

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL



DOCTORADO EN INGENIERÍA

Resolución Computacional de Flujos Multifásicos Granulares por Métodos Eulerianos

César Martín Venier

FICH

FACULTAD DE INGENIERÍA Y CIENCIAS HÍDRICAS

INTEC

INSTITUTO DE DESARROLLO TECNOLÓGICO PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA

CIMEC

CENTRO DE INVESTIGACIÓN DE MÉTODOS COMPUTACIONALES

sinc(i)

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN SEÑALES, SISTEMAS E INTELIGENCIA COMPUTACIONAL



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

**RESOLUCIÓN COMPUTACIONAL
DE FLUJOS MULTIFÁSICOS GRANULARES
POR MÉTODOS EULERIANOS**

César Martín Venier

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado

como parte de los requisitos para la obtención

del grado de

DOCTOR EN INGENIERIA

Mención Mecánica Computacional

de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2018



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

**RESOLUCIÓN COMPUTACIONAL
DE FLUJOS MULTIFÁSICOS GRANULARES
POR MÉTODOS EULERIANOS**

César Martín Venier

Lugar de trabajo:

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Universidad Nacional del Litoral

Director:

Dr. Norberto M. Nigro

CIMEC (CONICET-UNL) / FICH - UNL

Codirector:

Dr. Santiago Márquez Damián

CIMEC (CONICET-UNL) / FRFSF - UTN

Jurado Evaluador:

Dr. Germán D. Mazza

PROBIEN (CONICET-UNCo)

Dr. Gustavo C. Buscaglia

ICMC - USP (Brasil)

Dr. Mariano I. Cantero

CNEA - CAB / CONICET

Dr. Eduardo E. Miro

INCAPE (CONICET-UNL) / FIQ - UNL

2018



ACTA DE EVALUACIÓN DE TESIS DE DOCTORADO

En la sede de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas de la Universidad Nacional del Litoral, a los veintiseis días del mes de marzo del año dos mil dieciocho, se reúnen los miembros del Jurado designado para la evaluación de la Tesis de Doctorado en Ingeniería titulada *“Resolución computacional de flujos multifásicos granulares por métodos Eulerianos”*, desarrollada por el Mag. César Martín VENIER, DNI N.º 32.735.084 . Ellos son: Dr. Germán Mazza, Dr. Gustavo Buscaglia, Dr. Mariano Cantero y Dr. Eduardo Miró.

Luego de escuchar la Defensa Pública y de evaluar la Tesis, el Jurado resuelve:

Aprobar la Tesis Doctoral presentada con calificación Sobresaliente (10). La tesis conjuga elementos que incluyen mecánica de sólidos, teoría cinética y mecánica de fluidos con un remarcable esfuerzo para generar herramientas de simulación de considerable versatilidad. El documento está presentado en forma clara y precisa, evidenciando el doctorando un sólido conocimiento en la temática. La exposición fue clara y ordenada, llevada a cabo con total solvencia y ajustada al tiempo previsto.

Sin más, se da por finalizado el Acto Académico con la firma de los miembros del Jurado al pie de la presente.

[Signature]
.....
Dr. Germán Mazza

.....
Dr. Mariano Cantero (*)

[Signature]
.....
Dr. Gustavo Buscaglia

[Signature]
.....
Dr. Eduardo Miró

() El Dr. Mariano Cantero participó por videoconferencia.*

[Signature]
Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARIO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas

Universidad Nacional del Litoral
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria
C.C. 217
Ruta Nacional Nº 168 - Km. 472,4
(3000) Santa Fe
Tel: (54) (0342) 4575 229
Fax: (54) (0342) 4575 224
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Santa Fe, 26 de marzo de 2018.

Como miembros del Jurado Evaluador de la Tesis de Doctorado en Ingeniería titulada *“Resolución computacional de flujos multifásicos granulares por métodos Eulerianos”*, desarrollada por el Mag. César Martín VENIER en el marco de la Mención “Mecánica Computacional”, certificamos que hemos evaluado la Tesis y recomendamos que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería.

La aprobación final de esta disertación estará condicionada a la presentación de dos copias encuadernadas de la versión final de la Tesis ante el Comité Académico del Doctorado en Ingeniería.

.....
Dr. Germán Mazza

.....
Dr. Gustavo Buscaglia

.....
Dr. Eduardo Miró

.....
Dr. Mariano Cantero (*)

(*) El Dr. Mariano Cantero participó por videoconferencia

Dr. JOSE LUIS MACOR
SECRETARIO DE POSGRADO
Ingeniería y Ciencias Hídricas

Santa Fe, 26 de marzo de 2018

Certifico haber leído la Tesis, preparada bajo mi dirección en el marco de la Mención “Mecánica Computacional” y recomiendo que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería.

.....
Dr. Santiago Márquez Damián
Codirector de Tesis

.....
Dr. Norberto Nigro
Director de Tesis

Universidad Nacional del
Litoral
Facultad de Ingeniería y
Ciencias Hídricas

Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria
C.C. 217
Ruta Nacional Nº 168 - Km. 472,4
(3000) Santa Fe
Tel: (54) (0342) 4575 229
Fax: (54) (0342) 4575 224
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar

Declaración Legal del Autor

Esta Tesis ha sido remitida como parte de los requisitos para la obtención del grado de *Doctor en Ingeniería - Mención Mecánica Computacional* ante la *Universidad Nacional del Litoral* y ha sido depositada en la Biblioteca de la *Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas* para que esté disponible a sus lectores bajo las condiciones estipuladas por el Reglamento de la mencionada Biblioteca.

Citaciones breves de esta disertación son permitidas sin la necesidad de un permiso especial, en la suposición de que la fuente sea correctamente citada. Solicitudes de permiso para una citación extendida o para la reproducción de este manuscrito en un todo o en parte serán exigidas por el portador legal del derecho de propiedad intelectual de la misma.

César M. Venier

© Copyright by
César M. Venier
2018

*Dedicado a Fer,
a Mamá y a Papá*

Agradecimientos

Esta tesis ha recibido apoyo económico del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Universidad Nacional del Litoral (UNL), Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT) y de la Universidad Tecnológica Nacional (UTN). Las investigaciones han sido realizadas en el Centro de Investigación de Métodos Computacionales dependiente de la UNL y CONICET.

Se agradece especialmente a mis directores, el Dr. Norberto Nigro y el Dr. Santiago Márquez Damián, por todas sus enseñanzas y guías constantes a lo largo de los años. Considero que el tiempo que he compartido bajo la tutela de ellos, ha contribuido a mi formación, tanto profesional como humana, en el ambiente científico. Finalmente agradezco a mis compañeros del CIMEC, por la calidez y amistad que me han brindado en todos estos años.

También agradezco a la comunidad de Software Libre y particularmente a OpenFOAM®, ubuntu, octave, gnuplot y LaTeX los cuales han sido herramientas fundamentales en la realización de este trabajo.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación y antecedentes	1
1.2. Objetivos	5
1.3. Estructura de la tesis	6
1.4. Aportes científicos	7
1.4.1. Publicaciones en revistas indexadas	7
1.4.2. Publicaciones en revistas no-indexadas	8
1.4.3. Presentaciones en congresos	8
2. Modelo Euler-Euler para flujos granulares	11
2.1. El Modelo de Dos Fluidos (TFM)	12
2.1.1. Ecuaciones de balance en escala local	13
2.1.2. Técnicas de promediado	15
2.1.3. Función indicadora de fase e identidades entre promedios	17
2.1.4. Ecuaciones de balance promediadas	18
2.1.5. Descomposición de Reynolds y formulación de Dos Fluidos	20
2.2. Leyes de transferencia: Fuerza de arrastre	22
2.3. Leyes constitutivas: El tensor de tensiones	26
2.4. Teoría Cinética de Flujo Granular (KTGF)	28
2.4.1. Distribución de partículas y la Ecuación de Boltzmann	29
2.4.2. La Ecuación de Enskog	31
2.4.3. La Ecuación de Energía Granular	35
2.5. Teoría Friccional (FT)	37

2.5.1.	El tensor de tensiones para régimen friccional	38
2.5.2.	Condición de fluencia de von Mises aplicada a materiales granulares . . .	39
2.5.3.	Teoría de Plasticidad aplicada a materiales granulares	44
2.5.4.	Teoría de Estado Crítico	45
2.5.5.	Leyes constitutivas para estados friccionales	49
2.6.	Formulación cerrada para sistemas de gas y partículas	52
3.	El Método de Volúmenes Finitos para flujos de gas y partículas	53
3.1.	Discretización por el Método de Volúmenes Finitos	54
3.2.	Métodos segregados de acoplamiento presión-velocidad	56
3.2.1.	Algoritmo SIMPLE y derivados	59
3.2.2.	Algoritmo PISO	61
3.2.3.	Métodos combinados: El algoritmo PIMPLE	62
3.3.	Resolución del Modelo gas-partículas mediante FVM	62
3.3.1.	Ecuaciones de momento de cada fase	63
3.3.2.	Ecuaciones de continuidad de cada fase	66
3.3.3.	Ecuación de energía granular	68
3.3.4.	Ecuación de presión discreta	70
3.3.5.	Algoritmo de resolución del modelo completo	72
4.	Conservatividad de las formulaciones del modelo gas-partículas	75
4.1.	Conservatividad para la ecuación de Bürgers	76
4.2.	Formulación de las ecuaciones de momento	77
4.2.1.	Formulación conservativa	77
4.2.2.	Formulación no-conservativa	79
4.2.3.	Formulación fase-intensiva	79
4.2.4.	Cuantificación de las diferencias	80
4.3.	Tratamiento ante la desaparición de una fase	81
4.4.	Validación en casos prácticos	83
4.4.1.	Problema de Dam Break para ecuaciones de Shallow Water	83
4.4.2.	Problema de inestabilidad de Rayleigh-Taylor	86
4.4.3.	Crecimiento de una burbuja en un lecho fluidizado de partículas	89

4.4.4.	Lecho de partículas uniformemente fluidizado	92
4.5.	Análisis de los resultados	96
5.	Conservatividad de las formulaciones del modelo gas-partículas	99
5.1.	Análisis de estabilidad por el método de Fourier	100
5.2.	Estabilidad del esquema PISO en 1D	108
5.2.1.	Influencia del número de correctores PISO	109
5.2.2.	Influencia del número de Courant	110
5.2.3.	Influencia del número de Reynolds de malla	112
5.2.4.	Estabilidad en un problema estacionario	113
5.3.	Estabilidad del esquema PISO en 2D	117
5.3.1.	Flujo diagonal en malla uniforme	117
5.3.2.	Influencia de la orientación de la malla	120
5.3.3.	Influencia de la relación de aspecto de la malla	126
5.4.	Análisis de los resultados	130
6.	Conservatividad de las formulaciones del modelo gas-partículas	131
6.1.	Motivación del problema	132
6.2.	Métodos de acoplamiento de velocidad entre fases por arrastre	135
6.3.	Estabilidad del método PIMPLE	141
6.3.1.	Método de Fourier para el Método Implícito por Fase (PIM)	143
6.3.2.	Método de Fourier para el Algoritmo de Eliminación Parcial (PEA)	144
6.4.	Análisis de los resultados	148
7.	Aplicaciones del modelo computacional	151
7.1.	Sedimentación de partículas unidimensional	153
7.2.	Crecimiento de una burbuja en un lecho de partículas	156
7.2.1.	Modelos Cinético-Colisionales (KTGF)	161
7.2.2.	Modelos Friccionales (FT)	161
7.3.	Lecho de partículas uniformemente fluidizado	163
7.3.1.	Modelos de arrastre	167
7.3.2.	Condiciones de pared para la fase sólida	169

7.4. Análisis de los resultados	172
8. Conclusiones	175
Apéndice A: Modelos de la Teoría Cinética de Flujo Granular	179
Apéndice B: Inestabilidades tipo “checkerboard” y la correccion de Rhie-Chow	183
Apéndice C: Amplificación del error en un problema con condiciones de borde	187
Apéndice D: Condiciones de pared para la fase granular en lechos fluidizados	191
Bibliografía	195

Índice de figuras

1.1. Técnicas de modelización para flujos granulares	3
2.1. Volumen de control con 2 fases y una interfaz móvil	12
2.2. Coeficiente de arrastre para distintos modelos en condiciones típicas de fluidización	25
2.3. Esquema de los distintos tipos de regímenes granulares	27
2.4. Modos de disipación de energía en presencia de un medio granular	30
2.5. Cubo elemental sometido a un estado de tensiones bidimensional	39
2.6. Cubo elemental sometido a tensiones y planos principales	40
2.7. Ángulo de reposo o fricción interna	41
2.8. Circulo de Mohr-Coulomb en el plano S-N	41
2.9. Dominio de deformación elástica en 2D	42
2.10. Dominio de deformación elástica en 3D	43
2.11. Experimento de deformación de material granular por cizallamiento	45
2.12. Diagrama de tensiones para distintas densidades de partículas en <i>dilatación</i> y su curva de falla.	46
2.13. Diagrama de tensiones para distintas densidades de partículas en <i>consolidación</i> y su curva de falla	47
2.14. Diagrama de tensiones y estado crítico	48
2.15. Diagrama de falla para distintas densidades en el plano τ - $\langle \sigma \rangle$	48
2.16. Diagrama de falla para distintas densidades en el plano σ_1 - σ_3	49
3.1. Esquema 2D de discretización: (a) Volumen de control continuo, (b) Discretización del dominio en celdas, (c) Celda aislada donde se realiza un balance integral discreto.	54

4.1. Nivel de líquido y velocidad en $t = 2$ s para las diferentes formulaciones	84
4.2. Evolución de la interfase en el problema de Rayleigh-Taylor	87
4.3. Crecimiento de la amplitud de la interfase simulada respecto a la predicción lineal	88
4.4. Líneas de contorno ($\alpha_g = 0,5$) para diferentes refinamientos de malla y formulaciones en $t = 1,5$ s	88
4.5. Amplitud de la interfase para diferentes formulaciones y refinamiento de malla	89
4.6. Esquema del problema de crecimiento de burbuja en lecho fluidizado	90
4.7. Evolución transitoria del crecimiento de una burbuja en un lecho fluidizado . .	90
4.8. Forma de la burbuja en $t = 0,22$ s para (a) la <i>forma conservativa</i> , (b) la <i>forma</i> <i>no-conservativa</i> y (c) la <i>forma fase-intensiva</i>	92
4.9. Esquema de lecho fluidizado burbujeante	94
4.10. Fracción α media en $y = 0,16$ m para diferentes formulaciones	94
4.11. Velocidad vertical de partículas media en $y = 0,16$ m	95
4.12. Fracción α media sobre el eje vertical para diferentes formulaciones	95
5.1. Molécula de celdas para una discretización uniforme 2D por FVM	100
5.2. Factor de amplificación para $Co = 1$, $Re = 1$ y diferentes valores de n_P	109
5.3. Factor de amplificación para $Re = 1$, $n_P = 2$ y diferentes números de Courant .	110
5.4. Factor de amplificación para diferentes valores de Reynolds de malla para $n_P = 2$ (izquierda) y $n_P = 3$ (derecha)	112
5.5. Factores de amplificación para PISO, SIMPLER y SIMPLEC	114
5.6. Convergencia de los algoritmos PISO y SIMPLE para solución del estado estacionario.	116
5.7. Factor de amplificación para un problema bidimensional para $Re = 1$, $Co = 1$ y $n_P = 2$	118
5.8. Factor de amplificación para números de Reynolds de malla altos y bajos: $Re = 10^{-3}$ (izquierda) y $Re = 10^3$ (derecha)	119
5.9. Factor de amplificación para $n_P = 2$: (a) $Re = 10^{-3}$ y $Co = 0,1$, (b) $Re = 10^3$ y $Co = 0,1$, (c) $Re = 10^{-3}$ y $Co = 0,5$, (d) $Re = 10^3$ y $Co = 0,5$, (e) $Re = 10^{-3}$ y $Co = 1$ y (f) $Re = 10^3$ y $Co = 1$	121

5.10. Factor de amplificación para $Co = 0,5$: (a) $Re = 10^{-3}$ y $n_P = 2$, (b) $Re = 10^3$ y $n_P = 2$, (c) $Re = 10^{-3}$ y $n_P = 3$, (d) $Re = 10^3$ y $n_P = 3$, (e) $Re = 10^{-3}$ y $n_P = 4$ y (f) $Re = 10^3$ y $n_P = 4$	122
5.11. Factor de amplificación para $Re = 1$, $n_P = 2$ y: (a) PISO with $Co = 0,5$, (b) SIMPLE with $\omega = 0,33$, (c) PISO with $Co = 1$, (d) SIMPLE with $\omega = 0,75$, (e) PISO with $Co = 2$ y (f) SIMPLE with $\omega = 0,86$	123
5.12. Diferentes orientaciones de malla con respecto al flujo: Un flujo diagonal a la malla (línea de trazo) y un flujo alineado con la malla (línea continua).	124
5.13. Factor de amplificación para $Co_x = 0,5$ y $n_P = 2$ con a) $Re_x = 10^{-3}$ y VR = 1, b) $Re_x = 10^{-3}$ y VR = 0, c) $Re_x = 10^3$ y VR = 1 y d) $Re_x = 10^3$ y VR = 0	125
5.14. Diferentes relaciones de aspecto de malla: Una malla con refinamiento uniforme en cada dirección (línea de trazo) y una malla con diferente refinamiento en cada dirección (línea continua).	126
5.15. Factor de amplificación para $Co_x = 0,5$ y $n_P = 2$ con a) $Re_x = 10^{-3}$ y AR= 0,1, b) $Re_x = 10^{-3}$ y AR= 10, c) $Re_x = 10^3$ y AR= 0,1, y d) $Re_x = 10^3$ y AR= 10	127
5.16. Factor de amplificación para $Co_x = 0,5$, $Re_x = 10^{-3}$ y AR= 0,2 con $n_P = 2$ (izquierda) y $n_P = 6$ (derecha)	128
5.17. Amplification factors for $Re_x = 1$, $\theta_y = 0$ and for different values of AR and θ_x with $n_P = 2$ (left) and $n_P = 10$ (right)	128
5.18. Factores de amplificación para $\theta_x = \pi/2$, $\theta_y = 0$ y para: (a) $n_P = 2$, (b) $n_P = 10$, (c) $n_P = 20$ y (d) $n_P = 30$	129
6.1. Tasa de convergencia del campo de velocidades de la fase gas para los métodos PIM y PEA y $d_P = 350\mu\text{m}$	132
6.2. Tasa de convergencia del campo de velocidades de la fase gas para los métodos PIM y PEA y $d_P = 35\mu\text{m}$	134
6.3. Tasa de convergencia del campo de velocidades de la fase gas para los métodos PIM y PEA y $d_P = 3,5\mu\text{m}$	134
6.4. Factor de amplificación para métodos de acople por arrastre a dos fases en el modelo simplificado: (a) FET, (b) PIM y (c) PEA	140

