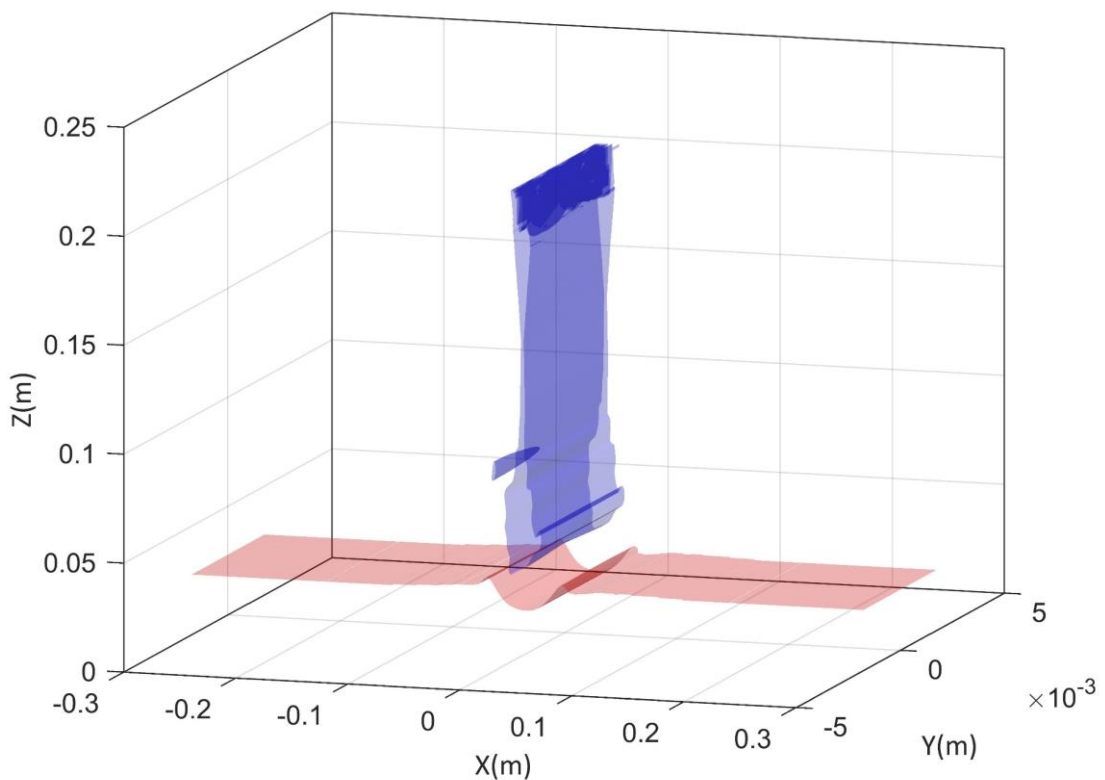


Figura 4.60 Representación esquemática del fenómeno de erosión para una simulación genérica mediante una isosuperficie de velocidad del chorro (azul) y otra de χ (rosa). Fosa plana.

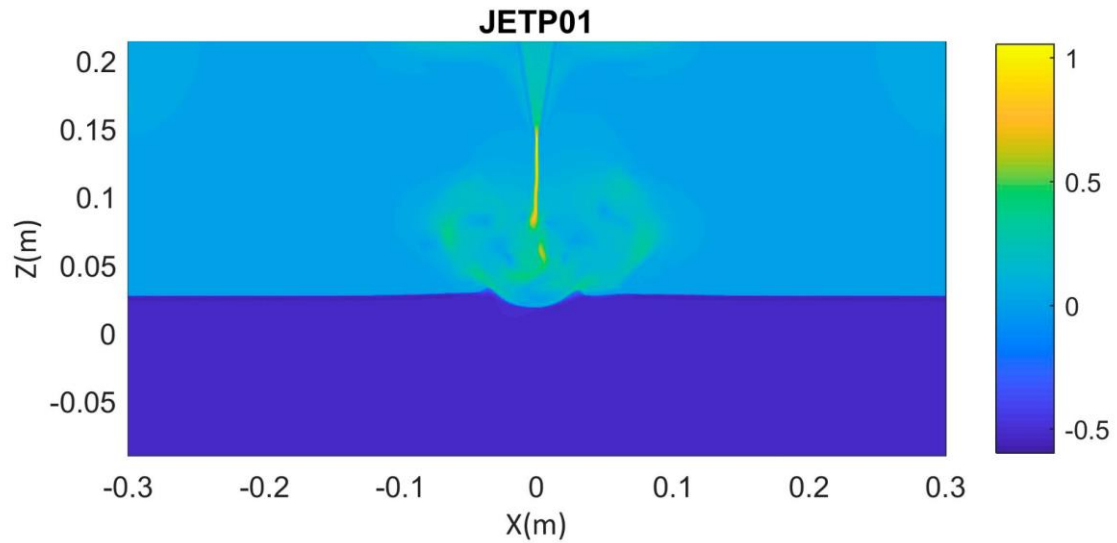


Figura 4.61: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JETP01. Esquema general JET. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Fosa plana.