6.5. Amplificación $p - u_1 - u_2$ por los métodos IPSA (con $\omega = 0,7$ y $\omega_p = 0,3$) y PIMPLE ($n_P = 2$) y PIM y PEA entre velocidades: $\alpha = 0,1$, $C_f = 1000$, $\rho_1/\rho_2 = 1000$	146
6.6. Amplificación $p - u_1 - u_2$ por los métodos IPSA (con $\omega = 0,7$ y $\omega_p = 0,3$) y PIMPLE ($n_P = 2$) y PIM y PEA entre velocidades: $\alpha = 0,5$, $C_f = 1000$, $\rho_1/\rho_2 = 1000$	146
6.7. Amplificación para acople $p - u_1 - u_2$ por el método PIMPLE-PIM con diferentes coeficientes de arrastre C_f : $\alpha = 0,1$, $\rho_1/\rho_2 = 1000$	147
6.8. Amplificación para acople $p - u_1 - u_2$ por el método PIMPLE-PEA con diferentes coeficientes de arrastre C_f : $\alpha = 0,1$, $\rho_1/\rho_2 = 1000$	148
7.1. Regímenes de fluidización en lechos fluidizados	152
7.2. Mapa de clasificación Geldart	152
7.3. (a) Mezcla uniforme de gas y partículas, (b) Estado transitorio de sedimentación con una zona de gas puro en la parte superior y una zona de sólidos empaquetados en la zona inferior, (c) Estado final de sedimentación con ambas fases completamente segregadas.	154
7.4. Distribución de sólidos a lo largo del tubo para (a) $t = 0,1$ s, (b) $t = 0,15$ s y (c) $t = 0,3$ s,	155
7.5. Predicción numérica y analítica de los perfiles de fracción de volumen mediante el uso de distintos modelos friccionales.	156
7.6. Esquema de crecimiento de una burbuja en un lecho fluidizado	157
7.7. Secuencia de crecimiento de la burbuja	157
7.8. Líneas de contorno de fracción de volumen promedio: Resultados experimentales de Kuipers <i>et al.</i> (izquierda) y resultados de la simulación (derecha)	159
7.9. Crecimiento de una burbuja para diferentes tamaños de malla en $t = 0,1$ s. (a) 8x, (b) 4x, (c) 2x, (d) 1x y (e) líneas de contorno para $\alpha_s = 0,2$	160
7.10. Crecimiento de una burbuja para diferentes tamaños de malla en $t = 0,2$ s. (a) 8x, (b) 4x, (c) 2x, (d) 1x y (e) líneas de contorno para $\alpha_s = 0,2$	160
7.11. Tiempo de desprendimiento de una burbuja para diferentes modelos KTGF Modelo de (a) Syamlal, (b) Gidaspow y (c) Hrenya-Sinclair	161

7.12. Crecimiento de una burbuja en diferentes instantes y bajo diferentes modelos friccionales: (a) Modelo I, (b) Modelo II, (c) Modelo III and (d) Modelo IV . . .	162
7.13. Esquema de lecho fluidizado burbujeante	163
7.14. Secuencia de fluidización	164
7.15. Velocidad de sólidos vertical promedio para diferentes refinamientos de malla en 0,3m desde la base	165
7.16. Vectores velocidad de sólidos promedio en el tiempo	166
7.17. Perfil de velocidad de sólidos promedio para diferentes condiciones de pared en (a) 0,1m y (b) 0,3m desde la base	166
7.18. Velocidad vertical de sólidos promedio (a) y fracción de sólidos (b) en 0,3m y velocidad vertical de sólidos promedio (c) y fracción de sólidos (d) en 0,1m para distintos modelos de arrastre.	168
7.19. Perfiles verticales de fracción sólida (a) y presión (b) promedio para distintos modelos de arrastre.	169
7.20. Velocidad vertical de sólidos promedio para: (a) $U_{IN} = 1,5 U_f$ en 0,1m, (b) $U_{IN} = 1,5 U_f$ en 0,3m, (c) $U_{IN} = 2,5 U_f$ en 0,1m, (d) $U_{IN} = 2,5 U_f$ en 0,3m, (e) $U_{IN} = 3,5 U_f$ en 0,1m, (f) $U_{IN} = 3,5 U_f$ en 0,3m	170
7.21. Velocidad vertical de sólidos promedio para diferentes condiciones de pared en (a)0,1m y (b) 0,3m desde la base con el modelo de arrastre de Di Felice ajustado	171
9.1. Esquema de flujo Couette	187
9.2. Amplificación de errores de presión en casos con condiciones de borde cíclicas (izquierda) y condiciones de borde de pared (derecha) para el Caso 1, antes (línea de trazo) y después (línea continua) de una iteración	188
9.3. Amplificación de errores de presión en casos con condiciones de borde cíclicas (izquierda) y condiciones de borde de pared (derecha) para el Caso 2, antes (línea de trazo) y después (línea continua) de una iteración	189
9.4. Amplificación de errores de presión en casos con condiciones de borde cíclicas (izquierda) y condiciones de borde de pared (derecha) para el Caso 3, antes (línea de trazo) y después (línea continua) de una iteración	189

9.5. Amplificación de errores de presión en casos con condiciones de borde cíclicas (izquierda) y condiciones de borde de pared (derecha) para el Caso 4, antes (línea de trazo) y después (línea continua) de una iteración 190

Índice de tablas

4.1. Modelos y parámetros involucrados	91
4.2. Tiempo de desprendimiento para distintas mallas y distintas formulaciones . . .	92
4.3. Parámetros generales para el problema de lecho fluidizado	93
7.1. Parámetros numéricos correspondientes al experimento de Kuipers <i>et al.</i> . . .	158
7.2. Tiempo de desprendimiento de una burbuja para diferentes modelos friccionales	163
7.3. Parámetros numéricos correspondientes al experimento de Laverman <i>et al.</i> . . .	164
7.4. Predicciones de velocidad mínima de fluidización	167
9.1. Casos a analizar	188

Resumen

En ésta tesis se presenta un estudio exhaustivo del Modelo de Dos Fluidos con asistencia de la Teoría Cinética-Friccional para flujos granulares implementado en el marco del Método de Volúmenes Finitos. En particular, se hace énfasis en el acoplamiento de las variables por medio de las fuerzas interfaciales, la restricción de incompresibilidad, la conservación de masa de cada fase y las teorías de cierre reológicas para la fase granular. Asimismo, se realiza un estudio comparativo de formulaciones con distintos grados de conservatividad de los términos de advección en ambas ecuaciones de balance de momento lineal, donde se busca determinar cuáles resultan más adecuadas para cada condición de flujo. Por otra parte, se propone una metodología para determinar rangos de estabilidad numérica de los algoritmos segregados, con la finalidad de extenderla al estudio de acoplamiento entre fases. Los resultados de este análisis son de gran valor para determinar los parámetros que rigen las tasas de convergencia de los modelos multifásicos, en pos de minimizar los elevados costos computacionales normalmente involucrados. Finalmente, con la implementación optimizada sobre la estructura general de la suite OpenFOAM[®], se evalúa el desempeño de los modelos físicos de mayor influencia en la hidrodinámica de los lechos fluidizados en distintas condiciones de fluidización. En particular, se estudia una gran variedad de modelos para los coeficientes de arrastre (drag), parámetros reológicos de Teoría Cinética y Friccional, y condiciones de borde mixtas para la fase particulada sobre las paredes del lecho. Teniendo en cuenta todos estos aspectos, la presente tesis busca sentar bases sólidas para el estudio de problemas multifásicos con presencia de una fase granular por métodos Eulerianos y así, formar criterios en términos de estabilidad, conservatividad y convergencia del modelo ante distintas condiciones físicas y numéricas del problema.

“In questions of science, the authority of a thousand is not worth the humble reasoning of a single individual.”

– Galileo Galilei (1564-1642)

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación y antecedentes

La resolución de problemas físicos reales comúnmente involucra, en primera instancia, una modelización matemática de dicho problema. De esta forma, podemos definir un *modelo matemático* como una representación simplificada del problema físico real. En general, los modelos buscan suprimir los efectos que tienen baja influencia sobre las variables de interés con el afán de mantener la mayor simplicidad posible pero preservando la naturaleza real del problema.

En el caso de problemas de fluidos a una fase, las ecuaciones de balance de masa y momento lineal, junto con la adopción de adecuadas leyes constitutivas, proveen un modelo matemático que busca representar la dinámica del medio fluido. Estas ecuaciones han sido desarrolladas hace más de un siglo, sin embargo, con excepción de algunos casos sencillos, no se han descubierto aún soluciones analíticas directas (ni su existencia) para condiciones generales [1, 2, 3]. Este tipo de dificultades se ve enfatizada en problemas multifásicos, donde las fases involucradas pueden intercambiar masa, cantidad de movimiento y energía.

Existen en la actualidad una gran cantidad de problemas ingenieriles con presencia de flujos multifásicos. En particular, los flujos con presencia de partículas en altas concentraciones constituyen una aplicación de especial interés para el sector industrial. Entre dichas aplicaciones

se destacan el manejo de granos en la agroindustria (transporte, separación, limpieza y mezclado), reactores basados en lechos fluidizados granulares en la industria petroquímica y farmacéutica, manipulación de residuos y biodigestores, entre otros. Para abordar el estudio de estos sistemas se puede recurrir a métodos analíticos y correlaciones provenientes del análisis experimental. Estas metodologías, ampliamente usadas en el siglo pasado, suelen dar nociones macroscópicas generales del comportamiento termo-fluidodinámico del sistema pero no proveen el detalle de los fenómenos más particulares y localizados, como pueden ser la formación de burbujas o aglomeraciones de partículas, fenómenos turbulentos y reacciones químicas.

A partir de la segunda mitad del siglo XX, el desarrollo de las computadoras digitales ha crecido exponencialmente y su uso por parte de la comunidad científica para realizar grandes cantidades de operaciones algebraicas de manera rápida, ha acompañado este crecimiento. En este contexto, la Fluidodinámica Computacional (CFD) surge como un campo de la ciencia que busca resolver de manera aproximada las ecuaciones que rigen la dinámica de los fluidos haciendo uso de dichos recursos computacionales [4, 5]. Sin embargo, la modelización de flujos multifásicos continúa siendo un desafío para la comunidad científica dada la compleja interacción entre las fases y el carácter intrínsecamente caótico del flujo. Esta interacción debe ser adecuadamente representada por el modelo matemático para su posterior resolución. En esta línea, existe una serie de alternativas (ver Fig. (1.1)), entre las cuales se destacan en la actualidad:

- Simulación Numérica Directa
- Métodos Euler-Lagrange
- Métodos Euler-Euler

La Simulación Numérica Directa del Modelo de Elementos Discretos (DNS-DEM) tiene como propósito la representación más fundamental de la estructura multifásica. Esta está constituida por un conjunto de regiones monofásicas delimitadas por interfases a través de la cual las fases intercambian masa, cantidad de movimiento y energía. Las ecuaciones son resueltas para cada fase y la evolución espacial de las interfases forman parte de la solución del problema. El elevado nivel de detalle que puede obtenerse para la resolución de flujos

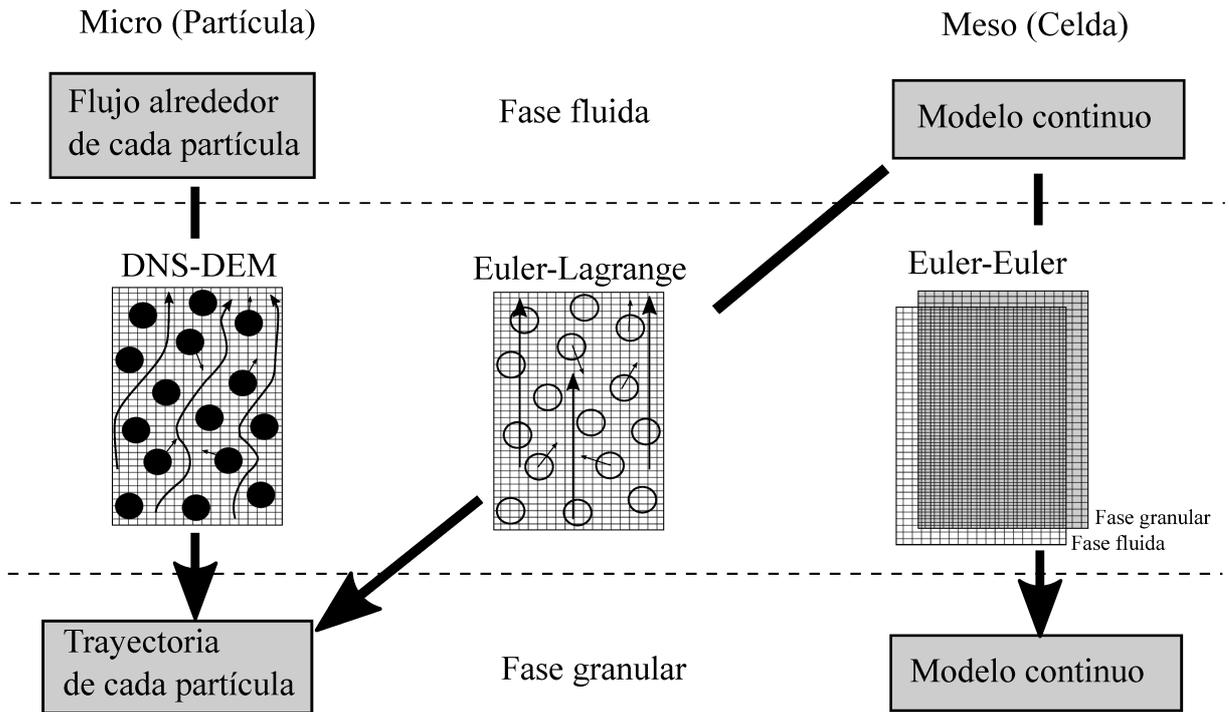


Figura 1.1: Técnicas de modelización para flujos granulares

multifásicos hacen de DNS-DEM una técnica de gran interés en áreas específicas de la fluidodinámica, como son los fenómenos de inyección, cambios de fase y desprendimiento de gotas en jets líquidos. Sin embargo, las escalas de resolución de estas técnicas son normalmente pequeñas y se encuentran relacionadas con la compleja topología de las interfases y las escalas más pequeñas de la turbulencia allí encontradas [6, 7, 8, 9]. Esto se traduce en elevados costos computacionales y de almacenamiento en memoria. Es por ello que estas técnicas están restringidas a problemas de bajos números de Reynolds.

La gran mayoría de los problemas de carácter ingenieril involucra flujos turbulentos, lo cual limita el uso masivo de técnicas DNS para su resolución. Sumado a esto, las técnicas DNS proveen un nivel de detalle no siempre requerido. Para el diseño de dispositivos y procesos que involucran flujos multifásicos, normalmente basta con tener información de datos macroscópicos del flujo (*e.g.* caudales, velocidades medias, proporciones medias de cada fase, caídas de presión, flujos térmicos, entre otros). Esto ha motivado el desarrollo de diversas técnicas de modelado basadas en balances de propiedades medias. Estas provienen de aplicar técnicas de promediados sobre las ecuaciones de balance en la escala microscópica [10, 11, 12].

Un primer acercamiento hacia métodos menos costosos consiste en estudiar el movimiento

de cada partícula de forma aislada, donde la dinámica de cada una es regida por su propia ecuación de movimiento. A diferencia de los métodos DNS, la fase fluida es tratada como un continuo y la presencia de las partículas no influye en la geometría del dominio de dicha fase. En su lugar, la presencia de las partículas y su interacción con la fase continua es modelada. Estas técnicas son comúnmente conocidas como Euler-Lagrange, y en ellas se pierde cierto nivel de detalle respecto al flujo cerca de las partículas. Si bien estas resultan más propicias para flujos de interés industrial, en la actualidad sigue siendo un desafío poder aplicarlas exitosamente a problemas que involucran alta cantidad de partículas sólidas. En estos casos, la necesidad de resolver una ecuación diferencial por cada partícula, vuelve el problema computacionalmente costoso. Sumado a esto, existen colisiones entre las partículas sólidas que afectan sus trayectorias y cuyas ecuaciones de balance de momento lineal para el par deben resolverse. Este efecto también aumenta el costo computacional, dado que el propio modelo requiere de un paso de tiempo propio para la resolución correcta de la colisión entre pares de partículas [13, 14, 15].

Con el afán de poder resolver flujos a dos fases con una fase de partículas para todo tipo de flujos de carácter ingenieril, se han desarrollado métodos que sacrifican aún más el detalle de la dinámica de las partículas en pos de disminuir los tiempos de resolución. Estos métodos consisten en realizar promediados sobre ambas fases y así obtener un sistema constituido por medios continuos interpenetrantes. Estos son conocidos como métodos Euler-Euler, o simplemente Métodos Eulerianos.

El método de modelado Euler-Euler para dos fases (también llamado Modelo de Dos Fluidos) considera que dichas fases coexisten en una determinada proporción en un mismo punto del espacio. De esta forma, ambas son tratadas como medios continuos que responden a sus respectivas ecuaciones de balance de masa, momento y energía. Esta característica trae aparejada la necesidad de una modelización de la interface presente en la realidad. Es decir, mientras que en un modelo microscópico las fases se encuentran claramente delimitadas, en el método macroscópico Euler-Euler, los fenómenos interfaciales son tenidos en cuenta por medio de términos de intercambio entre fases. En general, en problemas de gas y partículas, las únicas fuerzas interfaciales consideradas son las fuerzas de arrastre (drag), para las cuales se han desarrollado diversa cantidad de modelos a lo largo de los años [16, 17, 18, 19, 20, 21]. Estos métodos cuentan además con la complejidad de tener que definir parámetros reológicos para una

fase particulada que se representa como una fase fluida. De aquí surge la necesidad de plantear leyes constitutivas. A diferencia de la modelización de gases y líquidos, al aplicar el modelo Euler-Euler sobre una fase fluida y otra constituida por sólidos (fase granular), los modelos reológicos involucrados deben poder representar adecuadamente la compleja fenomenología de la dinámica de partículas. Para ello, se presentan fundamentalmente dos teorías: La Teoría Cinética de Flujo Granular (KTGF) [22, 23, 17], para medianas y bajas concentraciones de partículas, la cual está basada en la teoría cinética de gases, y la Teoría Friccional [24, 25, 26], para altas concentraciones de partículas, basada en teorías de plasticidad y de suelos.

El abordaje de métodos Eulerianos por vías computacionales para flujos granulares cuenta con un elevado grado de complejidad dado por la gran cantidad de ecuaciones acopladas e incógnitas a resolver. En la actualidad, existen aspectos numéricos que requieren especial atención para garantizar precisión y estabilidad de la solución. Entre ellos se destacan la conservatividad en el planteo de las ecuaciones para la resolución en problemas con elevados gradientes de los campos incógnita [27, 28, 29, 30], la estabilidad de procesos iterativos para el acoplamiento de presión y velocidades de cada fase [31, 32, 33, 34, 35] y la selección de adecuados modelos reológicos y de transferencia para distintas condiciones y regímenes de transporte [36, 37, 38, 39, 40].

1.2. Objetivos

En esta tesis, se propone el desarrollo e implementación de un modelo computacional eficiente para la resolución de flujos a dos fases de gas y partículas en problemas de fluidización. Para lograr esto, se propone un estudio exhaustivo del impacto de diversas formulaciones de las ecuaciones, actualmente implementadas en códigos computacionales de uso por la comunidad, sobre los campos solución. Además, se propone definir estrategias para el estudio de la estabilidad y la tasa de convergencia de los métodos de acoplamiento segregados. De esta manera, se buscará determinar cuales son los parámetros físicos y numéricos de mayor influencia sobre dichos aspectos. Una vez optimizado el modelo computacional, se utilizará la herramienta para la resolución de problemas de fluidización burbujeante, permitiendo explorar los distintos modelos físicos y así determinar cuales resultan óptimos para determinadas condiciones experimentales.

1.3. Estructura de la tesis

La presente tesis se desarrolla siguiendo los diversos aspectos del modelado numérico del Método de Dos Fluidos aplicado a flujos granulares.

En el Capítulo 2, se presenta la teoría del desarrollo del Método de Dos Fluidos Euleriano a partir de las ecuaciones de balance microscópicas en el continuo y las correspondientes teorías de cierre matemático dadas por el modelado de los términos de arrastre y de los parámetros reológicos de la fase granular.

El Capítulo 3 presenta el Método de Volúmenes Finitos aplicado al modelo matemático desarrollado en el Capítulo 2 y la forma general del algoritmo de resolución por métodos segregados de acoplamiento.

El Capítulo 4 se centra en el estudio de los distintos grados de conservatividad con que pueden presentarse las ecuaciones de momento de cada fase en el continuo. A partir de la discretización de las mismas, se plantea analíticamente como impactan en las soluciones finales de los problemas y se cuantifican las diferencias obtenidas con cada método.

En el Capítulo 5 se realiza un estudio exhaustivo de los métodos de acoplamiento y su impacto en la estabilidad del algoritmo general para flujos a una fase. Se comparan los métodos PISO y SIMPLE a una fase y se determinan los parámetros que rigen la convergencia de los métodos teniendo en cuenta además distintas orientaciones y relaciones de aspecto de la malla.

El Capítulo 6 extiende estos conceptos para problemas a dos fases con el fin de determinar los parámetros físicos y numéricos que afectan la estabilidad y convergencia de los distintos métodos de acoplamiento entre fases. En particular, se estudia como se vinculan la presión y las velocidades de ambas fases por medio del término de arrastre y la restricción de incompresibilidad.

En el Capítulo 7, se tienen en cuenta todos los conceptos desarrollados y las conclusiones alcanzadas con el fin de evaluar la eficiencia del modelo computacional para la resolución de problemas reales. Asimismo, se estudia el desempeño de los diversos modelos físicos disponibles en la literatura para formar así un criterio general para el estudio de problemas de fluidización por vías computacionales.

Finalmente, en el Capítulo 8 se presentan las principales conclusiones de esta tesis.

1.4. Aportes científicos

En el marco de la presente tesis, se realizaron los siguientes aportes originales al estudio de métodos numéricos aplicados a flujos multifásicos granulares:

- Desarrollo e implementación de un modelo computacional robusto para la simulación de flujos a dos fases gas-partículas basado en el método PIMPLE y haciendo uso de la Teoría Cinética-Friccional de Flujos Granulares (KTGF-TF) (Capítulo 3), donde se destacan:
 - Distintos tratamientos de acople entre fases por medio del término de arrastre.
 - Formulación conservativa y fase-intensiva sobre las ecuaciones de momento para abordar problemas con ondas de choque.
 - Tratamiento especial de las ecuaciones de momento ante la desaparición de una fase.
 - Método de estabilización numérica para la ecuación de energía granular.
- Estudio y cuantificación de errores de discretización para formulaciones conservativas y no-conservativas de las ecuaciones de momento en problemas con solución analítica o experimental (Capítulo 4).
- Desarrollo e implementación de una técnica general de análisis de estabilidad para métodos segregados de acople presión-velocidad tipo PISO, basada en el método de descomposición de Fourier (Capítulo 5).
- Extensión del método de Fourier para el análisis de estabilidad en problemas de flujos a dos fases acopladas por arrastre y la restricción de incompresibilidad (Capítulo 6).
- Implementación de distintos modelos físicos para coeficientes de arrastre, viscosidad de sólidos, presión de sólidos y condiciones de pared, y comparación exhaustiva de los resultados en regímenes de fluidización frente a resultados experimentales (Capítulo 7).

1.4.1. Publicaciones en revistas indexadas

- Venier C.M., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *Numerical aspects of Eulerian gas-particles flow formulations*. Computers & Fluids vol. 133 p. 151-169. 2016

- Venier C.M., Pairetti C.I., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *On the stability analysis of the PISO algorithm*. Computers & Fluids vol. 147 p. 25-40. 2017
- Venier C.M., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *Assessment of gas-particle flow models for pseudo-2D fluidized bed applications*. Chemical Engineering Communications vol. 205(4) p. 456-478. 2018
- Aguerre H., Pairetti C.I., Venier C.M., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *An oscillation-free flow solver based on flux reconstruction*. Journal of Computational Physics vol. 365 p. 135-148. 2018

1.4.2. Publicaciones en revistas no-indexadas

- Venier C.M., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *Development of a conservative numerical solver for gas-particles multi-fluid system using Kinetic Theory of Granular Flow*. Mecánica Computacional vol. 33 p. 473-497. 2014
- Venier C.M., Marquez Damian S., Ramajo D. y Nigro N.M. *Numerical analysis of multiphase solid-gas flow with Eulerian models and kinetic theory closure*. Mecánica Computacional vol. 32 p. 1849-1862. 2013

1.4.3. Presentaciones en congresos

- *Estabilidad de técnicas de acoplamiento tipo PISO a 1 y 2 fases por el método de Fourier*. XXIII Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones. 2017
- *Conservativeness of the Eulerian Two-fluid model*. XXII Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones. 2016
- *Fourier stability analysis applied to Navier-Stokes segregated algorithms*. XXII Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones. 2016
- *Development of a conservative numerical solver for gas-particles multi-fluid system using Kinetic Theory of Granular Flow*. XXI Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones. 2014

- *Numerical analysis of multiphase solid-gas flow with Eulerian models and kinetic theory closure. XX Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones. 2013*

“Everything should be as simple as possible, but not simpler.”

– Albert Einstein (1879-1955)

Capítulo 2

Modelo Euler-Euler para flujos granulares

Las teorías para fluidos monofásicos derivadas de la Mecánica del Continuo son desarrolladas a partir de balances integrales de masa, momento y energía. Si las variables son diferenciables en un volumen de control dado y existe la transformación Jacobiana entre coordenadas materiales y espaciales, puede obtenerse un sistema de ecuaciones en derivadas parciales que representan balances en escala local haciendo uso del teorema de transporte de Reynolds (o la regla de integración de Leibniz).

El desarrollo de un modelo análogo para el caso de dos o más fases involucra una serie de dificultades tanto matemáticas como físicas. Desde el punto de vista matemático, un flujo multifásico puede ser considerado como un conjunto de regiones monofásicas con bordes o interfaces móviles. En este sentido, los balances locales pueden ser aplicados directamente sobre cada una de estas regiones, pero no pueden aplicarse de forma directa sobre todo el conjunto sin violar las condiciones de continuidad. Desde el punto de vista físico, el problema radica en modelar apropiadamente los fenómenos de interacción interfacial. En este sentido, se debe tener en cuenta que para altas concentraciones de partículas, la dinámica del flujo dependerá fuertemente de la interacción entre las partículas y de estas con el medio fluido. Debido a esto, para lograr derivar un modelo multifásico, es necesario tener una descripción local del flujo y, a partir de esto, obtener propiedades macroscópicas por medio de adecuadas técnicas de promediado.

En este capítulo, se desarrolla un modelo Euleriano extendiendo el Modelo de Dos Fluidos

(TFM) para sistemas de gas y partículas. Para ello, se plantean distintas alternativas de modelaje de las fuerzas de arrastre (drag) y se desarrollan la Teoría Cinética de Flujo Granular (KTGF) y la Teoría Friccional (FT) para el modelado de los parámetros reológicos de la fase granular. De esta forma, finalmente se obtiene un sistema de ecuaciones del continuo matemáticamente cerrado para su posterior resolución por métodos numéricos.

2.1. El Modelo de Dos Fluidos (TFM)

El Modelo de Dos Fluidos (TFM) tradicional consiste en un planteo de un balance integral de masa, momento y energía en un dado volumen de control que contiene a ambas fases. Dicho balance debe cumplirse en cualquier punto del espacio y en cualquier instante de tiempo, es por ello que también puede expresarse como un balance local para cada fase y una condición de salto en la interfase (Fig. 2.1). Para arribar a la forma final del modelo, las ecuaciones en escala local deben ser adecuadamente promediadas. Este promediado puede realizarse de diversas formas: en el espacio, en el tiempo o como ensamble (promediado en eventos), como se verá más adelante.

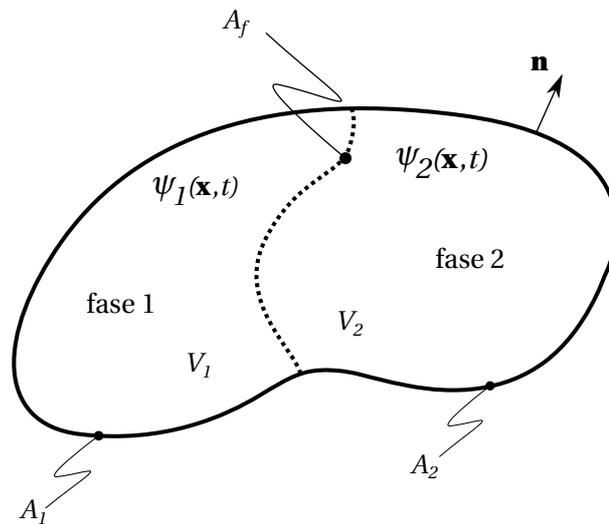


Figura 2.1: Volumen de control con 2 fases y una interfaz móvil

2.1.1. Ecuaciones de balance en escala local

Los siguientes desarrollos están basados en los trabajos de Ishii [10], Drew [11], Enwald *et al.* [12], Delhaye [41], Bouré *et al.* [42], Zanotti [43] y Corzo [44].

Dado el volumen de control de la Fig. 2.1, un balance general de una propiedad intensiva ψ sobre la porción de continuo de la fase i puede expresarse como:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_i(t)} \rho_i \psi_i dV + \int_{A_i(t)+A_f(t)} \rho_i \psi_i (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}) dA = \int_{A_i(t)+A_f(t)} -\mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n} dA + \int_{V_i(t)} \rho_i \Phi_i dV \quad (2.1)$$

donde i es el índice que representa la fase en cuestión (que puede tomar el valor 1 o 2), V_i es el volumen de dicha fase, A_i es el área de la frontera exterior de la fase, A_f es el área de la interfase, ψ es la variable transportada, \mathbf{u} es la velocidad de transporte, \mathbf{n} es el vector unitario normal a la superficie A , \mathbb{J} es el flujo molecular y Φ es una fuente o sumidero.

Sumando las ecuaciones de balance para ambas fases y agrupando los términos de flujos a través de la interfase f , se obtiene:

$$\sum_{i=1}^2 \frac{d}{dt} \int_{V_i(t)} \rho_i \psi_i dV + \sum_{i=1}^2 \int_{A_i(t)} \rho_i \psi_i (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}) dA = - \sum_{i=1}^2 \int_{A_i(t)} \mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n} dA + \sum_{i=1}^2 \int_{V_i(t)} \rho_i \Phi_i dV + \int_{A_f(t)} \phi_f dA \quad (2.2)$$

donde ϕ_f condensa todos los integrandos sobre A_f de la Ec. (2.1) y representa todos los intercambios dados a través de la interfase.

Para continuar con el desarrollo, se presentan algunas identidades de utilidad:

- Regla de integración de Leibniz:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_i(t)} f dV = \int_{V_i(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{A_i(t)+A_f(t)} f \mathbf{v}_f \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.3)$$

- Teorema de Gauss:

$$\int_{V_i(t)} \nabla \cdot \mathbb{F} dV = \int_{A_i(t)} \mathbb{F} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.4)$$

Asumiendo que la superficie de borde exterior del volumen de control no se desplaza ($\mathbf{v}_f|_{A_i(t)} = 0$), en la Ec. (2.3) solo persiste la integral sobre A_f . Entonces, aplicando las Ecs. (2.3) y (2.4)

sobre los términos de la Ec. (2.2) y reagrupando, se obtiene:

$$\sum_{i=1}^2 \int_{V_i(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \psi_i) + \nabla \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot \mathbb{J}_i - \rho_i \Phi_i \right] dV - \int_{A_f} \left\{ \sum_{i=1}^2 [\rho_i \psi_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{v}_f) \cdot \mathbf{n} + \mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n}] + \phi_f \right\} dA = 0 \quad (2.5)$$

Además, definiendo la transferencia de masa por unidad de superficie de interfase \dot{m}_{if} como:

$$\dot{m}_{if} = \rho_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{v}_f) \cdot \mathbf{n} \quad (2.6)$$

Teniendo en cuenta que la Ec. (2.5) debe cumplirse para cualquier volumen $V_i(t)$ e interfase $A_f(t)$ arbitraria, los integrandos deben ser idénticamente nulos. Esto permite arribar a:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \psi_i) + \nabla \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot \mathbb{J}_i - \rho_i \Phi_i = 0 \quad (2.7)$$

$$\sum_{i=1}^2 \dot{m}_i \psi_i + \mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n} = -\phi_f \quad (2.8)$$

La Ec. (2.7) representa el balance local de una propiedad genérica ψ_i , mientras que la Ec. (2.8) representa la condición de salto local en la interfase.

En los casos particulares de conservación de masa y momento lineal, las ecuaciones resultan:

Conservación de masa

$$\begin{aligned} \blacksquare m|_{V_i(t)} &= \int_{V_i(t)} \rho_i \psi_i dV \implies \psi_i = 1 \\ \blacksquare \mathbb{J}_i &= 0 \\ \blacksquare \Phi_i &= 0 \\ \blacksquare \phi_f &= 0 \end{aligned} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i) + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{u}_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^2 \dot{m}_i = 0 \end{array} \right. \quad (2.9)$$

Conservación de momento lineal

$$\begin{aligned} \blacksquare \mathbf{p}|_{V_i(t)} &= \int_{V_i(t)} \rho_i \mathbf{u}_i dV \implies \psi_i = \mathbf{u}_i \\ \blacksquare \mathbb{J}_i &= -\mathbb{T}_i \\ \blacksquare \Phi_i &= \mathbf{b}_i \\ \blacksquare \phi_f &= 0 \end{aligned} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) - \nabla \cdot \mathbb{T}_i - \rho_i \mathbf{b}_i = 0 \\ \sum_{i=1}^2 \dot{m}_i \mathbf{u}_i - \mathbb{T}_i \cdot \mathbf{n} = 0 \end{array} \right. \quad (2.10)$$

En este planteo, se asume que no hay tensión superficial entre las fases, de aquí que $\phi_f = 0$. De forma análoga, se pueden plantear balances de energía, entropía y momento angular sobre el sistema de dos fases.

2.1.2. Técnicas de promediado

Como es sabido, la resolución de la dinámica de fluidos a una fase cuenta con un gran número de complejidades. Todas ellas persisten en el estudio de flujos multifásicos. Sin embargo, existen algunas características inherentes a ellos que dificultan aún más su abordaje. Entre ellas, se destacan:

- Existencia de múltiples interfases móviles y deformables cuyo movimiento es, en principio, desconocido.
- Existencia de fluctuaciones de las variables debido a turbulencia y a movimientos de la interfase.
- Discontinuidad de las propiedades en la interfase.

Todas estas dificultades se encuentran presentes en la mayoría de las aplicaciones ingenieriles de flujos a dos fases. Sin embargo, solo en algunos casos aislados se necesita del nivel de detalle dado por la escala microscópica. En la mayoría de los casos prácticos, solo los aspectos macroscópicos del flujo resultan relevantes. Este argumento respalda el uso de técnicas de promediado para la obtención de valores medios filtrando las componentes de alta frecuencia de los campos de interés. Debe tenerse en cuenta, sin embargo, que aquellas fluctuaciones que tengan influencia sobre las propiedades macroscópicas deben ser tenidas en cuenta para el modelado de las leyes de cierre, como se verá mas adelante.

A continuación, se hará mención de algunas de las técnicas de promediado más utilizadas en la literatura para arribar al Modelo de Dos Fluidos (TFM).

Promediado volumétrico: Estas técnicas han sido extensamente aplicadas para el desarrollo del TFM a lo largo de los años [45, 46, 47, 42, 48]. Dicho promedio se define como:

$$\bar{\psi}^V = \frac{1}{V} \int_V \psi(\mathbf{x}, t_0, \mu_0) dV \quad (2.11)$$

Aquí, \mathbf{x} es el vector posición, t es la variable temporal y μ es el variable *número de evento*. Para este caso, Whitaker [48] propone condiciones de la escala en la que puede aplicarse este tipo de promediado:

$$L_m \ll L \ll L_M \quad (2.12)$$

donde L_m es la dimensión característica de la escala de las fases, L es la dimensión característica para el promediado y L_M es la dimensión característica del sistema físico.

Promediado temporal: Este tipo de técnicas es comúnmente aplicada en el modelado de flujos a una fase turbulentos y puede ser utilizada para el desarrollo de un modelo de flujo a dos fases. Diversos autores han contribuido al desarrollo del TFM basado en estas técnicas [49, 50, 51, 10, 52, 53]. Se define el promediado temporal de una variable como:

$$\overline{\psi}^T = \frac{1}{\Delta T} \int_t^{t+\Delta T} \psi(\mathbf{x}_0, t, \mu_0) dt \quad (2.13)$$

Delhaye y Achard [53] indican que la escala de promediado temporal debe satisfacer:

$$T_m \ll T \ll T_M \quad (2.14)$$

donde T_m es la escala de tiempo característica de las fluctuaciones turbulentas, T es la escala de tiempo característica para el promediado y T_M es la escala de tiempo característica de las fluctuaciones medias del flujo.

Promediado en ensamble: Esta técnica ha sido también aplicada para el desarrollo de TFM por diversos autores [54, 55, 56, 57]. Este tipo de promediado se define como:

$$\overline{\psi}^E = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \psi(\mathbf{x}_0, t_0, \mu_n) \quad (2.15)$$

Los promediados volumétricos y temporales pueden resultar equivalentes al promediado en ensamble. Esto constituye la hipótesis de *ergodicidad*, la cual indica que si el flujo es estacionario y homogéneo, los promediados volumétricos, temporales y en ensamble son equivalente. Si bien este método de promediado requiere de una cantidad de eventos para alcanzar un valor uniforme en \mathbf{x}_0 y t_0 , no tiene restricciones sobre las escalas máximas y mínimas espaciales y temporales. Por esta razón, el mismo será adoptado para los desarrollos subsiguientes. Por simplicidad de notación, el operador de promediado se denotará como $\overline{(\dots)}$.