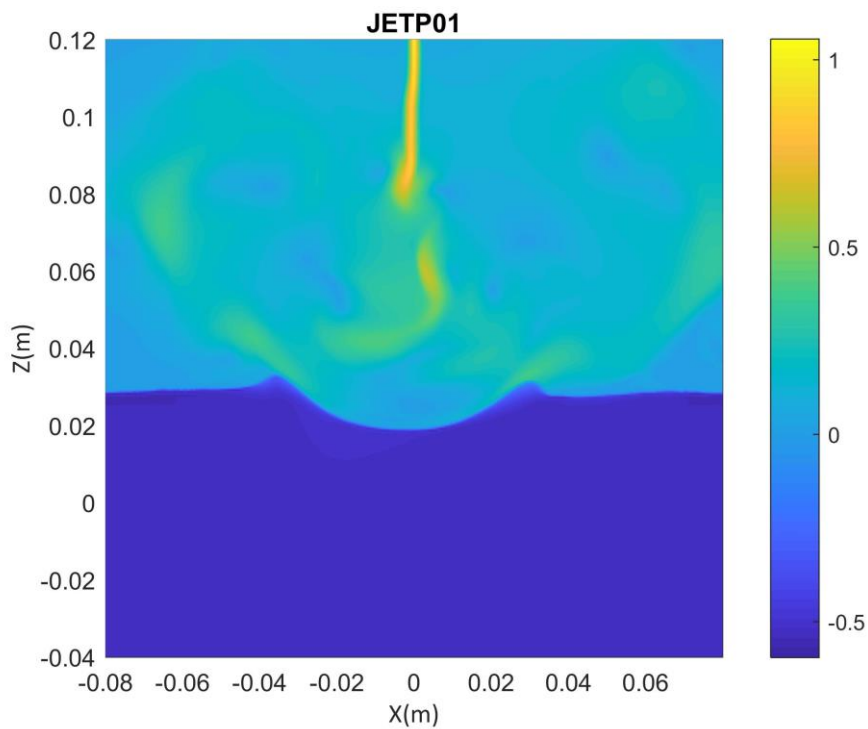


Figura 4.62: Isosuperficies de la diferencia entre el módulo de la velocidad y χ en la configuración asintótica para la simulación *caffa3d* JETP01. Zoom en la zona de la socavación. Los valores positivos corresponden al campo de velocidades relativo mientras que los valores negativos al campo $-\chi$. Esquema general JET. Fosa plana.

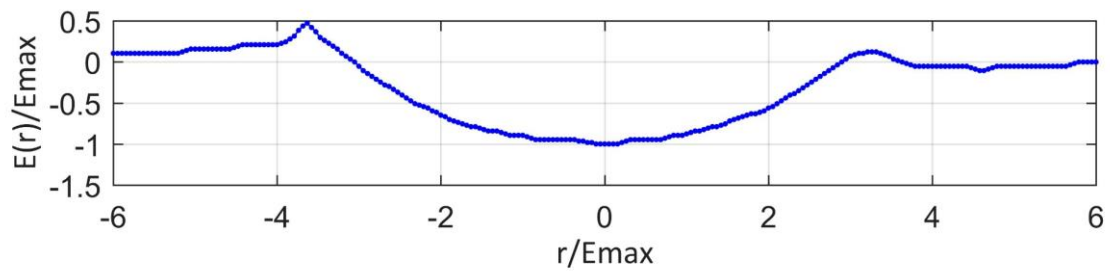


Figura 4.63: Perfil adimensionado de la erosión respecto a la erosión máxima, perfil medio en los planos verticales centrales curvas de nivel $\chi=0.52$ (límite del comportamiento sólido). Valores de las simulaciones *caffa3d*. Cada simulación es representada con un color diferente. Fosa plana.

En esta sección se buscó tener una primera aproximación a la reproducción de JET, circular y plano, y no se hizo por tanto un análisis de sensibilidad a las resoluciones espacial y temporal. Se tomaron en cuenta los análisis de sensibilidad antes analizados adoptando una malla de mayor resolución con un paso temporal similar. Sin embargo, como el proceso físico simulado es diferente es recomendable hacer un estudio de la malla y el paso temporal en los resultados a futuro.

5 RESUMEN DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Este trabajo de tesis tiene como objetivo central enriquecer las capacidades del código *caffa3d* de manera de mejorar su competencia para la resolución numérica del transporte de partículas inmersas en un flujo turbulento. Para esto se eligió un modelo euleriano de mezcla donde el movimiento de las partículas es analizado en su conjunto, incorporando su efecto por medio de una viscosidad efectiva que depende de las características locales de la fracción volumétrica de éstas. El modelo matemático fue presentado originalmente por L05.