2.1.3. Función indicadora de fase e identidades entre promedios

Antes de aplicar el método de promediado sobre las ecuaciones de balance, se definirá la función indicadora de fase $X_i(\mathbf{x}, t, \mu)$ como:

$$X_i(\mathbf{x}, t, \mu) = \begin{cases} 1 & \text{si } (\mathbf{x}, t, \mu) \in i \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

De esta manera, se define a la fracción α_i como el promedio de ocurrencia de la fase i . Esta variable es comúnmente llamada *fracción de volumen* (debido a que su primer definición se realizó en base a métodos de promediados volumétricos). La misma resulta entonces:

$$\alpha_i = \overline{X_i} \quad (2.16)$$

Puede notarse que, para flujos a dos fases (fase 1 y fase 2), se verifica:

$$\sum_{i=1}^2 \alpha_i = 1 \quad (2.17)$$

Por otro lado, se deberán tener en cuenta las siguientes identidades. Dadas dos funciones generales p y q , teniendo en cuenta que la operación de promediado en ensamble y derivación respecto a \mathbf{x} y t son intercambiables y siendo C un escalar constante, se tiene que:

$$\overline{p + q} = \overline{p} + \overline{q} \quad (2.18)$$

$$\overline{\overline{p} q} = \overline{p} \overline{q} \quad (2.19)$$

$$\overline{\overline{p} q'} = 0 \quad (2.20)$$

$$\overline{C} = C \quad (2.21)$$

$$\overline{\frac{\partial p}{\partial t}} = \frac{\partial(\overline{p})}{\partial t} \quad (2.22)$$

$$\overline{\nabla \cdot p} = \nabla \cdot \overline{p} \quad (2.23)$$

$$\overline{\nabla p} = \nabla \overline{p} \quad (2.24)$$

siendo $q' = q - \overline{q}$.

Utilizando estas propiedades, se puede arribar a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_i f_i}) = \overline{\frac{\partial X_i f_i}{\partial t}} = \overline{\frac{\partial X_i}{\partial t} f_i + \frac{\partial f_i}{\partial t} X_i} = \overline{\frac{\partial X_i}{\partial t} f_i} + \overline{\frac{\partial f_i}{\partial t} X_i} \quad (2.25)$$

$$\nabla \cdot (\overline{X_i f_i}) = \overline{\nabla \cdot (X_i f_i)} = \overline{X_i \nabla \cdot (f_i) + f_i \cdot \nabla (X_i)} = \overline{X_i \nabla \cdot (f_i)} + \overline{f_i \cdot \nabla (X_i)} \quad (2.26)$$

$$\nabla (\overline{X_i f_i}) = \overline{\nabla (X_i f_i)} = \overline{X_i \nabla (f_i) + f_i \nabla (X_i)} = \overline{X_i \nabla (f_i)} + \overline{f_i \nabla (X_i)} \quad (2.27)$$

Mediante la utilización de funciones de prueba y el teorema del transporte de Reynolds, Drew y Passman [11] han demostrado el siguiente balance:

$$\frac{\partial X_i}{\partial t} + \mathbf{v}_f \cdot \nabla X_i = 0 \quad (2.28)$$

Esta ecuación es conocida como la *Ecuación Topológica*.

2.1.4. Ecuaciones de balance promediadas

En base a las identidades previamente presentadas, se propone arribar a las ecuaciones del Modelo de Dos Fluidos a partir de las ecuaciones en escala local. Para ello, como primer paso se multiplica a la Ec. (2.7) por la función indicadora y se promedia término a término la ecuación. De esta forma se obtiene:

$$\overline{X_i \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \psi_i)} + \overline{X_i \nabla \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i)} + \overline{X_i \nabla \cdot \mathbb{J}_i} - \overline{X_i \rho_i \Phi_i} = 0 \quad (2.29)$$

Aplicando la Ec. (2.25) sobre el primer término de la Ec. (2.29):

$$\overline{X_i \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \psi_i)} = \frac{\partial}{\partial t} (\overline{X_i \rho_i \psi_i}) - \left(\overline{\frac{\partial X_i}{\partial t} \rho_i \psi_i} \right) \quad (2.30)$$

Aplicando la Ec. (2.26) sobre el segundo y tercer término de la Ec. (2.29):

$$\overline{X_i \nabla \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i)} = \nabla \cdot (\overline{X_i \rho_i \psi_i \mathbf{u}_i}) - \overline{(\nabla X_i) \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i)} \quad (2.31)$$

$$\overline{X_i \nabla \cdot \mathbb{J}_i} = \nabla \cdot (\overline{X_i \mathbb{J}_i}) - \overline{(\nabla X_i) \cdot \mathbb{J}_i} \quad (2.32)$$

Entonces, aplicando las Ecs. (2.30), (2.31) y (2.32) sobre la Ec. (2.29) y reordenando los términos se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{X_i \rho_i \psi_i}) + \nabla \cdot (\overline{X_i \rho_i \psi_i \mathbf{u}_i}) + \nabla \cdot (\overline{X_i \mathbb{J}_i}) - \overline{X_i \rho_i \Phi_i} = \left(\overline{\frac{\partial X_i}{\partial t} \rho_i \psi_i} \right) + \overline{(\nabla X_i) \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i)} + \overline{(\nabla X_i) \cdot \mathbb{J}_i} \quad (2.33)$$

Sobre los términos del lado derecho de la igualdad se puede operar sumando y restando un término proporcional a $(\mathbf{v}_f \cdot \nabla X_i)$ y conmutar sobre los productos internos de modo de obtener:

$$\begin{aligned} & \left(\overline{\frac{\partial X_i}{\partial t} \rho_i \psi_i} \right) + \overline{(\nabla X_i) \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i)} + \overline{(\nabla X_i) \cdot \mathbb{J}_i} = \\ & \left[\overline{\rho_i \psi_i \left(\frac{\partial X_i}{\partial t} + \mathbf{v}_f \cdot \nabla X_i \right)} \right] - \overline{\rho_i \psi_i (\mathbf{v}_f \cdot \nabla X_i)} + \overline{\rho_i \psi_i (\mathbf{u}_i \cdot \nabla X_i)} + \overline{(\nabla X_i) \cdot \mathbb{J}_i} \end{aligned} \quad (2.34)$$

El primer término del lado derecho de la Ec. (2.34) es proporcional al lado izquierdo de la ecuación topológica (Ec. (2.28)), por lo tanto resulta nulo. Por otro lado, el resto de los términos del lado derecho pueden agruparse haciendo uso de la definición dada por la Ec. (2.6) para finalmente obtener la siguiente ecuación de balance:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_i \rho_i \psi_i}) + \nabla \cdot (\overline{X_i \rho_i \psi_i \mathbf{u}_i}) + \nabla \cdot (\overline{X_i \mathbb{J}_i}) - \overline{X_i \rho_i \Phi_i} = \overline{(\dot{m}_{if} \psi_i + \mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n}) \frac{\partial X_i}{\partial n}} \quad (2.35)$$

Promediado sobre el balance de masa

Para el balance de masa, la Ec. (2.35) se reduce a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_i \rho_i}) + \nabla \cdot (\overline{X_i \rho_i \mathbf{u}_i}) = \overline{\dot{m}_{if} \frac{\partial X_i}{\partial n}} \quad (2.36)$$

En los casos de no tener transferencia de masa a través de la interfase ($\dot{m}_{if} = 0$), la Ec. (2.36) resulta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_1 \rho_1}) + \nabla \cdot (\overline{X_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}) = 0 \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_2 \rho_2}) + \nabla \cdot (\overline{X_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}) = 0 \quad (2.38)$$

Promediado sobre el balance de momento lineal

El balance de momento lineal promediado se obtiene a partir de la Ec. (2.35) sin considerar transferencia de masa a través de la interfase y con la fuerza de gravedad como única fuerza de cuerpo actuante ($\mathbf{b}_i = \mathbf{g}$). De esta forma, la ecuación resulta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_i \rho_i \mathbf{u}_i}) + \nabla \cdot (\overline{X_i \rho_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i}) - \nabla \cdot (\overline{X_i \mathbb{T}_i}) - \overline{X_i \rho_i \mathbf{g}} = -\overline{\mathbb{T}_i \cdot \nabla X_i} \quad (2.39)$$

La condición de salto para el momento lineal resulta de aplicar el mismo procedimiento de promediado sobre la segunda ecuación del sistema (2.10):

$$\sum_{i=1}^2 \overline{(\mathbb{T}_i \cdot \nabla X_i)} = 0 \quad (2.40)$$

Ahora bien, definiendo la transferencia de momento interfacial $\mathbf{M}_{if} = -\overline{(\mathbb{T}_i \cdot \nabla X_i)}$, las Ecs. (2.39) y (2.40) resultan:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}) + \nabla \cdot (\overline{X_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1}) - \nabla \cdot (\overline{X_1 \mathbb{T}_1}) - \overline{X_1 \rho_1 \mathbf{g}} = \mathbf{M}_{1f} \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{X_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}) + \nabla \cdot (\overline{X_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2}) - \nabla \cdot (\overline{X_2 \mathbb{T}_2}) - \overline{X_2 \rho_2 \mathbf{g}} = \mathbf{M}_{2f} \quad (2.42)$$

$$\mathbf{M}_{1f} = -\mathbf{M}_{2f} \quad (2.43)$$

El set de ecuaciones obtenido (Ecs. (2.37), (2.38), (2.41), (2.42) y (2.43)) posee la dificultad de no poder ser resuelto directamente para sus valores promedio. Esto se debe a que las variables dependientes se encuentran multiplicadas entre sí y luego promediadas, en lugar de como producto de sus promedios. Para obtener una formulacion abordable, se recurre a la *descomposicion de Reynolds* de cada uno de los términos y a las definiciones de *promedios ponderados*.

2.1.5. Descomposición de Reynolds y formulación de Dos Fluidos

La *descomposición de Reynolds* de una variable genérica se define como:

$$\phi = \overline{\phi}^\xi + \phi' \quad (2.44)$$

donde el operador $(\cdot)^\xi$ es un promedio ponderado que se define como:

$$\overline{\phi}^\xi = \frac{\overline{\xi\phi}}{\overline{\xi}} \quad (2.45)$$

siendo ξ el factor de ponderación. En el caso de utilizar la función indicadora de fase como factor de ponderación ($\xi = X_i$), se tiene:

$$\overline{\phi}^{X_i} = \frac{\overline{X_i\phi}}{\alpha_i} \quad (2.46)$$

De esta forma, se pueden obtener las siguientes expresiones:

$$\overline{\rho_i}^{X_i} = \frac{\overline{X_i\rho_i}}{\alpha_i} \implies \overline{X_i\rho_i} = \alpha_i\overline{\rho_i}^{X_i} \quad (2.47)$$

$$\overline{\mathbf{u}_i}^{(X_i\rho_i)} = \frac{\overline{X_i\rho_i\mathbf{u}_i}}{\overline{X_i\rho_i}} = \frac{\overline{X_i\rho_i\mathbf{u}_i}}{\alpha_i\overline{\rho_i}^{X_i}} \implies \overline{X_i\rho_i\mathbf{u}_i} = \alpha_i\overline{\rho_i}^{X_i}\overline{\mathbf{u}_i}^{(X_i\rho_i)} \quad (2.48)$$

$$\overline{\mathbb{T}_i}^{X_i} = \frac{\overline{X_i\mathbb{T}_i}}{\alpha_i} \implies \overline{X_i\mathbb{T}_i} = \alpha_i\overline{\mathbb{T}_i}^{X_i} \quad (2.49)$$

$$\overline{\mathbf{g}}^{X_i\rho_i} = \frac{\overline{X_i\rho_i\mathbf{g}}}{\overline{X_i\rho_i}} = \frac{\overline{X_i\rho_i\mathbf{g}}}{\alpha_i\overline{\rho_i}^{X_i}} \implies \overline{X_i\rho_i\mathbf{g}} = \alpha_i\overline{\rho_i}^{X_i}\overline{\mathbf{g}}^{X_i\rho_i} \quad (2.50)$$

Por otro lado, el termino no-lineal de la ecuación de momento puede reescribirse teniendo en cuenta la descomposición de Reynolds de manera que:

$$\begin{aligned}\overline{X_i \rho_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i} &= \overline{X_i \rho_i (\overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}} + \mathbf{u}'_i) (\overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}} + \mathbf{u}'_i)} \\ &= \overline{X_i \rho_i \overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}} \overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}}} + \overline{X_i \rho_i \overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}} \mathbf{u}'_i} + \overline{X_i \rho_i \mathbf{u}'_i \overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}}} + \overline{X_i \rho_i \mathbf{u}'_i \mathbf{u}'_i}\end{aligned}\quad (2.51)$$

Recordando las propiedades (2.19) y (2.20) y definiendo:

$$\mathbb{T}_i^{Re} = -\frac{\overline{X_i \rho_i \mathbf{u}'_i \mathbf{u}'_i}}{\alpha_i}\quad (2.52)$$

se obtiene:

$$\overline{X_i \rho_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i} = \alpha_i \overline{\rho_i^{X_i} \overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}} \overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}}} - \alpha_i \mathbb{T}_i^{Re}\quad (2.53)$$

Considerando la hipótesis de densidad homogénea de cada una de las fases ($\overline{\rho_i^{\xi}} = \rho_i \implies \overline{\mathbf{u}_i^{(X_i \rho_i)}} \equiv \overline{\mathbf{u}_i^{X_i}}$), se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1\quad (2.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \overline{\mathbf{u}_1^{X_1}}) = 0\quad (2.55)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2) + \nabla \cdot (\alpha_2 \rho_2 \overline{\mathbf{u}_2^{X_1}}) = 0\quad (2.56)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 \overline{\mathbf{u}_1^{X_1}}) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \overline{\mathbf{u}_1^{X_1}} \overline{\mathbf{u}_1^{X_1}}) = \nabla \cdot \left[\alpha_1 \left(\overline{\mathbb{T}_1^{X_1}} + \mathbb{T}_1^{Re} \right) \right] + \alpha_1 \rho_1 \mathbf{g} + \mathbf{M}_{1f}\quad (2.57)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 \overline{\mathbf{u}_2^{X_2}}) + \nabla \cdot (\alpha_2 \rho_2 \overline{\mathbf{u}_2^{X_2}} \overline{\mathbf{u}_2^{X_2}}) = \nabla \cdot \left[\alpha_2 \left(\overline{\mathbb{T}_2^{X_2}} + \mathbb{T}_2^{Re} \right) \right] + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{g} + \mathbf{M}_{2f}\quad (2.58)$$

$$\mathbf{M}_{1f} = -\mathbf{M}_{2f}\quad (2.59)$$

Teniendo en cuenta las aplicaciones de este modelo a problemas de gas y partículas, se utilizarán una serie de hipótesis y simplificaciones, con el fin de reducir la complejidad del sistema de ecuaciones:

- Densidad constante para ambas fases ($\rho_i = \text{cte}$).
- Se asume régimen laminar de modo que el tensor de tensiones de Reynolds se puede asumir despreciable ($\mathbb{T}_i^{Re} = \mathbb{O}$).
- Se omitirá la notación de promediado (queda implícito que las nuevas variables del problema son variables promedio).

Finalmente se arriba a:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1 \quad (2.60)$$

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{u}_1) = 0 \quad (2.61)$$

$$\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_2 \mathbf{u}_2) = 0 \quad (2.62)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \mathbf{u}_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1) = \nabla \cdot \left(\frac{\alpha_1}{\rho_1} \mathbb{T}_1 \right) + \alpha_1 \mathbf{g} + \frac{\mathbf{M}_{1f}}{\rho_1} \quad (2.63)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \mathbf{u}_2) + \nabla \cdot (\alpha_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2) = \nabla \cdot \left(\frac{\alpha_2}{\rho_2} \mathbb{T}_2 \right) + \alpha_2 \mathbf{g} + \frac{\mathbf{M}_{2f}}{\rho_2} \quad (2.64)$$

$$\mathbf{M}_{1f} = -\mathbf{M}_{2f} \quad (2.65)$$

Para la resolución de este modelo, se debe contar con igual cantidad de ecuaciones que de incógnitas. De esta necesidad, surgen las *leyes de cierre*. Estas leyes pueden ser de 3 tipos: leyes constitutivas, leyes de transferencia y leyes topológicas [12, 42]. En particular, las leyes constitutivas relacionan las propiedades físicas por medio de axiomas y datos experimentales, mientras que las leyes de transferencia son ecuaciones empíricas que describen la interacción en la interfase. Las leyes topológicas relacionan las variables de flujo por medio de su distribución espacial.

Dado el gran número de leyes de cierre utilizadas en TFM, solo las leyes asociadas a flujos de gas y partículas serán foco de esta tesis. En las siguientes secciones se modelarán los tensores de tensiones de cada fase (\mathbb{T}_i) a través de leyes constitutivas provenientes de la Teoría Cinética de Flujo Granular (KTGF) y la Teoría Friccional (FT), mientras que los términos de transferencia interfacial de momento (\mathbf{M}_{if}) serán modelados por leyes de transferencia basadas exclusivamente en fuerzas de arrastre, las cuales comúnmente predominan por sobre el resto de las fuerzas interfaciales.

2.2. Leyes de transferencia: Fuerza de arrastre

Usualmente, en los modelos de flujos granulares a dos fases, el intercambio de momento lineal entre fases se dá exclusivamente por fuerzas de arrastre. Otras fuerzas, como son las fuerzas de *lift* o masa virtual se consideran despreciables. En este contexto, dicha fuerza es comúnmente modelada como:

$$\mathbf{M}_{if} = K_{ij}(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \quad (2.66)$$

donde K_{ij} es el coeficiente de arrastre.

Muchas correlaciones para dicho coeficiente han sido desarrolladas a lo largo de los años. Una de las primeras técnicas aplicadas es la utilización de la ecuación de Ergun [58] para predecir la caída de presión en un lecho fijo de partículas. Sin embargo, para condiciones de fluidización, esta simple fórmula no resulta aplicable. Los primeros intentos para establecer una ley general de arrastre para condiciones más diluidas fueron realizados por Richardson y Zaki [59]. Ellos investigaron la sedimentación de partículas esféricas en una suspensión de líquidos y sólidos para obtener una expresión para la velocidad relativa entre las fases como función de la fracción de vacío. Los resultados de estos experimentos han sido ampliamente utilizados para desarrollar correlaciones para el coeficiente de arrastre.

El modelo de Wen-Yu: El modelo de Wen-Yu [19] hace uso de los resultados de Richardson y Zaki y extiende este concepto de una partícula individual a un sistema de partículas. Esta correlación se basa en la hipótesis de que el flujo está dominado por fuerzas viscosas. El coeficiente de arrastre resulta:

$$K_{sg} = 0,75 \frac{C_d \alpha_s \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{d_p} \alpha_g^{-2,65} \quad (2.67)$$

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) & Re_p < 1000 \\ 0,44 & Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (2.68)$$

$$Re_p = \frac{\rho_g d_p |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{\mu_g} \quad (2.69)$$

El modelo de Syamlal-O'Brien: En el mismo sentido, Syamlal y O'Brien [18] propusieron extender el modelo de una partícula individual, pero introduciendo una correlación para la velocidad relativa como función del número de Reynolds de las partículas y la fracción de volumen siguiendo los resultados de Richardson y Zaki. Este modelo considera que el número de Arquímedes (que relaciona las fuerzas gravitacionales y viscosas) es el mismo para una partícula que para un sistema de partículas. El coeficiente de arrastre se computa en este caso como:

$$K_{sg} = 0,75 \frac{C_e \alpha_s \alpha_g \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{d_p v_{rs}^2} \quad (2.70)$$

siendo:

$$v_{rs} = 0,5 \left[A - 0,06Re_p + \sqrt{(0,06Re_p)^2 + 0,12Re_p(2B - A) + A^2} \right] \quad (2.71)$$

$$C_e = \left[0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{\frac{Re_p}{v_{rs}}}} \right], A = \alpha_g^{4,14}, B = \begin{cases} C_2 \alpha_g^{1,28}, & \alpha_g \leq 0,85 \\ \alpha_g^{C_1}, & \alpha_g > 0,85 \end{cases} \quad (2.72)$$

donde C_1 y C_2 son usualmente fijados en los valores 2,65 y 0,8 respectivamente, aunque los mismos pueden estar sujetos a ajustes de acuerdo a las condiciones de fluidización del problema [18].