En primera instancia se realizó la implementación del modelo de partículas elegido en el *caffa3d*, cuya validación fue realizada a posteriori mediante la simulación numérica de algunos casos seleccionados expuestos en algunos artículos científicos previos y que permitieron comparar los resultados con experimentos físicos (de laboratorio) o experimentos numéricos que emplean códigos con un modelo de partículas similar al elegido para este trabajo.

Para la implementación del modelo de partículas en el *caffa3d* se adaptaron los módulos ya disponibles que resuelven las ecuaciones de cantidad de movimiento e incompresibilidad del fluido para ser empleados en la resolución de las respectivas ecuaciones de la mezcla y se elaboró el módulo MFP: Modelo Fluido Partícula, que sirve para calcular la viscosidad efectiva μ_p (que toma en cuenta el efecto de las partículas) y la fracción volumétrica de volumen χ . El método de discretización de la ecuación de continuidad de χ está inspirado en métodos utilizados en VOF. En este módulo se calcula además la velocidad de las partículas, donde el rango de aplicabilidad del modelo es ampliado mediante la incorporación del coeficiente de Drag en el cálculo de la velocidad de sedimentación, mientras que la propuesta original es calculada tomando como hipótesis partículas en régimen de Stokes.

Se eligieron cuatro artículos como base para la validación de resultados: L06 que simula numéricamente con un modelo de mezcla similar al aquí planteado (pero en una implementación explícita) la rotura del talud de una presa; C16 donde se realizan ensayos de sedimentación en laboratorio; A&R que realiza una serie de pruebas de erosión sobre un lecho de arena generada por un chorro circular sumergido y Q10 que realiza experimentos numéricos y de laboratorio similares a los de A&R pero con un chorro plano.

La modelación del desmoronamiento del talud muestra la capacidad del modelo para reflejar el comportamiento constitutivo del lecho de partículas a través de la manifestación de una tensión de fluencia y un ángulo natural de talud infinito. Los resultados obtenidos numéricamente con el *caffa3d* son cualitativamente razonables mostrando un buen acordamiento con las simulaciones realizadas en L06. Se observa un

patrón común en el proceso de desmoronamiento del talud: luego de la fase inicial existe una etapa donde el flujo puede admitirse “cuasi-estacionario” en el que el deslizamiento tiene lugar de acuerdo al ángulo de fricción interna del material, tomando un ángulo menor a éste en la configuración final una vez que la energía cinética es disipada. (Observación que ha sido previamente reportada por otros autores).

La robustez de los resultados es verificada con un análisis de sensibilidad a la resolución espacial y temporal. Se analizó además la influencia del valor de ε , mostrando la independencia del valor original elegido y evidenciando inestabilidades para valores excesivamente pequeños de éste.

La simulación numérica de la decantación de arena en una columna de sedimentación es validada mediante la comparación con los resultados experimentales de C16 en cuanto a la determinación de los parámetros que caracterizan la segregación del lecho sólido. Si bien cualitativamente el proceso es muy similar la decantación simulada tiene un desarrollo de menor duración, hecho que puede ser atribuible al efecto coloidal de la mezcla agua-arcilla que no es considerada en la simulación realizada o a la influencia de algunos parámetros numéricos y físicos que pueden no resultar representativos de la muestra a los efectos de la modelación.

La independencia a la malla, al paso temporal, al valor de ε y al número de iteraciones externas del `caffa3d` fue verificada en este caso. Se analizó la incidencia de algunos parámetros a partir de lo cual se puede concluir que la modificación del valor umbral que define el comportamiento sólido del material (χ_{lm}) impacta sobre la altura del lecho de arena, y el tamaño de partículas en la velocidad en la que se desarrolla la decantación.

Se genera en la zona de la interface sólido – mezcla un máximo numérico de χ que es producto del aumento abrupto de la viscosidad modelada al pasar a un comportamiento no Newtoniano, mostrando además oscilaciones numéricas que son más apreciables al bajar la resolución. En este sentido se puede concluir que la aplicación de herramientas numéricas como el aumento del aporte `upwind` en la resolución de χ o la ponderación de la interpolación de la presión con μ_p son de utilidad para reducir el máximo y evitar las oscilaciones mostrando características similares del proceso físico sin la necesidad de recurrir a resoluciones más finas que requieran mayor tiempo de cómputo.

La compatibilidad del código modificado con el módulo de condiciones de borde inmersas es verificada mediante el estudio de la sedimentación de partículas sobre una esfera de arena, donde se aprecia un comportamiento esperable aunque solamente es analizado desde un punto de vista cualitativo.

Finalmente, la simulación numérica de chorros verticales sumergidos busca analizar el comportamiento del modelo numérico en una situación donde la velocidad del flujo tiene una interacción más importante con el lecho sólido con una participación de la turbulencia apreciable a diferencia de los otros ejemplos simulados. Estos experimentos

han sido los más desafiantes y relevantes a abordar desde el punto de vista de la ingeniería.