El modelo de Gidaspow: Por otro lado, Gidaspow [17] propuso una técnica de conmutación para $\alpha_g = 0,8$ entre los modelos de Wen-Yu para regímenes diluidos y la correlación de Ergun para condiciones de empaquetamiento, contemplando así los varios estados posibles de concentración de partículas. La función obtenida para el coeficiente tiene la desventaja de ser discontinua en el punto de conmutación:

$$K_{sg} = \begin{cases} 150 \frac{\mu_g \alpha_s^2}{d_p^2 \alpha_g^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s}{d_p \alpha_g} |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s| & \alpha_s > 0,2 \\ 0,75 \frac{C_d \alpha_s \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{d_p} \alpha_g^{-2,65} & \alpha_s \leq 0,2 \end{cases} \quad (2.73)$$

El modelo de Gibilaro: El modelo de Gibilaro [20] es otro ejemplo de una ley de arrastre diseñada para extender la aplicación de una correlación de lechos fijos (*i.e.* la ecuación de Ergun). De hecho, esta expresión puede ser vista como una versión modificada del modelo de Ergun con un factor de fricción distinto dependiente del número de Reynolds de las partículas y ajustado para verificar los datos experimentales:

$$K_{sg} = \left[\frac{17,3}{Re_p} + 0,336 \right] \frac{\alpha_s \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{d_p} \alpha_g^{-1,8} \quad (2.74)$$

$$Re_p = \frac{\alpha_g \rho_g d_p |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{2\mu_g} \quad (2.75)$$

El modelo de Arastoopour: Más adelante, Arastoopour *et al.* [60] hicieron modificaciones en la expresión de Gibilaro en cómo es afectada la fuerza de arrastre por la fracción de vacío:

$$K_{sg} = \left[\frac{17,3}{Re_p} + 0,336 \right] \frac{\alpha_s \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{d_p} \alpha_g^{-2,8} \quad (2.76)$$

El modelo de Di Felice: Di Felice [21] siguió con la estructura general del modelo de Wen-Yu modificando la expresión para considerar los regímenes intermedios de flujos. Para ello, introdujo una función de ajuste para los resultados experimentales, resultando en un coeficiente de arrastre de la forma:

$$K_{sg} = 0,75 \frac{C_e \alpha_s \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{d_p} \alpha_g^{-\chi} \quad (2.77)$$

$$\chi = P - Q \exp \left[\frac{-(1,5 - \log(Re_p))^2}{2} \right] \quad (2.78)$$

donde P y Q son usualmente fijados en los valores 3,7 y 0,65 respectivamente.

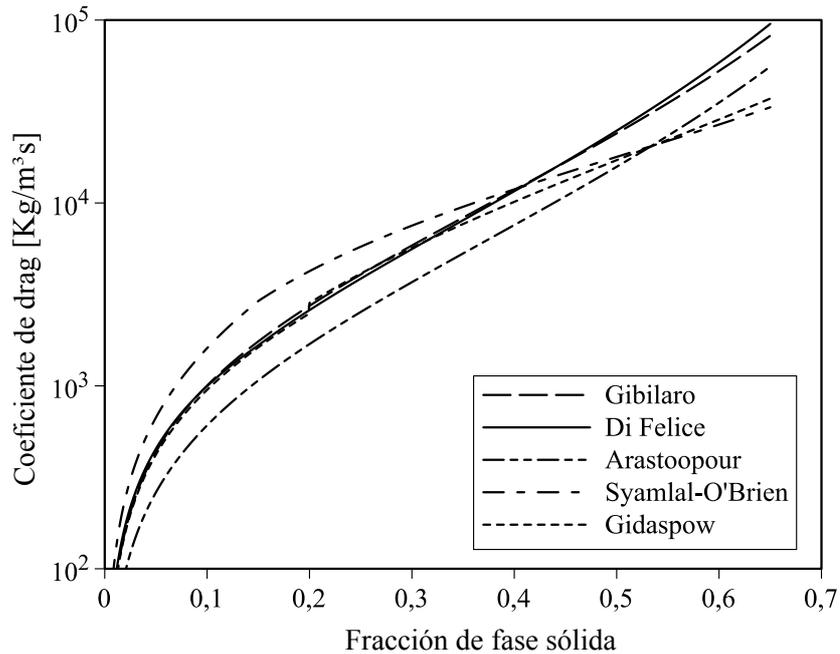


Figura 2.2: Coeficiente de arrastre para distintos modelos en condiciones típicas de fluidización

Los modelos mencionados son algunos de los modelos más frecuentemente utilizados en la literatura para condiciones de fluidización. La Fig. 2.2 muestra el coeficiente de arrastre como una función de la concentración de partículas, manteniendo el resto de los parámetros fijos. Esto provee una cierta estimación sobre el comportamiento relativo de los distintos modelos

de arrastre para condiciones típicas de fluidización burbujeante. La mayoría de ellos predicen resultados similares, sin embargo puede observarse que el modelo de Syamlal-O'Brien predice valores de arrastre mayores mientras que el modelo de Arastoopour predice los valores de arrastre más bajos para concentraciones bajas a intermedias de partículas.

2.3. Leyes constitutivas: El tensor de tensiones

El modelado de los tensores de tensiones para un medio fluido en flujos a dos fases no presenta mayores complejidades que para flujos a una fase. En el caso de sistemas sólido-gas, la fase gaseosa es usualmente considerada un fluido Newtoniano, cuyo tensor de tensiones generalizado resulta:

$$\mathbb{T}_g = -p\mathbf{I} + \tau_g \quad (2.79)$$

donde:

$$\tau_g = 2\mu_g \left\{ \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u}_g + (\nabla \mathbf{u}_g)^T] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}_g) \mathbf{I} \right\} + \lambda_g (\nabla \cdot \mathbf{u}_g) \mathbf{I} \quad (2.80)$$

Sin embargo, para la fase de partículas, el análisis no resulta trivial. Ya se ha mencionado que, en el marco del Modelo de Dos Fluidos (TFM), esta fase también es tratada como un medio continuo fluido. Siguiendo los criterios del modelo planteado por Ishii [10], la presión de la fase continua forma parte del tensor de tensiones generalizado de la fase granular.

Al momento de estudiar la fase granular, resulta lógico pensar que cualquier modelo matemático que busque representar la reología deberá tener en cuenta la concentración de partículas en cada instante y posición en el espacio. De este razonamiento, surge la necesidad de diferenciar posibles regímenes de concentraciones. Específicamente, se pueden diferenciar los siguientes estados:

- En baja concentración, donde las mismas se trasladan dando lugar a una disipación de tipo *cinética* (*régimen cinético*).
- En mediana concentración, además de la traslación previamente mencionada, se da lugar a posibles colisiones y una forma diferenciable de disipación llamada *colisional* (*régimen colisional*).

- En alta concentración, las partículas se mantienen en contacto dando lugar a rozamientos entre ellas. A este tipo de disipación se la conoce como *friccional* (*régimen friccional*).

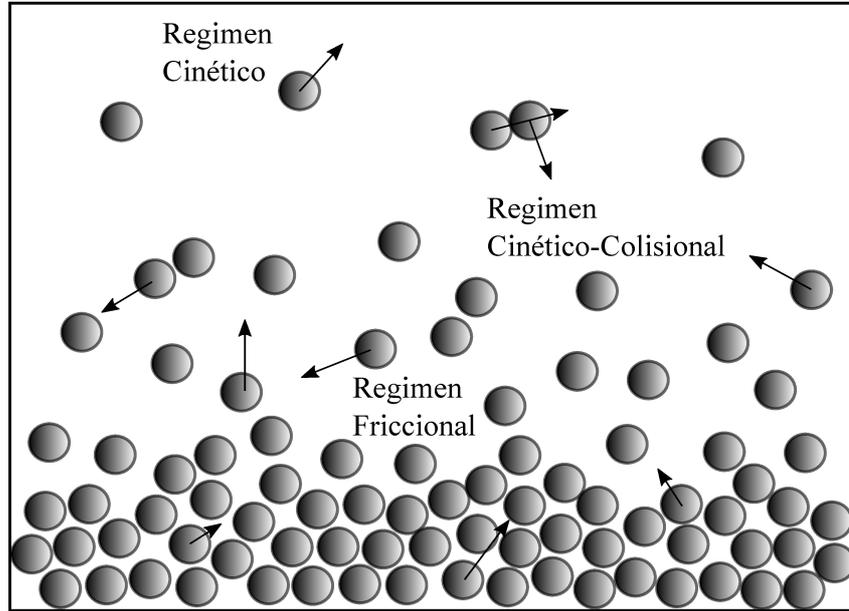


Figura 2.3: Esquema de los distintos tipos de regímenes granulares

Es esperable que la transferencia de masa, momento y energía sea diferente de acuerdo al régimen de concentración, dado que los mecanismos de disipación son claramente distintos (Fig. 2.3). De esta forma, el tensor de tensiones de la fase sólida puede ser expresado como:

$$\mathbb{T}_s = \mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c + \mathbb{T}_s^f \quad (2.81)$$

donde el supra-índice k representa el régimen cinético, c representa el régimen colisional y f representa el régimen friccional.

Los primeros dos términos del lado derecho de la Ec. (2.81) pueden agruparse como $\mathbb{T}_s^{KTGF} = \mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c$ dado que ambos serán modelados basados en una misma teoría (KTGF) y diferenciados de \mathbb{T}_s^f . La contribución \mathbb{T}_s^{KTGF} está relacionada con el movimiento aleatorio y colisiones instantáneas entre las partículas y su modelado estará basado en técnicas de promediado aplicadas a la ecuación de transporte de Boltzmann. Por otro lado, en condiciones de mayor contacto, con fricción y deslizamiento entre partículas, la contribución dominante sobre el tensor de tensiones es \mathbb{T}_s^f , el cual se modela de acuerdo a leyes basadas en teorías de suelos y teorías de plasticidad.

En particular, se asume que:

$$\mathbb{T}_s = \mathbb{T}_s^{KTGF} + \mathbb{T}_s^f = - \left(p + \frac{p_s}{\alpha_s} \right) \mathbf{I} + \tau_s \quad (2.82)$$

donde:

$$\begin{aligned} p_s &= p_s^{KTGF} + p_s^f \\ \tau_s &= 2(\mu_s^{KTGF} + \mu_s^f) \left\{ \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u}_s + (\nabla \mathbf{u}_s)^T] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \right\} + (\lambda_s^{KTGF} + \lambda_s^f) (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \end{aligned} \quad (2.83)$$

En el desarrollo de la siguiente sección, el lector podrá notar la analogía entre las ecuaciones de balance del Modelo de Dos Fluidos obtenidas por promediados partiendo de las ecuaciones de hidrodinámica para cada fase (como se desarrollo en las secciones anteriores) y la obtención de ecuaciones de balance a partir de integrar la Ecuación de Boltzmann para un sistema de partículas (como se realiza a continuación).

En esencia, ambas estrategias permiten arribar al modelo final. Sin embargo, mientras el método basado en TFM resulta más directo para la obtención de las ecuaciones en su forma final, el método basado en la Teoría Cinética de gases provee fundamentos para la caracterización y modelado de la dinámica de las partículas.

En la presente tesis, se desarrollan las ecuaciones por la estrategia de TFM y se utiliza la KTGF y FT para complementar teoría caracterizando los parámetros reológicos del modelo. Una consecuencia del desarrollo de KTGF, es la obtención de ecuaciones de balance de masa, momento y energía para la fase particulada, de las cuales solo el balance de energía es tenido en cuenta a los fines de introducir los distintos modelos reológicos.

2.4. Teoría Cinética de Flujo Granular (KTGF)

En el desarrollo subsiguiente de la Teoría Cinética-Colisional, se arribarán a las ecuaciones de balance de masa, momento y energía para un ensamble de partículas a partir de la Ecuación de Boltzmann. Esta estrategia hace uso de técnicas de promediado, al igual que los métodos presentados anteriormente, pero lo realiza introduciendo una función de distribución de velocidades f . De esta manera, incorporando el efecto de las colisiones entre partículas, se puede arribar a una ecuación de balance de energía, llamada *energía granular*, análoga a la energía interna termodinámica para gases, que permitirá modelar la reología de la fase granular.

La Teoría Cinética de Flujo Granular (KTGF), desarrollada fundamentalmente por Jenkins y Savage [23] y Lun *et al.* [22], es análoga a la Teoría Cinética de gases densos de Chapman y Cowling [61]. La idea central de esta teoría es que los granos están en continuo movimiento caótico dentro de un medio fluido. Este movimiento caótico puede darse en bajas concentraciones, debido a la fricción entre el gas y las partículas, turbulencia en el gas, variaciones de presión en el fluido, y en altas concentraciones, debido a colisiones entre partículas. En analogía a la teoría de gases, se puede definir una *temperatura granular* θ y una *energía granular* E_θ , como función de las fluctuaciones de la velocidad de las partículas:

$$\theta = \frac{1}{3} \mathbf{C} \cdot \mathbf{C} \quad (2.84)$$

$$E_\theta = \frac{1}{2} m \mathbf{C} \cdot \mathbf{C} = \frac{3}{2} m \theta \quad (2.85)$$

donde E_θ es la energía granular debido al movimiento granular aleatorio y \mathbf{C} es la fluctuación de la velocidad de las partículas (*velocidad particular*). Al igual que para los gases, se asume que las partículas oscilan alrededor de un valor medio de una forma fuertemente caótica e isotrópica. De esta forma, la distribución de velocidades siguen una distribución normal alrededor de su media. El principio general de disipación de energía granular puede verse en la Fig. 2.4. Luego, la naturaleza inelástica de las colisiones entre partículas disipan la energía fluctuante en entalpía. Es por ello que E_θ representa un estado transitorio de energía en el proceso de disipación de materiales granulares fluidizados. Vale destacar que la temperatura granular no es una medida de la magnitud de las colisiones sino de la velocidad del movimiento aleatorio de las partículas. Es por ello que la energía granular se vuelve nula solo en el caso de que el sistema granular se encuentre en muy altas concentraciones, donde las partículas no tienen posibilidad de oscilar. En tales concentraciones elevadas ($\alpha_s > 0,5$), la temperatura granular disminuye y se necesita de otro tipo de teoría para representar los mecanismos de disipación involucrados (*i.e.* Teoría Friccional).

2.4.1. Distribución de partículas y la Ecuación de Boltzmann

Se comienza considerando un ensamble de partículas idénticas sin vibración ni rotaciones internas. La distribución de velocidades de partículas puede ser definida como función de la

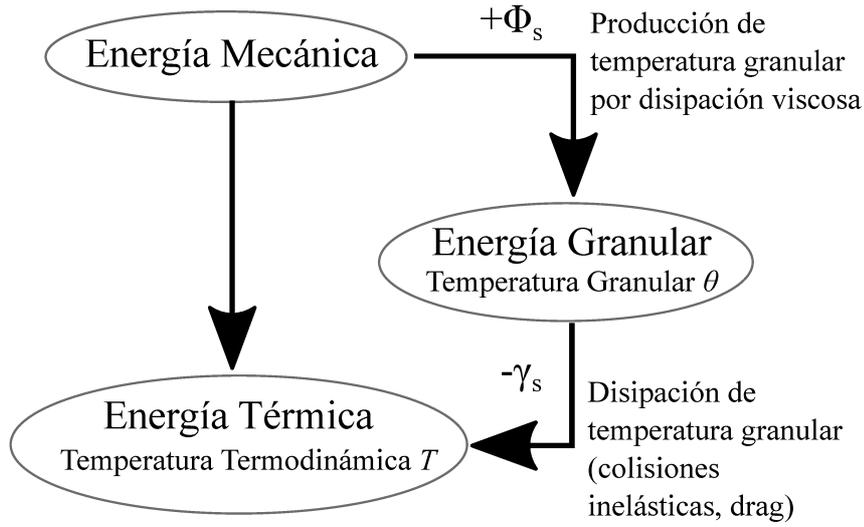


Figura 2.4: Modos de disipación de energía en presencia de un medio granular

posición \mathbf{r} de cada partícula, la velocidad instantánea \mathbf{c} de cada partícula y el tiempo t :

$$f = f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) \quad (2.86)$$

Esta definición tiene un carácter probabilístico asociado. A los fines de contabilizar la cantidad de partículas situadas en un volumen delimitado por el rango $[\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}]$ que tienen velocidades en el rango $[\mathbf{c}, \mathbf{c} + d\mathbf{c}]$ en un instante de tiempo t , la cantidad probable de partículas es $f d\mathbf{c} d\mathbf{r}$ y la *densidad de cantidad de partículas*, en un punto \mathbf{r} en un dado instante de tiempo t , resulta:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (2.87)$$

Por otro lado, la *densidad de materia* de un conjunto de partículas en la posición \mathbf{r} al tiempo t es:

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}, t) = \alpha_s \rho_s(\mathbf{r}, t) = mn(\mathbf{r}, t) \quad (2.88)$$

siendo m la masa individual de cada partícula.

Ahora bien, suponiendo que cada partícula se encuentra sometida a la acción de una fuerza externa que produce en ella una aceleración \mathbf{a} , la velocidad, siempre que no colisione con otra partícula, será $\mathbf{c} + \mathbf{a} dt$ y su posición cambiará de \mathbf{r} a $\mathbf{r} + \mathbf{c} dt$ en el intervalo de tiempo $[t, t + dt]$. En el caso que ocurran colisiones entre partículas, el balance de número de partículas resulta:

$$[f(\mathbf{c} + \mathbf{a} dt, \mathbf{r} + \mathbf{c} dt, t + dt) - f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)] d\mathbf{c} d\mathbf{r} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} d\mathbf{c} d\mathbf{r} dt \quad (2.89)$$

donde $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$ representa la tasa de cambio de f por efectos colisionales. Entonces, dividiendo por $d\mathbf{c} d\mathbf{r} dt$ e imponiendo $dt \rightarrow 0$:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \quad (2.90)$$

La Ec. (2.90) es conocida como la Ecuación de Boltzmann.

2.4.2. La Ecuación de Enskog

Para obtener un set de ecuaciones de conservación para masa, momento y energía de un sistema compuesto por partículas, se comenzará integrando la ecuación de Boltzmann incorporando una magnitud genérica ϕ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{Df}{Dt} \phi d\mathbf{c} = n\mathbb{C}(\phi) \quad (2.91)$$

Aquí, el lado derecho de la ecuación tiene en cuenta el efecto de las colisiones instantáneas y binarias y resulta de integrar el término $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$.