Diferentes experimentos numéricos fueron realizados variando el parámetro de erosión (E_c) utilizado en A&R y Q10, cuyos resultados permiten concluir que el modelo logra reproducir en forma satisfactoria el comportamiento observado en los experimentos físicos de estos autores. En particular, se reproduce en forma adecuada los diferentes regímenes del JET descritos por A&R (WDJR y SWJR). Para valores más bajos de E_c la socavación es pequeña y el chorro prácticamente se defleca 90° al impactar con el lecho de arena. A medida que el valor de E_c aumenta, la fosa socavada se torna cada vez más profunda hasta que la misma es generada por un patrón de flujo cuasi-vertical para los valores más altos de E_c . Las erosiones reproducidas por el *caffa3d* muestran sin embargo, fosas más estrechas respecto a los experimentos aunque con valores de máxima erosión razonables.

En todos los casos aquí representados se ha verificado la conservación de la masa de las partículas a lo largo de la simulación.

A partir del análisis expuesto se concluye que los objetivos propuestos han sido cumplidos satisfactoriamente, logrando la implementación de un modelo que con una única fase es capaz de representar tanto materiales puramente fluidos, como fluidos con material en suspensión (de mayor o menor concentración) hasta comportamiento sólido. La implementación en un modelo de volúmenes finitos que utiliza un esquema implícito de alta resolución para la discretización de las ecuaciones en conjunto con la parametrización de la turbulencia mediante un esquema LES es un aspecto novedoso de este trabajo, de acuerdo a la búsqueda bibliográfica realizada.

La comprensión del funcionamiento de algunos parámetros del modelo requiere aún un aprendizaje más profundo. Algunas preguntas quedan todavía, y por suerte, sin respuesta. Tal como se ha evidenciado a lo largo del análisis de todas las simulaciones la traducción de los parámetros que caracterizan al material particulado hacia los parámetros numéricos es un aspecto que debe ser profundizado, abriendo una puerta hacia una línea futura de investigación que da continuidad a este trabajo. En particular, la realización de una serie de experimentos en condiciones en las que se puedan determinar con más rigor las características del sedimento puede resultar de gran utilidad para dar luz sobre este aspecto. La extensión del modelo para ser utilizable con una muestra con tamaños heterogéneos de partículas, es también un punto que puede ampliar el espectro de aplicaciones.

El modelo resultado de esta tesis permite además de abrir nuevos horizontes para el *caffa3d* dar continuidad a algunas líneas de investigación del MFC que se han visto parcialmente interrumpidas. Ejemplo de ello es la contaminación atmosférica por partículas, donde los trabajos previos que se han abordado en el seno del grupo se han realizado mediante la simulación de escalar pasivo (hipótesis válida únicamente para

analizar la dispersión de la fracción de partículas más fina que puede considerarse con un comportamiento gaseoso); o mediante la utilización de técnicas lagrangeanas que por su tiempo de cálculo limitan su aplicación a casos de mezclas con baja concentración de partículas. Teniendo en cuenta la diferencia de densidades entre el aire y las partículas puede pronosticarse que la utilización del nuevo `caffa3d` para este tipo de aplicaciones resulta un gran desafío, de interés particular para quien suscribe este documento.

Otra línea de investigación del MFC cuyo desarrollo se ha visto truncado está asociada a la socavación local en torno a estructuras (pilas, estribos de puentes etc.). Los trabajos previos realizados consistieron en la evaluación de las condiciones de inicio de movimiento del sedimento del lecho mediante el estudio de la posición donde ocurre el inicio de movimiento, el campo de velocidades, el campo de tensiones de corte etc. sin tomar en cuenta la retroalimentación con la erosión generada. Con las capacidades agregadas al `caffa3d` se podrá dar continuidad a este trabajo desde un abordaje modelístico experimental.

Finalmente, y a modo de poder emprender simulaciones numéricas más costosas, se deberá migrar el modelo hacia plataformas más eficientes. El `caffa3d` utiliza para el cómputo una infraestructura basada en CPU (central processing unit), requiriendo una cantidad considerable de recursos computacionales. Sin embargo, la tendencia internacional en cuanto al uso de CFDs migran hacia las plataformas híbridas que agregan GPU (Graphics Processor Unit) para cálculos parciales. La incorporación de GPUs no solo logra una mayor capacidad de cómputo, sino que su utilización es más accesible ya que basta con computadoras adaptadas (de menor costo). Estas razones han motivado la migración del `caffa3d` hacia estas plataformas (Igounet et al. 2012), dando origen al modelo CFD-CHAMAN (Computación Heterogénea en Mecánica). Actualmente CHAMAN, contiene la traducción de las rutinas básicas del `caffa3d`. Pruebas preliminares que se han desarrollado en el seno del MFC muestran una mejora en la velocidad de al menos 30x, lo que potenciaría su utilización en un futuro cercano.

“ According to legend, a conversation that took place more than 70 years ago between Albert Einstein and his eldest son, Hans Albert Einstein, gives rise to the favorite anecdote of every scientist or engineer working in the field of sediment transport. During this conversation, Hans told his father of his intent to carry out research on the mechanics of sediment transport. Albert had done some work in this area, notably on hindered settling in sediment suspensions, and he advised his son not to pursue study in this field, as he felt sediment transport was so difficult that it was intractable. Like many good sons before him, Hans ignored this advice, and went on to be one of a handful of prominent scientists that shaped modern sediment-transport theory and practice.”

Jonathan Nelson
Geomorphology and Sediment Transport
Group, Water Resources Division National
Research Program, U.S.Geological Survey
Denver, Colo., USA

6 REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

Aderibigbe O. y N. Rajaratnam, 1996: Erosion of loose beds by submerged circular impinging vertical turbulent jets. *J. of Hydraulic Research*, 34 (1), 19-33.

Aderibigbe O. y N. Rajaratnam, 1998: Effect of sediment gradation on erosion by plane turbulent wall jet. *J. of Hydraulic engineering*, 124 (10), 1034-1042.

Allen, J. R. L., 1970: The avalanching of granular solids on dunes and similar slopes. *J. Geo.*, 78, 326-351.

Andrews M.J., P.J. O'Rourke, 1996: The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows, *Int. J. Multiphase Flow*, 22, 379-402.

Archie GE, 1942 The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics. *TransAmInst Mining Metall Engr*, 147, 54-62.

Armenio V. y V. Fiorotto, 2001: The importance of the forces acting on particles in turbulent flows. *Phys Fluids*, 13 (8), 2437-40.

Aydın M., E. Günaydinoğlu, M. Aydın y A. F. Miguel, 2014: Gas-Solid Suspension Flow near Walls: Particle Statistical Mechanics Model and Particle Force Balance Equation", *Defect and Diffusion Forum*, 348, 71-87.

Bagget J.S., J. Jimenez y A. G. Kravchenko, 1997: Resolution requirements in large eddy simulation of shear flows. *CTR Annual Research Briefs.*, 51-66.

Beltaos, S. y N. Rajaratnam, 1974: Impinging Circular Turbulent Jets, *J. of Hydraulic Division, ASCE*, 100 (10), 1313-1328.

Berg P., C. Roloff, Beuing, Voss, Sugiyama, Aristokleous, Anayiotos, Ashton, Revell, Bressloff, Brown, Chung, Cebal, Copelli, Fu, Qiao, Geers, Hodis, Dragomir-Daescu, Nordahl, Suzen, Owais Khan, Valen-Sendstad, Kono, Meng, Xiang,. Menon, Albal, Morales, Bonnefous, Osman, Goubergrits, Pallares, Cito, Passalacqua, Piskin, Pekkan, Ramalho, Marques, Sanchi, Sturgeon, Schumacher, Švihlová, Hron, Usera, Mendina, Steinman, Janiga, 2015: The Computational Fluid Dynamics Rupture Challenge 2013. Phase II, 2015: Variability of Hemodynamic Simulations in Two Intracranial Aneurysms. *J. of Biomechanical Engineering*, 137 (12), 121008.

Blocken, B. y J. Carmeliet, 2004: A review of wind-driven rain research in building science. *J. of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 92 (13), 1079-1130.

Bohorquez Rodríguez de Medina P., 2008: Estudio y simulación numérica del transporte de sedimentos en flujos con superficie libre. Tesis de doctorado de la Universidad de Málaga en el área de mecánica de los Fluidos.

Boehm M.T., D. E. Aylor, 2005: Lagrangian stochastic modeling of heavy particle transport in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment*, 39, 4841–4850.

Chauchat J., M. Médale, 2010: A three-dimensional numerical model for incompressible two-phase flow of a granular bed submitted to a laminar shearing flow. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 199, 439–449.

Cuthbertson A. J. S., O. Ibikunle, W. J. Mc Carter y G. Starrs ,2016: Monitoring and characterisation of sand-mud sedimentation processes. *Ocean Dynamics*, 66, 867–891.

Denner F. y G. M. Berened Van Wachem, 2014: Fully-coupled balanced-force VOR framework for arbitrary meshes with least-squares curvature evaluation for volume fractions. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 65, 218–255.

Dixen M. y S. B. Mutluy F. Jørgen, 2013: Numerical and experimental investigation of flow and scour around a half-buried sphere. *Coastal Engineering*, 73, 84-105.

Draper, M., A. Guggeri y G. Usera, 2016: Modelling one row of Horns Rev wind farm with the Actuator Line Model with coarse resolution. In *J. of Physics: Conference Series*, 753 (8), 082028. IOP Publishing.

Einstein, A., 1905: On the Motion of Small Particles Suspended in Liquids at Rest Required by the Molecular-Kinetic Theory of Heat. *Annalen der Physik*, 17, 549-560.

Fernández F., M. Mendina, N. Rezzano, M. D'Angelo y G. Usera, 2018: Numerical simulation of atmospheric pollutants dispersion in an urban environment. Tenth International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD10). Trabajo aceptado (Conferencia a realizarse en julio 2018).