Además, se define como *valor medio de la distribución* de una propiedad genérica ϕ como:

$$\langle \phi \rangle (\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t) \phi d\mathbf{c} \quad (2.92)$$

Esto permite definir la *velocidad macroscópica del medio* $\tilde{\mathbf{u}}_s$ en la posición \mathbf{r} al tiempo t como:

$$\tilde{\mathbf{u}}_s(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t) \mathbf{c} d\mathbf{c} = \langle \mathbf{c} \rangle \quad (2.93)$$

Luego, en el desarrollo de cada término del lado izquierdo de la Ec. (2.91), se pueden plantear las siguientes equivalencias:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial t} \phi d\mathbf{c} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} f \phi d\mathbf{c} - \int_{-\infty}^{\infty} f \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{c} = \frac{\partial}{\partial t} (n \langle \phi \rangle) - n \langle \frac{\partial \phi}{\partial t} \rangle \quad (2.94)$$

Aquí se ha intercambiado el orden de diferenciación respecto a t y de integración sobre \mathbf{c} dado que los límites de integración son independientes de t . Teniendo en cuenta consideraciones similares se puede arribar a:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \phi d\mathbf{c} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c} f \phi d\mathbf{c} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c} f \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{c} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (n \langle \mathbf{c} \phi \rangle) - n \langle \mathbf{c} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \rangle \quad (2.95)$$

Aquí se ha tenido en cuenta que para las variables independientes \mathbf{r} y \mathbf{c} se cumple $\frac{\partial c_i}{\partial r_i}$ siendo i el índice de componente.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \phi d\mathbf{c} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} \cdot (\mathbf{a} f \phi) d\mathbf{c} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{a} f \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{c}} d\mathbf{c} = \left[\mathbf{a} f \phi \right]_{c_i=-\infty}^{c_i=\infty} - n \left\langle \mathbf{a} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{c}} \right\rangle \quad (2.96)$$

Teniendo en cuenta que la aceleración \mathbf{a} está dada por fuerzas externas impuestas, resulta independiente de \mathbf{c} . Además, $f \rightarrow 0$ cuando $|c_i| \rightarrow \infty$, entonces $\left[\mathbf{a} f \phi \right]_{c_i=-\infty}^{c_i=\infty} \rightarrow 0$. De esta forma, se obtiene:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \phi d\mathbf{c} = -\mathbf{a} \cdot n \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{c}} \right\rangle \quad (2.97)$$

Haciendo uso de las Ecs. (2.94), (2.95) y (2.97), se arriba a la forma final de balance para una magnitud genérica ϕ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \langle \phi \rangle) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (n \langle \mathbf{c} \phi \rangle) - n \left(\left\langle \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \mathbf{c} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \right\rangle + \mathbf{a} \cdot \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{c}} \right\rangle \right) = n\mathbb{C}(\phi) \quad (2.98)$$

Esta ecuación es conocida como la Ecuación de Transporte de Enskog.

El modelado de los efectos colisionales sobre las ecuaciones de balance se basan mayormente en los trabajos desarrollados por Jenkins y Savage [23] y por Lun *et al.* [22]. En ellos, el término $n\mathbb{C}$ es expresado como:

$$n\mathbb{C} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbb{P}^c + N^c \quad (2.99)$$

donde \mathbb{P}^c es una contribución de tipo flujo y N^c es una contribución de tipo fuente, ambos dados por efectos colisionales. De esta forma, la Ecuación de Transporte de Enskog (Ec. (2.98)) puede escribirse como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \langle \phi \rangle) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (n \langle \mathbf{c} \phi \rangle + \mathbb{P}^c) - n \left[\left\langle \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \mathbf{c} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \right\rangle + \mathbf{a} \cdot \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{c}} \right\rangle \right] = N^c \quad (2.100)$$

A continuación, se utilizará esta forma de la ecuación de balance para obtener balances de masa, momento y energía en regímenes cinético-colisionales.

Conservación de masa ($\phi = m$):

Para este caso, dado que la masa de cada partícula no depende del t , de \mathbf{r} , ni de \mathbf{c} , y que la misma no se ve alterada por las colisiones, la Ec. (2.100) se reduce a:

$$\frac{\partial}{\partial t} (nm) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (nm \langle \mathbf{c} \rangle) = 0 \quad (2.101)$$

Recordando las Ecs. (2.88) y (2.93), se obtiene:

$$\frac{\partial(\alpha_s \rho_s)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s) = 0 \quad (2.102)$$

Conservación de momento lineal ($\phi = m\mathbf{c}$):

Para este caso, dado que $m\mathbf{c}$ no depende de t ni de \mathbf{r} , los dos primeros términos dentro de los corchetes de la Ec. (2.100) resultan nulos. Por otro lado, el tercer término dentro de los corchetes resulta:

$$-n\mathbf{a} \cdot \left\langle \frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial \mathbf{c}} \right\rangle = -nm\mathbf{a} \cdot \left\langle \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{c}} \right\rangle = -nm\mathbf{a} \quad (2.103)$$

El primer y segundo término de la Ec. (2.100), con $\mathbb{P}^c \equiv \mathbb{T}_s^c$, resultan:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n \langle m\mathbf{c} \rangle) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (n \langle \mathbf{c} \phi \rangle + \mathbb{T}_s^c) = \frac{\partial}{\partial t}(nm \langle \mathbf{c} \rangle) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (nm \langle \mathbf{c} \mathbf{c} \rangle + \mathbb{T}_s^c) \quad (2.104)$$

Aquí se retoma el concepto de *velocidad particular* \mathbf{C} . La misma se define como:

$$\mathbf{C} = \mathbf{c} - \tilde{\mathbf{u}}_s \quad (2.105)$$

Es decir, representa una velocidad relativa de las partículas con respecto a una referencia móvil que se mueve con la velocidad macroscópica del medio $\tilde{\mathbf{u}}_s$.

Reemplazando \mathbf{c} en el primer y segundo término del lado derecho de la Ec. (2.104), se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n \langle m\mathbf{c} \rangle) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (nm \langle \mathbf{c} \mathbf{c} \rangle + \mathbb{T}_s^c) = \frac{\partial}{\partial t}(nm \tilde{\mathbf{u}}_s) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (nm \tilde{\mathbf{u}}_s \tilde{\mathbf{u}}_s + nm \langle \mathbf{C} \mathbf{C} \rangle + \mathbb{T}_s^c) \quad (2.106)$$

Aquí se ha tenido en cuenta que $\langle \tilde{\mathbf{u}}_s \rangle = \tilde{\mathbf{u}}_s$ y que $\langle \mathbf{C} \rangle = \langle \mathbf{c} \rangle - \tilde{\mathbf{u}}_s = \tilde{\mathbf{u}}_s - \tilde{\mathbf{u}}_s = \mathbf{0}$. Luego, se define a la contribución cinética al tensor de tensiones como:

$$\mathbb{T}_s^k = \tilde{\rho} \langle \mathbf{C} \mathbf{C} \rangle \quad (2.107)$$

De esta forma, recordando la Ec. (2.88) y teniendo en cuenta que el momento lineal se conserva durante las colisiones entre partículas (*i.e.* $N^c = 0$), la conservación de momento lineal se reduce a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \tilde{\mathbf{u}}_s) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c) + \alpha_s \rho_s \mathbf{a} \quad (2.108)$$

Conservación de energía ($\phi = \frac{1}{2}m\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}$):

El primer término de la Ec. (2.100) para la energía se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(n \left\langle \frac{1}{2}m\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \right\rangle \right) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2}nm \left\langle \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \right\rangle \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{2}nm \left(\left\langle \mathbf{C} \cdot \mathbf{C} \right\rangle + \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \right) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_s \rho_s \left(\frac{3}{2}\theta + \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \right) \right] \end{aligned} \quad (2.109)$$

donde se ha hecho uso de la definición de temperatura granular dada por la Ec. (2.84) y considerando que los producto punto entre $\langle \mathbf{C} \rangle$ y $\tilde{\mathbf{u}}_s$ promediados resultan nulos dados que $\langle \mathbf{C} \rangle = 0$.

Por otro lado, parte del segundo término de la Ec. (2.100) puede desarrollarse como:

$$\begin{aligned} n \left\langle \frac{1}{2}m\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \right\rangle &= \frac{1}{2}nm \left\langle \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2}nm \left\langle (\mathbf{C} + \tilde{\mathbf{u}}_s) \cdot (\mathbf{C} + \tilde{\mathbf{u}}_s) \right\rangle \\ &= \frac{1}{2}nm \left[\left\langle \mathbf{C} \cdot \mathbf{C} \right\rangle + \left\langle (2\tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{C}) \right\rangle + \left\langle \mathbf{C} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{C} \right\rangle + \left\langle (2\tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{C}) \tilde{\mathbf{u}}_s \right\rangle + \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_s \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \right\rangle \right] \end{aligned} \quad (2.110)$$

Aquí, el tercer y quinto término dentro de los corchetes resultan nulos dado que $\tilde{\mathbf{u}}_s$ pueden salir del operador de promediación y, nuevamente, surge $\langle \mathbf{C} \rangle = 0$. Entonces:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}nm \left[\left\langle \mathbf{C} \cdot \mathbf{C} \right\rangle + \left\langle (2\tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{C}) \right\rangle + \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{C} \right\rangle + \left\langle \tilde{\mathbf{u}}_s \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \right\rangle \right] \\ &= \frac{1}{2}nm \left\langle \mathbf{C} \cdot \mathbf{C} \right\rangle + nm\tilde{\mathbf{u}}_s \left\langle \mathbf{C} \right\rangle + \frac{1}{2}nm\tilde{\mathbf{u}}_s \left\langle \mathbf{C} \cdot \mathbf{C} \right\rangle + \frac{1}{2}nm\tilde{\mathbf{u}}_s \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \\ &= \mathbf{q}_s^k + \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbb{T}_s^k + \frac{3}{2}\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \theta + \frac{1}{2}\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \end{aligned} \quad (2.111)$$

Por otro lado, el tercer término de la Ec. (2.100) se simplifica teniendo en cuenta nuevamente que \mathbf{c} es independiente de t y de \mathbf{r} :

$$\begin{aligned} n \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2}m\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \right) \right\rangle + \left\langle \mathbf{c} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{2}m\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \right) \right\rangle + \mathbf{a} \cdot \left\langle \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} \left(\frac{1}{2}m\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \right) \right\rangle \right] &= \frac{1}{2}nma \cdot \left\langle \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} (\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}) \right\rangle \\ &= \alpha_s \rho_s \mathbf{a} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \end{aligned} \quad (2.112)$$

Los efectos colisionales en la ecuación de energía se modelan como:

$$\mathbb{P}^c = \mathbf{q}^c + \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbb{T}_s^c \quad (2.113)$$

$$N^c = \gamma_s + J_{sg} \quad (2.114)$$

siendo \mathbf{q}^c el flujo de calor por efectos colisionales, γ_s la disipación debida a colisiones inelásticas y J_{sg} la tasa de transferencia de energía fluctuante entre el medio y las partículas.

Finalmente, la ecuación de balance de energía resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_s \rho_s \left(\frac{3}{2} \theta + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \left[\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \left(\frac{3}{2} \theta + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \right) + (\mathbf{q}_s^k + \mathbf{q}_s^c) + \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot (\mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c) \right] \\ - \alpha_s \rho_s \mathbf{a} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s = \gamma_s + J_{sg} \end{aligned} \quad (2.115)$$

Para obtener la ecuación de balance para la energía térmica granular, se debe sustraer de esta ecuación la ecuación de balance de energía cinética. Esta última puede obtenerse multiplicando escalarmente a la Ec. (2.108) por $\tilde{\mathbf{u}}_s$, obteniendo así:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s) = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c) \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s + \alpha_s \rho_s \mathbf{a} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s \quad (2.116)$$

Entonces, realizando la sustracción de la Ec. (2.116) en la Ec. (2.115) y reordenando, se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} \alpha_s \rho_s \theta \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \left(\frac{3}{2} \alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \theta \right) = (\mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c) : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \tilde{\mathbf{u}}_s - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\mathbf{q}_s^k + \mathbf{q}_s^c) + \gamma_s + J_{sg} \quad (2.117)$$

Esta ecuación es conocida como la ecuación de conservación de energía térmica granular, o simplemente *Ecuación de Energía Granular*.

2.4.3. La Ecuación de Energía Granular

Recuperando la forma tensorial de los operadores en las Ecs. (2.102), (2.108) y (2.117), estas resultan:

$$\frac{\partial(\alpha_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s) = 0 \quad (2.118)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \tilde{\mathbf{u}}_s) = - \nabla \cdot (\mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c) + \alpha_s \rho_s \mathbf{a} \quad (2.119)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} \alpha_s \rho_s \theta \right) + \nabla \cdot \left(\frac{3}{2} \alpha_s \rho_s \tilde{\mathbf{u}}_s \theta \right) = (\mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c) : \nabla \tilde{\mathbf{u}}_s - \nabla \cdot (\mathbf{q}_s^k + \mathbf{q}_s^c) + \gamma_s + J_{sg} \quad (2.120)$$

Aquí puede notarse una clara similitud con las ecuaciones de conservación de masa y momento lineal de la fase sólida obtenidas para el Modelo de Dos Fluidos. En efecto, la velocidad macroscópica del medio granular $\tilde{\mathbf{u}}_s$ equivale a la velocidad de sólidos proveniente de técnicas de promediado \mathbf{u}_s . Sin embargo, a diferencia de las ecuaciones obtenidas para dos

fases en la sección anterior, aquí la presión de la fase continua no forma parte del modelado de los tensores de tensiones, siendo:

$$\mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c = -p_s \mathbf{I} + \tau_s = -p_s \mathbf{I} + \lambda_s (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} + \mu_s [\nabla \mathbf{u}_s + (\nabla \mathbf{u}_s)^T] - \frac{2}{3} \mu_s (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \quad (2.121)$$

En este contexto, la compatibilidad entre ambas estrategias se obtiene por medio de la definición de la aceleración \mathbf{a} provocada por la acción de fuerzas externas. En este sentido, Gidaspow [17] considera que la misma puede expresarse como:

$$\alpha_s \rho_s \mathbf{a} = \alpha_s \rho_s \mathbf{g} + K_{sg} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) - \alpha_s \nabla p \quad (2.122)$$

Respecto a los términos del lado derecho de la ecuación de conservación de energía granular (Ec. (2.120)):

1. $(\mathbb{T}_s^k + \mathbb{T}_s^c) : \nabla \tilde{\mathbf{u}}_s$: Representa la producción de energía granular por disipación viscosa. En particular, Gidaspow [17] y Lun *et al.* [22] han propuesto las siguientes modelizaciones para los parámetros reológicos basada en análisis de los efectos cinéticos-colisionales binarios entre partículas.

$$\begin{aligned} p_s &= \rho_s \alpha_s \theta [1 + 2(1 + e)g_0 \alpha_s] \\ \mu_s &= \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10 \rho_s d_p \sqrt{\pi \theta}}{96(1 + e) \alpha_s g_0} \left[1 + \frac{4}{5} g_0 \alpha_s (1 + e) \right]^2 \\ \lambda_s &= \frac{4}{3} \alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \end{aligned} \quad (2.123)$$

siendo e el coeficiente de restitución entre partículas, g_0 el coeficiente de distribución radial y d_p el diámetro de las partículas. Estas modelizaciones consideran que las partículas son idénticas y colisionan entre sí de forma binaria e instantánea, no dando lugar a contactos permanentes y los consecuentes efectos friccionales.

2. $\nabla \cdot (\mathbf{q}_s^k + \mathbf{q}_s^c)$: Representa la disipación de energía granular dada por flujos térmicos granulares de carácter cinético y colisional. El mismo flujo de energía granular \mathbf{q}_s puede modelarse con una ley similar a la Ley de Fourier de forma que: $(\mathbf{q}_s^k + \mathbf{q}_s^c) = -\kappa_s \nabla \theta$, donde κ_s es la conductividad granular.
3. γ_s : Representa la pérdida de energía granular debido a las colisiones inelásticas, por lo cual γ_s es siempre positivo. Este término transforma la energía granular en energía térmica

y a mayor concentración de partículas, mayor es γ_s . En particular, los granos de menor tamaño tienden a producir mayores pérdidas, es por ello que este término resulta crucial en el balance de energía granular, dado que a menor pérdida se tiene mayor temperatura granular produciendo así una menor viscosidad granular.

4. J_{sg} : Representa la tasa de transferencia de energía fluctuante entre la fase continua y las partículas. El mismo contempla la ganancia de energía granular debido a energía turbulenta de la fase continua y las pérdidas de energía fluctuante granular debido a fricciones entre ambas fases.

La distintas modelizaciones de los parámetros aquí presentados se detallan en el Apéndice A.

La forma final de la ecuación de energía granular resulta:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \theta) + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{u}_s \theta) \right] = (-p_s \mathbf{I} + \tau_s) : \nabla \mathbf{u}_s - \nabla \cdot (k_s \nabla \theta) + \gamma_s + J_{sg} \quad (2.124)$$

La incorporación de esta ecuación al Modelo de Dos Fluidos (dado por las Ecs. (2.60) a (2.65)) resulta en un sistema de ecuaciones matemáticamente cerrado para un régimen de partículas en baja concentración, donde los parámetros reológicos se pueden definir en función de la temperatura granular.

2.5. Teoría Friccional (FT)

Cuando la fase de partículas se encuentra en elevadas concentraciones, las partículas se mantienen en permanente contacto deslizando, rozando y rotando una sobre la otra. En estas condiciones, el modelo cinético-colisional basado en las ecuaciones de Boltzmann y Enskog, bajo la hipótesis de que las colisiones son binarias e instantáneas, deja de ser aplicable. Esto induce la necesidad de desarrollar un modelo para el tensor de tensiones basada en las leyes mecánicas de fricción. Para lograr esto, se aplicarán conceptos de la teoría de plasticidad y teorías de estado crítico. En principio, la ley de fluencia de Mohr-Coulomb/von Mises puede ser usada en el marco de la teoría de plasticidad, sin embargo, como se verá más adelante, esta ley solo describe el comienzo de la fluencia y resulta inadecuada para describir la deformación de materiales granulares.

Los principales aportes al desarrollo de esta teoría han sido realizados por Jenkins *et al.* [62], Johnson y Jackson [25], Schaeffer [26], Tardos [63], Sinclair y Jackson [64]. Muchos de estos conceptos han sido formalizados en la tesis doctoral de Darteville [65]

2.5.1. El tensor de tensiones para régimen friccional

Recordando la Ec. (2.83), la contribución friccional al tensor de tensiones puede expresarse como:

$$\mathbb{T}_s^f = p_s^f \mathbf{I} + 2\mu_s^f \left\{ \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u}_s + (\nabla \mathbf{u}_s)^T] + \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \right\} - \lambda_s^f (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \quad (2.125)$$

De esta expresión resulta evidente la necesidad de dar una definición para μ_s^f , p_s^f y λ_s^f .

Se comienza definiendo un tensor de tensiones genérico en un sistema coordenado Cartesiano 3D como:

$$\mathbb{T} = \begin{bmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{yx} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{zx} & T_{zy} & T_{zz} \end{bmatrix}$$

Donde las componentes T_{xx} , T_{yy} y T_{zz} son las componentes normales de tensión y el resto son componentes de corte. Además, dado que el tensor de tensiones debe ser simétrico, se verifica que $T_{ij} = T_{ji}$, $\forall i \neq j$.