Ferziger, J. y M. Peric, 2002: *Computational methods for fluid dynamic*. Springer. Berlin.

Ghaffari M., A. Vestvik, B. Balakin y A. C. Hoffmann, 2012: Deposition capabilities of turbulent particle-laden flow passing an obstacle using experiment and CFD. *AIP Conf. Proc.* 1479, 193–196.

Germano, U. Piomelli, P. Moin y W. H. Cabot, 1991: A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model, *Phys. Fluids A* 3, 1760-1765.

Gorb Y., O. Mierk, L. Rivkind y D.Kuzminb, 2014: Finite element simulation of three-dimensional particulate flows using mixture models. *J. of Computational and Applied Mathematics*, 270, 443–450.

Guggeri A., M. Draper y G. Usera, 2017: Simulation of a 7.7 MW onshore wind farm with the Actuator Line Model. In *J. of Physics: Conference Series*, 854 (1), 012018. IOP Publishing.

Hanson, G. J., 1990: Surface erodibility of earthen channels at high stresses part II – developing an in situ testing device. *Transactions of the ASAE*, 33(1), 132–137.

Hanson, G. J., y K. R. Cook, 2004: Apparatus, test procedures and analytical methods to measure soil erodibility in situ. *Engineering in Agriculture*, 20(4), 455-462.

Holmes N.S., L. Morawska, 2006: A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available. *Environ Monit Assess*, 185, 9587–9602.

Holmes, N.S., L. Morawska, K. Mengerser y E. R. Jayaratne, 2005: Spatial distribution of submicrometre particles and CO in an urban microscale environment. *Atmospheric Environment*, 39 (22), 3977–3988.

Igounet P., P. Alfaro, G. Usera y P. Ezzatti, 2012: Towards a Finite Volume model on a many-core platform. *International J. of High Performance Systems Architecture*, 4 (2), 78 – 88.

Jones W.P. y M. Wille, 1995: Large eddy simulation of a jet in a cross-flow. In *10th Symp. on Turbulent Shear Flows*, The Pennsylvania State University, 4, 1-6.

Karamigolbaghi M., S. M. Ghaneezada, J. F. Atkinsona, S. J. Bennettb y R. Wellsc, 2017: Critical assessment of jet erosion test methodologies for cohesive soil and sediment. *Geomorphology*, 295, 529–536.

Khosronejad A., C.Hill, S. Kang y F. Sotiropoulos, 2013: Computational and experimental investigation of scour past laboratory models of stream restoration rock structures. *Advances in Water Resources*, 54 , 191–207 .

Khosronejad A., J. L. Kozarek, M. L. Palmsten y F. Sotiropoulos, 2015: Numerical simulation of large dunes in meandering streams and rivers with in-stream rock structures. *Advances in Water Resources*, 81, 45–61.

Kleinstreuer C. y Zhang Z., 2009: An adjustable triple-bifurcation unit model for air-particle flow simulations in human tracheobronchial airways *J. of Biomechanical Engineering*, 131(2), 21007-21016.

Kosinski P., A. Kosinska y A.C. Hoffmann, 2009: Simulation of solid particles behaviour in a driven cavity flow. *Powder Technology*, 191, 327–339.

Krieger I., 1972: Rheology of monodisperse latices. *Advances in Colloid and Interface Science*, 3, 111-136.

Kuang S.B., C.Q. LaMarche, J.S. Curtis y A.B. Yu, 2013: Discrete particle simulation of jet-induced cratering of a granular bed. *Powder Technology*, 239, 319–336.

Kubilay A., D. Derome, B. Blocken y J. Carmeliet, 2014: Numerical modeling of turbulent dispersión for wind-driven rain on building facades. *Environ Fluid Mech* DOI 10.1007/s10652-014-9363-2.

Kunz R., I. Khatib y N. Moussiopoulos, 2000: Coupling of mesoscale and microscale models, an approach to simulate scale interaction. *Environmental Modeling and Software*, 15, 597-602.

Lai A.C.K., F. Chen, 2006: Modeling particle deposition and distribution in a chamber with a two-equation Reynolds-averaged Navier-Stokes model. *Journal of Aerosol Science*, 37 (12), 1770-1780

Lakehal, D., P. G. Mestayer, J. B. Edson, S. Anquetin y J. Sini, 1995: Euler-Lagrangian simulation of raindrop trajectories and impacts within the urban canopy. *Atmospheric Environment*, 29 (23), 3501-3517.

Lalli F. y A. Di Mascio, 1997: A numerical model for fluid-particle flows. *Int J. Offshore Polar Eng*, 7 (2), 89-93.

Lalli F., P. G. Esposito, R. Piscopia y R. Verzicco, 2005: Fluid-particle flow simulation by averaged continuous model. *Computers and Fluids*, 34, 1040-1061.

Lalli F., P.G. Esposito y R. Verzicco, 2006: A constitutive equation for fluid-particle flow simulation, *Int. J. Offshore Polar Eng.*, 16, 18–24.

Lehnhauser T. y M. Schäfer, 2003: Efficient discretization of pressure-correction equations on nonorthogonal grids. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 42, 211–231.

Leighton D. y A. Acrivos, 1987: Measurement of shear-induced self-diffusion in concentrated suspensions of spheres. *J. Fluid Mech*, 177, 109-131.

Leelőssy A., I. Lagzi, A. Kovács y R. Mészáros, 2018: A review of numerical models to predict the atmospheric dispersion of radionuclides. *Journal of Environmental Radioactivity*, 182, 20-33.

Liang L., X. Yu y F. Bombardelli, 2017: A general mixture model for sediment laden flows. *Advances in Water Resources*, 107, 108-125.

Liao C., Y. Chang, C. Lin y J.M. McDonough, 2010: Simulating flows with moving rigid boundary using immersed-boundary method. *Computers and Fluids*, 39, 152-167.

Lilek, Z., S. Muzaferija, M. Peric y V. Seidl, 1997: An implicit finitevolume method using non matching blocks of structured grid. *Numer.Heat Transf. Part B*, 32, 385–401.

Liou, K., Q. Fu, y T. Ackerman (1988): A simple formulation of the delta-four-stream approximation for radiative transfer parameterizations. *J. Atmos. Sci.*, 45, 1940-1947.

Liu, Y., T. Warner, Y. Liu, C. L. Vincent, W. Wu, B. Mahoney y J. Boehnert, 2011: Simultaneous nested modeling from the synoptic scale to the LES scale for wind energy applications. *J. of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 99(4), 308-319.

López B., G. Usera, G. Narancio, M. Mendina, M. Draper y J. Cataldo, 2015: Progress in Wall Turbulence 2. Understanding and Modelling, 23, 73-82. Capítulo de libro.

Lowndes I.S., S.A. Silvester, S.W. Kingman y D.M. Hargreaves, 2008: The application of an improved multi-scale computational modelling techniques to predict fugitive dust dispersion and deposition within and from surface mining operations. 12th U.S./North American Mine Ventilation Symposium 2008 – Wallace (ed) ISBN 978-0-615-20009-5, 359–366.

Luo Xiongping y Shiyi Chen, 2005: Transport of particles in an atmospheric turbulent boundary layer. *Acta Mech Sinica*, 21 (3), 235-242.

Maxey, M.R., 1987. The motion of small spherical particles in a cellular flow field. *Phys. Fluids*, 30, 1915–1928.

Mendina M. y G. Usera, 2012: Simulación numérica de flujos turbulentos en una cavidad forzada. Memorias del XXV Congreso Latinoamericano de Hidráulica 2012. Costa Rica.

Mendina M., M. Draper, A. P. Kelm, G. Narancio y G. Usera, 2014: A general purpose parallel block structured open source incompressible flow solver. *Cluster Computing*, 17 (2), 231 – 241.

Mercier F., S. Bonelli, P. Pinettes, F. Golay, F. Anselmet y P. Philippe, 2014: Comparison of CFD simulations with experimental Jet Erosion Tests results. *J. of hydraulic engineering, American Society of Civil Engineers*, 140 (5): 04014006, 1 – 11.

Moin P. y J. Kim. 1982: Numerical investigation of turbulent channel flow. *J. of Fluid Mechanics*, 118, 341–377.

Montazeri H., B. Blocken y J.L.M. Hensen, 2014: Evaporative cooling by water spray systems: CFD simulation, experimental validation and sensitivity analysis. *Building and Environment*, 83, 129-141.

Mora Acosta, J., 2001: Numerical algorithms for three dimensional computational fluid dynamic problems. Ph.D. Thesis. Universitat Politècnica de Catalunya, fecha de defensa 20/12/2001.

Nowak N, P.P. Kakade, A. V. Anapragada, 2003: Computational Fluid Dynamics Simulation of Airflow and Aerosol Deposition in Human Lungs. *Annals of Biomedical Engineering*, 31, 374–390.

Qian Z., H. ZiaoQuing, H.WenXin y X.WanYun,2010: Numerical simulation of sediment erosion by submerged jets using an Eulerian model. *Science China, Technological Sciences*, 53 (12), 3324-3330.

Pope, S. B., 2000: *Turbulent Flows*. Cambridge, UK: Cambridge University Press.

Raziyeh S. y Soltani Goharrizi Ataallah, 2014: CFD simulation of an industrial hydro cyclone with Eulerian–Eulerian approach: A case study. *International J. of Mining Science and Technology*, 24 (5), 643-648.

Ribberink JS y A. Al-Salem, 1995: Sheet flow and suspension of sand in oscillatory boundary layers. *Coastal Engineering*, 25, 205–225.

Rouse H., 1938: *Fluid Mechanics for Hydraulic*. McGraw-Hill .