El tensor generalizado se puede descomponer en dos contribuciones:

$$\mathbb{T} = \mathring{\mathbb{T}} + \hat{\mathbb{T}} \quad (2.126)$$

donde $\mathring{\mathbb{T}} = \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbb{T}) \mathbf{I}$ es el tensor esférico y $\hat{\mathbb{T}}$ es el tensor deviatorico.

Utilizando estas definiciones sobre el tensor de tensiones friccional, se puede expresar:

$$\begin{aligned} \mathring{\mathbb{T}}_s^f &= p_s^f \mathbf{I} - \lambda_s^f (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \\ \hat{\mathbb{T}}_s^f &= 2\mu_s^f \hat{\mathbb{D}}_s^f = 2\mu_s^f \left(\hat{\mathbb{D}}^f - \frac{1}{3} I_D \mathbf{I} \right) \end{aligned} \quad (2.127)$$

donde $\hat{\mathbb{D}}_s^f$ es la parte deviatorica del tensor tasa de deformación \mathbb{D}_s^f , que se define como $\mathbb{D}_s^f = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u}_s + (\nabla \mathbf{u}_s)^T]$ y I_D es el primer invariante del tensor tasa de deformación definido como $I_D = (\nabla \cdot \mathbf{u}_s)$.

Como se verá más adelante, la viscosidad friccional tiene una fuerte dependencia con el gradiente de velocidades, lo cual implica que la reología del material granular es no-Newtoniana.

2.5.2. Condición de fluencia de von Mises aplicada a materiales granulares

A continuación se describen algunos estados de sollicitaciones particulares para introducir la ley de Mohr-Coulomb aplicado a un material granular. Para ello, se comienza analizando un estado de carga bidimensional como se muestra en la Fig. 2.5. Aquí, ψ el ángulo entre los ejes del marco de referencia coordenado X y el eje principal de deformación \mathbf{n}_1 . Se puede escribir:

$$\mathbb{T} = \begin{bmatrix} T_{xx} & 0 & T_{xz} \\ 0 & T_{yy} = \sigma_2 & 0 \\ T_{zx} & 0 & T_{zz} \end{bmatrix}$$

además, la tensión normal promedio y a la tensión de corte se define como:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} &= \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{2} \\ \tau &= \frac{\sigma_1 - \sigma_3}{2} \end{aligned} \quad (2.128)$$

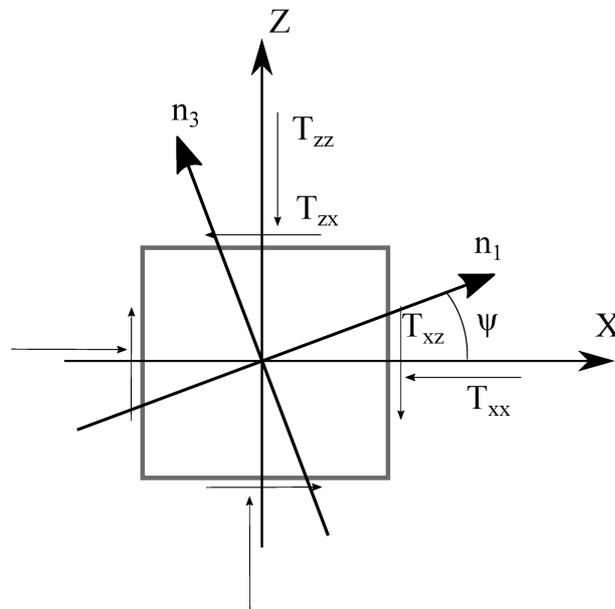


Figura 2.5: Cubo elemental sometido a un estado de tensiones bidimensional

Haciendo uso de estas expresiones, las componentes del tensor de tensiones resultan:

$$\begin{aligned}
 T_{xx} &= \bar{\sigma} + \tau \cos(2\psi) \\
 T_{zz} &= \bar{\sigma} - \tau \cos(2\psi) \\
 T_{yy} &= \sigma_2 \\
 T_{xz} &= T_{zx} = \tau \operatorname{sen}(2\psi)
 \end{aligned}
 \tag{2.129}$$

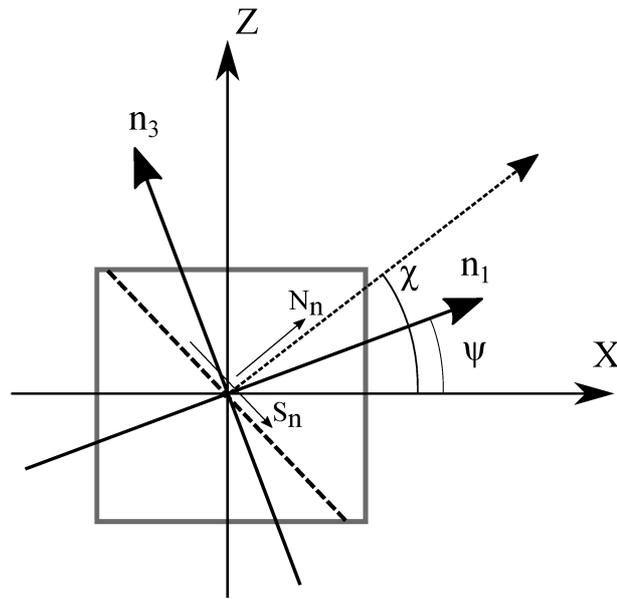


Figura 2.6: Cubo elemental sometido a tensiones y planos principales

Entonces, sobre un dado plano se tienen las siguientes tensiones principales (Fig. 2.6):

$$\begin{aligned}
 N &= \bar{\sigma} + \tau \cos[2(\chi - \psi)] \\
 S &= \tau \operatorname{sen}[2(\chi - \psi)]
 \end{aligned}
 \tag{2.130}$$

Este par de ecuaciones describe un círculo centrado en el punto $(\bar{\sigma}, 0)$ y de radio τ . Introduciendo los parámetros $k = N \frac{\tau}{\bar{\sigma}} \operatorname{sen}(\phi)$ y $\phi = 2(\chi - \psi)$, las Ecs. (2.130) pueden reescribirse en:

$$S = k + N \tan(\phi)
 \tag{2.131}$$

En el contexto de un material granular, el parámetro k puede asimilarse como una propiedad material que describe el estado de cohesión de las partículas, mientras que el ángulo de fricción interna ϕ representa el ángulo de reposo de una pila de partículas sólidas (Fig. 2.7).

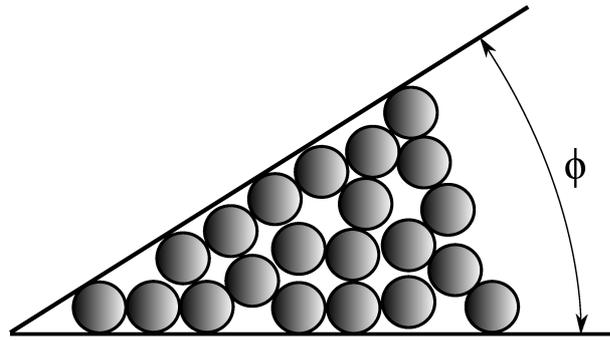


Figura 2.7: Ángulo de reposo o fricción interna

Este ángulo de reposo es pequeño cuando las partículas son esféricas, grandes y suaves, mientras que es grande cuando las partículas son rugosas y finas. Comúnmente varía entre 15° y 45° y, para un dado tipo de partícula, se asume aproximadamente constante. Además, la mayor parte de los materiales granulares no tienen cohesión, por tanto $k = 0$.

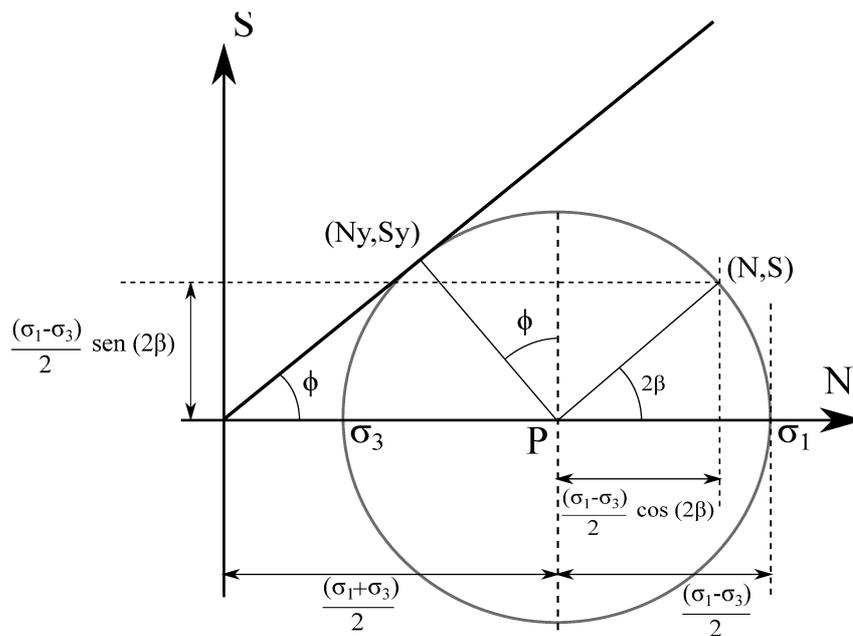


Figura 2.8: Círculo de Mohr-Coulomb en el plano S-N

La ley de Mohr-Coulomb, expresada a través de la Ec. (2.131), es una ley que relaciona linealmente los esfuerzos tangenciales (S) y normales (N). Esta línea representa la condición de fluencia. Por debajo de esta línea, el material responderá como un sólido rígido y no sufrirá deformaciones. Si la tensión de corte se incrementa para de una dada tensión normal constante de modo de estar sobre la línea de fluencia, entonces se da comienzo a la deformación plástica.

Cuando se alcanza el estado antes mencionado, las partículas comienzan a deslizar una sobre otra. Para la generalidad de los casos mencionados, se tiene:

$$S - N \tan(\phi) \leq 0 \quad (2.132)$$

Estos estados pueden entenderse mediante el círculo de Mohr en la Fig. 2.8. En base a relaciones trigonométricas, la Ec. (2.132) puede expresarse como:

$$\tau - \bar{\sigma} \operatorname{sen}(\phi) \leq 0 \quad (2.133)$$

Esta es otra forma de expresar la condición de fluencia de Mohr-Coulomb. El deslizamiento entre partículas va a ocurrir si y solo si se verifica la igualdad en la Eq. (2.133). Es decir, si se cumple:

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_3} = \frac{1 + \operatorname{sen}\phi}{1 - \operatorname{sen}\phi} \quad (2.134)$$

Esta condición puede representarse gráficamente en base a las tensiones σ_1 y σ_3 , como se muestra en la Fig. 2.9.

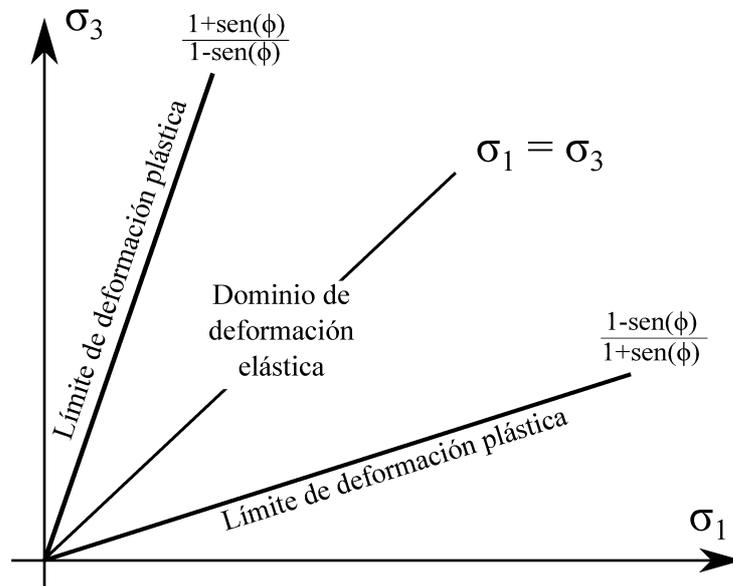


Figura 2.9: Dominio de deformación elástica en 2D

Hasta el momento se ha asumido que la condición de sollicitación es tal que $T_{yy} = \sigma_2$, es decir, que la condición de fluencia resulta independiente de lo que ocurra en el plano perpendicular a la sollicitación. Esto puede no ser válido para ciertos materiales granulares,

es por ello que se plantearán alternativas para la condición de fluencia contemplando los efectos en las tres direcciones Cartesianas.

Entonces, se puede redefinir el tensor de tensiones normal promedio $\bar{\sigma}$ y el tensor de tensiones tangenciales como:

$$\bar{\sigma} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3}{3}$$

$$\tau = \frac{\sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2}}{3} \quad (2.135)$$

En analogía con la ley de Mohr-Coulomb, el límite de fluencia para condiciones generalizadas puede expresarse como:

$$\tau = \sqrt{\frac{2}{3}} \bar{\sigma} \text{sen}(\phi) \quad (2.136)$$

Esta condición de fluencia es conocida como el *Criterio de von Mises* y su representación gráfica puede apreciarse en la Fig. 2.10.

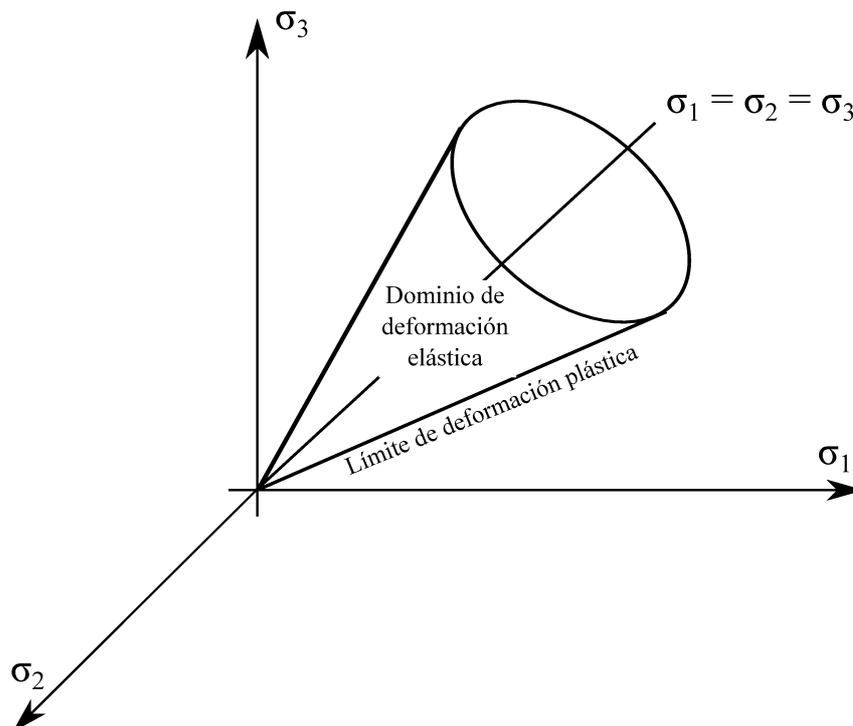


Figura 2.10: Dominio de deformación elástica en 3D

2.5.3. Teoría de Plasticidad aplicada a materiales granulares

Se ha planteado la condición de fluencia de von Mises en el contexto de materiales granulares, pero no se ha considerado la dinámica de las partículas en estas condiciones. La teoría de plasticidad permite determinar el campo de velocidades de la fase granular vinculando las tensiones y las deformaciones. Para lograr esto, se introducen los siguientes conceptos: Función de fluencia (Y), función de potencial plástico (G) y la Regla de Flujo. Recordando las Ecs. (2.135) y (2.136), podemos expresar la función de fluencia como:

$$Y = I_{2D} - \bar{\sigma}^2 [\text{sen}(\phi)]^2 \quad (2.137)$$

donde I_{2D} es el segundo invariante del deviatorico del tensor de tensiones \mathbb{T}_s y se define como
$$I_{2D} = \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2}{6}.$$

Por otro lado, la función potencial plástico G puede definirse a partir del tensor de deformaciones \mathbb{D}_s siendo:

$$\mathbb{D}_{s,ij} = q \frac{\partial G}{\partial \mathbb{T}_{s,ij}} \quad (2.138)$$

donde q es un escalar positivo que depende de las condiciones del flujo. La Ec. (2.138) puede expresarse por medio de los ejes principales como:

$$\mathbb{D}_{s,i} = q \frac{\partial G}{\partial \sigma_i} \quad (2.139)$$

La Regla de Flujo [26] relaciona la función potencial plástico con la función de fluencia de modo que $G = Y$. Entonces:

$$\mathbb{D}_{s,i} = q \frac{\partial Y}{\partial \sigma_i} \quad (2.140)$$

Luego, aplicando la Ec. (2.137) sobre esta expresión, resulta:

$$\mathbb{D}_{s,i} = q \left\{ (\sigma_i - \bar{\sigma}) - \frac{2}{3} \bar{\sigma} [\text{sen}(\phi)]^2 \right\} \quad (2.141)$$

Esta ecuación puede expresarse en forma tensorial como:

$$\mathbb{D} = q \hat{\mathbb{T}} - \frac{2}{3} q \bar{\sigma} [\text{sen}(\phi)]^2 \mathbf{I} \quad (2.142)$$

Finalmente, haciendo uso de la modelización propuesta por la Ec. (2.127) sobre la Ec. (2.142), se arriba a la expresión:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_s = 2 q \bar{\sigma} [\text{sen}(\phi)]^2 \quad (2.143)$$

En la Ec. (2.143) se observa que, ante un estado de tensiones, el material granular se expande sin límites, lo cual es físicamente incorrecto. La inconsistencia radica en el uso de una ley de tipo von Mises para caracterizar el estado de tensiones. Esto plantea la necesidad de desarrollo de modelos alternativos aplicables a flujos granulares, dando lugar a la teoría de estado crítico.

2.5.4. Teoría de Estado Crítico

La teoría de estado crítico surge del estudio de mecánica de suelos y busca representar adecuadamente la relación entre las tensiones normales y tangenciales para materiales constituidos por partículas sólidas [66].

Se comienza considerando un experimento idealizado (ver Fig. 2.11) donde dos planos, uno móvil y otro fijo, se encuentran separados por una capa de material granular. El plano superior se mueve de modo de generar una tensión de corte S y una deformación γ de la capa granular. El material tiene una densidad de partículas constante (ρ_0) y una tensión normal constante N . Además, se asume que todo el material se deforma plásticamente, es decir, no vuelve a su estado inicial una vez que se deja de aplicar la carga.

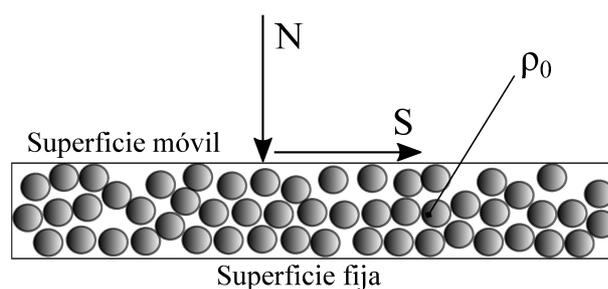


Figura 2.11: Experimento de deformación de material granular por cizallamiento

Se pueden encontrar dos tipos de comportamientos de acuerdo a la carga normal y a la densidad de granos: *dilatación* y *consolidación*.