Sassi P., J. Freiria, P. La Paz, M. Mendina, M. Draper y G. Usera, 2017: Coupled Discrete Element and Finite Volume Methods for simulating loaded elastic fishnets in interaction with fluid. *Computers and Fluids*, 156, 200 – 208.

Schaflinger U., A. Acrivos y K. Zhang, 1990: Viscous resuspension of a sediment within a laminar and stratified flow. *J. Multiphase Flow*, 16, 567-578.

Shu A. J. Wang , C. Fan , y S. Li, 2014: *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 53 (23), 9915-9924

Sidik N. A. C., S. M. R. Attarzadeh, 2011: An accurate numerical prediction of solid particle fluid flow in a lid-driven cavity. *International J. of Mechanics*, 3 (5), 123-128.

Smagorinsky J. ,1963: General circulation experiments with the primitive equations.: I. The basic experiment, *Mon. Weather Rev.*, 91 (3), 99-164.

Sleath JFA., 1984: *Sea bed mechanics*. New York: John Wiley & Sons; 1984.

Statham I., 1974: The relationship of porosity and angle of repose to mixture proportions in assemblages of different sized material. *Sedimentology*, 21, 149-162.

Stovern M., M. Felix, O. Csavina, J. Rine, K.P. Russell, M.R. Jones, R.M. King, M. Betterton y E.A. Sáez, 2015: Simulation of windblown dust transport from a mine tailings impoundment using a computational fluid dynamics model . *Aeolian Research*, 14, 75-83.

Stovern M., H. Guzmán, K. P. Rine, O. Félix, M. King, W. P. Ela, E. A. Betterton y A. E Sáez, 2016: Windblown Dust Deposition Forecasting and Spread of Contamination around Mine Tailings. *Atmosphere*, 7(2), 16.

Subramaniam S., 2013: Lagrangiane Eulerian methods for multiphase flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 39, 215-245.

Sullivan P.P, J.C. Mc Williams y C. Moeng, 1996: A grid nesting method for large-eddy simulation of planetary boundary-layer flows. *Boundary-Layer Meteorology*, 80 (1-2), 167-202.

Ubbink O., 1997: Numerical Prediction of two fluid systems with sharp interfaces. PhD Thesis, University of London

Ubbink O. y R. I. Issa 1999: A Method for Capturing Sharp Fluid Interfaces on Arbitrary Meshes *J. of Computational Physics*, 153, 26–50.

Ungarish M.,1993: *Hydrodynamics of suspensions – fundamentals of centrifugal and gravity separation*. Springer-Verlag.

Usera, G., A. Vernet, y J. A. Ferré, 2008: A parallel block-structured finite volume method for flows in complex geometry with sliding interfaces. *Flow, Turbulence and Combustion*, 81 (3), 471-495.

Usera, G. a), M. Mendina y R. Terra, 2010: m-CAFFA3D.MB : simulación numérica microclimática. *Memorias del XXIV Congreso Latinoamericano de Hidráulica*. Uruguay.

Usera, G. b), Chreties C., M. Mendina, G. Simarro y L. Teixeira, 2010: Avances en la modelación numérica del fenómeno de socavación local en pilas. *Memorias del XXIV Congreso Latinoamericano de Hidráulica*. Uruguay.

Wang Q. y K. D. Squires, 1996: Large eddy simulation of particle deposition in a vertical turbulent channel flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 22 (4), 667-683.

Wahl T., 2016: The submerged jet erosion test: past-present-future. *International Symposium on the Mechanics of Internal Erosion for Dams and Levees*.

Yamada, T., 2006: Numerical simulations of urban heat islands and transport and dispersion of airborne materials around building clusters. *86th AMS Annual Meeting*. Code 79041.

Yamada, T. y Koike K., 2011: Downscaling mesoscale meteorological models for wind engineering applications. *J. of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 99 (4), 199-216.

Zajczkowski F.J., S.E. Haupt y K. J. Schmehl, 2011: A preliminary study of assimilating numerical weather prediction data into computational fluid dynamics models for wind prediction. *J. of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 99, 320-329.

Zhang D.Z. y A. Prosperetti, 1994. Averaged equations for inviscid disperse two phase flows. *J. Fluid Mechanics*, 267, 185–219.

Zhang H. y G. Ahmadi, 2000: Aerosol particle transport and deposition in vertical and horizontal turbulent duct flows. *J. Fluid Mechanics*, 406, 55-80.

Zhang K. y A. Acrivos, 1994: Viscous resuspension in fully developed laminar pipe flows. *Int. J. Multiphase Flow*, 20, 579-591.

Zhang Z., C. Kleinstreuer y C.S.Kim, 2009: Comparison of analytical and CFD models with regard to micronparticle deposition in a human 16 generation tracheobronchial airway model. *Aerosol Science*, 40, 16-28.

Zhao B., Y. Zhang, X. T. Li, X.D. Yang y D.T. Huang, 2004: Comparison of indoor aerosol particle concentration and deposition in different ventilated rooms by numerical method. *Building and Environment*, 39, 1-8.