La *dilatación* se presenta cuando la densidad es alta y la carga normal es baja. En estas condiciones, para lograr una deformación del material granular, hay que alcanzar un estado

de tensiones crítico S_c , luego del cual, se obtiene una deformación permanente disminuyendo asintóticamente el esfuerzo de corte hasta alcanzar un valor constante S_f como se puede apreciar en la Fig. 2.12. Normalmente la deformación del material se da en una capa muy fina y las capas cercanas a ambas paredes se mantienen en movimiento junto con la pared superior o en reposo junto a la pared inferior (Fig. 2.12). Si se grafican los esfuerzos tangenciales en función de los esfuerzos normales necesarios para alcanzar la condición de dilatación, para cada valor de densidad se tendrá una curva como la que se muestra en la Fig. 2.12. A esta curva se la conoce como *curva de falla*.

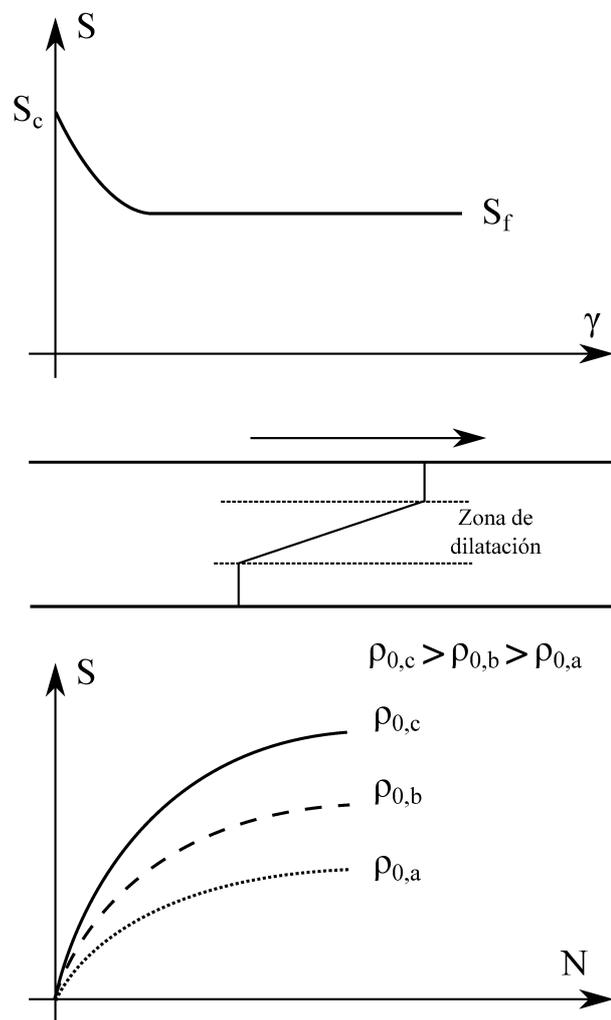


Figura 2.12: Diagrama de tensiones para distintas densidades de partículas en *dilatación* y su curva de falla.

Por otro lado, la *consolidación* se presenta cuando la densidad es baja y la carga normal es alta. En estas condiciones, las deformaciones del material comienzan cuando se alcanza un

valor de tensiones de corte crítico S_c , por encima del cual, dicha tensión debe aumentar para mantener el crecimiento constante de la tasa de deformación hasta alcanzar un valor límite constante S_f (ver Fig. 2.13). Aquí, la zona de deformación del material abarca todo el espesor de la capa granular. La relación entre tensiones de corte y normales hasta alcanzar la condición de consolidación puede apreciarse en la Fig. 2.13 para distintos valores de densidades.

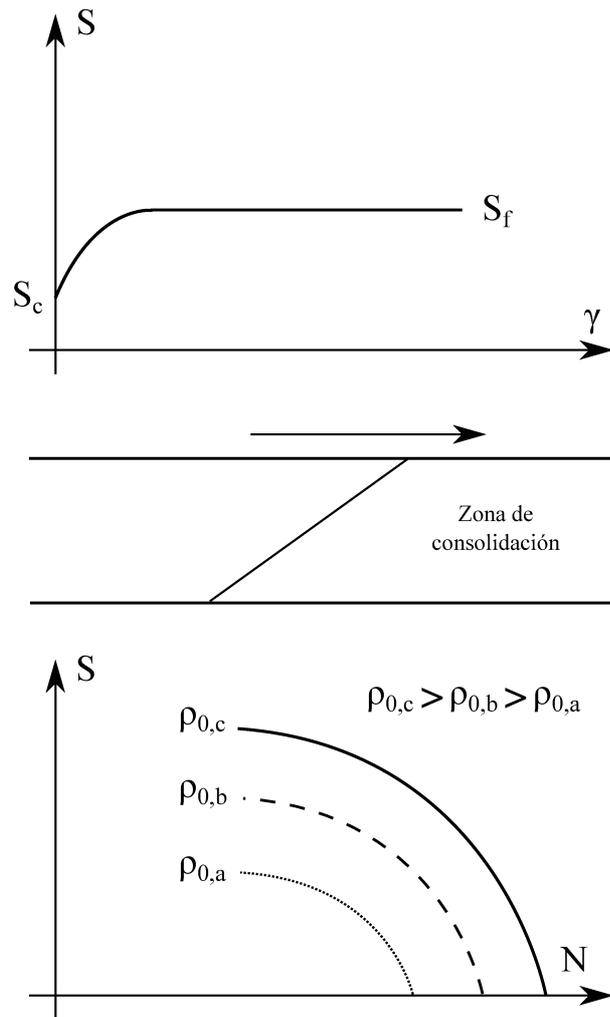


Figura 2.13: Diagrama de tensiones para distintas densidades de partículas en *consolidación* y su curva de falla

Para una dada densidad, pueden obtenerse estados de dilatación y consolidación. Estos comportamientos pueden apreciarse en la Fig. 2.14. Allí se define el *Estado Crítico* como los puntos para cada densidad donde $\frac{\partial \tau}{\partial \langle \sigma \rangle} = 0$.

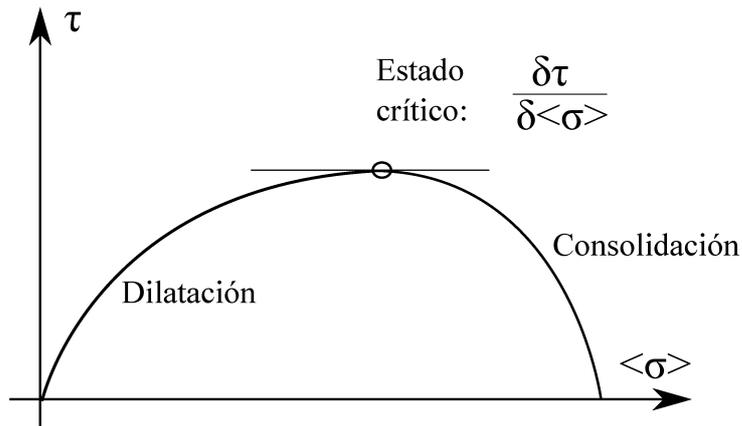


Figura 2.14: Diagrama de tensiones y estado crítico

Si se considera un estado de concentración ρ_0 y una tensión normal por encima del valor de tensiones normales del estado crítico, partiendo de un estado inicial X , como se aprecia en la Fig. 2.15, no existirán deformaciones hasta no alcanzar una tensión de corte correspondiente al punto Y de la gráfica. A partir de allí, el comportamiento de deformación será del tipo *consolidación*, donde para mantener la tasa de deformación deberá aumentarse la tensión de corte y, consecuentemente, manteniendo la tensión normal constante, crecerá la densidad comprimiendo y reforzando el material granular hasta alcanzar el punto Z donde se alcanza el estado crítico.

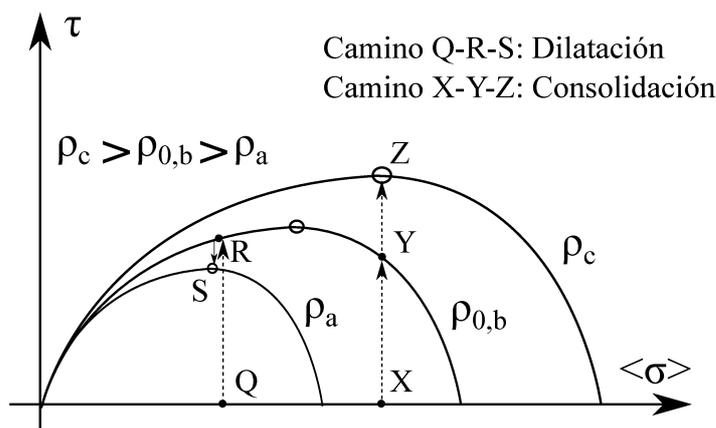


Figura 2.15: Diagrama de falla para distintas densidades en el plano $\tau - \langle \sigma \rangle$

Análogamente se puede analizar el estado de deformación gráficamente en un diagrama $\sigma_1 - \sigma_3$ como puede apreciarse en la Fig. 2.16

Por otro lado, si se parte del punto Q , en donde la tensión normal (que se mantendrá

constante en el experimento) es menor de la tensión normal crítica para ese ρ_0 , el material no se deformará hasta alcanzar el valor de tensiones de corte correspondiente al punto R . Allí, el estado de deformaciones es del tipo *dilatación* y el material fluirá plásticamente hasta alcanzar el estado crítico para esa dada tensión normal en el punto S .

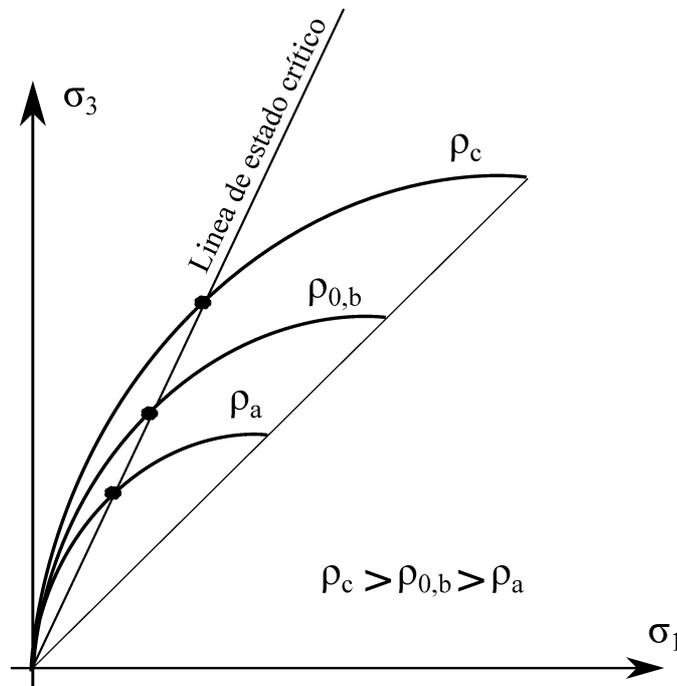


Figura 2.16: Diagrama de falla para distintas densidades en el plano σ_1 - σ_3

2.5.5. Leyes constitutivas para estados friccionales

Aquí se puede apreciar que los comportamientos reales de los materiales granulares vistos en la sección anterior son claramente distintos a lo descrito por la función de fluencia de von Mises. Nuevamente vale mencionar que se busca relacionar el tensor tasa de deformación con el tensor de tensiones en condiciones de fluencia. Para ello, se dispone de la Regla de Flujo y una expresión para la tasa de deformación en función del campo de velocidades. Resta definir una función de fluencia que describa de forma adecuada el comportamiento experimental del material granular presentado en la sección anterior.

Pitman *et al.* [67] han propuesto la siguiente función para describir dicho comportamiento:

$$Y = I_{2D} + [\text{sen}(\phi)]^2 \left[(\bar{\sigma} - p_s^f)^2 - (p_s^f)^2 \right] \quad (2.144)$$

Para este caso, la función potencial plástico Ec. (2.140) para la función de fluencia propuesta

Ec. (2.144) resulta:

$$\mathbb{D}_i = q \left\{ (\sigma_i - \bar{\sigma}) - \frac{2}{3}(\bar{\sigma} - p_s^f)[\text{sen}(\phi)]^2 \right\} \quad (2.145)$$

Considerando nuevamente la modelización del tensor de tensiones friccional dada por la Ec. (2.127), se tiene:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_s = 2 q (\bar{\sigma} - p_s^f)[\text{sen}(\phi)]^2 \quad (2.146)$$

A diferencia de la expresión dada por la Ec. (2.143), la divergencia del campo \mathbf{u}_s no será necesariamente positiva. Esta tomará valores positivos o negativos de acuerdo al signo de $(\bar{\sigma} - p_s^f)$, alcanzando el estado crítico cuando $\bar{\sigma} = p_s^f$.

De este análisis, en analogía con lo desarrollado para la teoría de plasticidad de von Mises, resulta que:

$$q = \frac{\sqrt{4 I_{2D} \text{sen}(\phi)^2 + (\nabla \cdot \mathbf{u}_s)^2}}{2 p_s^f \text{sen}(\phi)^2} \quad (2.147)$$

De esta forma, se puede expresar las viscosidades μ_s^f y λ_s^f como:

$$\lambda_s^f = \frac{p_s^f}{\sqrt{4 I_{2D} \text{sen}(\phi)^2 + (\nabla \cdot \mathbf{u}_s)^2}} \quad (2.148)$$

$$\mu_s^f = \frac{p_s^f \text{sen}(\phi)^2}{\sqrt{4 I_{2D} \text{sen}(\phi)^2 + (\nabla \cdot \mathbf{u}_s)^2}} \quad (2.149)$$

Como puede observarse, mediante el uso de esta función para la viscosidad, el tensor de tensiones friccional resulta independiente de la tasa de deformación.

Schaeffer [26] ha argumentado que si las condiciones son de altas concentraciones de partículas, la función de fluencia de von Mises resulta muy próxima al comportamiento real. En estas condiciones, esta función resulta aceptable y la viscosidad puede expresarse como:

$$\mu_s^f = \frac{p_s^f \text{sen}(\phi)}{\sqrt{I_{2D}}} \quad (2.150)$$

Esta es la forma más simplificada de definir adecuadamente la viscosidad friccional de la fase sólida. Otros autores han continuado los desarrollos a partir de la forma más general dada por la Ec. (2.149) [68, 69, 63]. En cualquier caso, se debe proponer una definición para la presión sólida friccional, la cual en general resulta dependiente de la concentración de partículas. A continuación se presentan algunas de las alternativas más utilizadas en la literatura para la modelización del par $\mu_s^f - p_s^f$.

Modelo I: Johnson y Jackson [25] propusieron un modelo para los esfuerzos normales por efectos friccionales dado por:

$$p_s^f = Fr \frac{(\alpha_s - \alpha_{s,\min})^\eta}{(\alpha_{s,\max} - \alpha_s)^P} \quad (2.151)$$

donde $Fr = 0,05$, $\eta = 2$ y $P = 5$. Además, $\alpha_{s,\min}$ es la fracción de volumen mínima para la que comienzan a ocurrir efectos friccionales.

Este modelo además considera que los efectos colisionales y friccionales son aditivos:

$$\begin{aligned} p_s &= p_s^{KTGF} + p_s^f \\ \mu_s &= \mu_s^{KTGF} + \mu_s^f \end{aligned} \quad (2.152)$$

donde la viscosidad friccional se define sencillamente como:

$$\mu_s^f = 0,5 p_s^f \text{sen}(\phi) \quad (2.153)$$

Esta modelización es primitiva y no contempla los efectos del segundo invariante del tensor deviatorico I_{2D} .

Modelo II: Syamlal *et al.* [70] propusieron un modelo que aísla la contribución de los efectos friccionales y cinético-colisionales para el tensor de tensiones sólido:

$$(p_s, \mu_s) = \begin{cases} (p_s^{KTGF}, \mu_s^{KTGF}), & \text{si } \alpha_s < \alpha_{s,\min} \\ (p_s^f, \mu_s^f), & \text{si } \alpha_s \geq \alpha_{s,\min} \end{cases} \quad (2.154)$$

donde la modelización de μ_s^f está dada por la Ec. (2.150). Para este modelo, Syamlal *et al.* asume una función para la presión de sólido que permita un dado nivel de compresibilidad. La misma está dada por:

$$p_s^f = 10^{25} (\alpha_s - \alpha_{s,\min})^{10} \quad (2.155)$$

Modelo III: Este modelo hace uso del método aditivo para definir los parámetros reológicos, utilizando la presión de sólidos del Modelo I y una viscosidad siguiendo el modelo de Schaeffer dado por la Ec. (2.150).

Modelo IV: Este modelo sigue el trabajo de Srivastava y Sundaresan [69], el cual es similar al Modelo III pero variando la definición de la viscosidad de sólido friccional. En este caso, la

tasa de deformación se ve modificada siguiendo el trabajo de Savage [71], quien observó que la tensión de corte en ensambles de granos se ve disminuida por la presencia de fluctuaciones asociadas a la formación de capas de corte incluso en condiciones de flujo cuasi-estáticas. Para contemplar este efecto, se agrega un término extra al modelo propuesto por Schaeffer de modo que:

$$\mu_s^f = 0,5 p_s^f \left(I_{2D} + \frac{\theta}{d_p^2} \right)^{-1/2} \text{sen}(\phi) \quad (2.156)$$

2.6. Formulación cerrada para sistemas de gas y partículas

La forma final del Modelo de Dos Fluidos para un sistema de gas y partículas, haciendo uso de todos los desarrollos del capítulo resulta:

$$\alpha_s + \alpha_g = 1 \quad (2.157)$$

$$\frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_s \mathbf{u}_s = 0 \quad (2.158)$$

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_g \mathbf{u}_g = 0 \quad (2.159)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \mathbf{u}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) = -\frac{\alpha_s}{\rho_s} \nabla p - \frac{1}{\rho_s} \nabla p_s + \nabla \cdot \alpha_s \boldsymbol{\tau}_s + \alpha_s \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_s} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) \quad (2.160)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\frac{\alpha_g}{\rho_g} \nabla p + \nabla \cdot \alpha_g \boldsymbol{\tau}_g + \alpha_g \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_g} (\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_g) \quad (2.161)$$

$$\frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \theta) + \frac{3}{2} \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{u}_s \theta) = (-p_s \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_s) : \nabla \mathbf{u}_s - \nabla \cdot (\kappa_s \nabla \theta) + \gamma_s + J_{sg} \quad (2.162)$$

donde:

$$p_s = p_s^{KTGF} + p_s^f \quad (2.163)$$

$$\boldsymbol{\tau}_s = 2(\mu_s^{KTGF} + \mu_s^f) \left\{ \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u}_s + (\nabla \mathbf{u}_s)^T] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \right\} + \lambda_s^{KTGF} (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \quad (2.164)$$

$$\boldsymbol{\tau}_g = 2\mu_g \left\{ \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u}_g + (\nabla \mathbf{u}_g)^T] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}_g) \mathbf{I} \right\} \quad (2.165)$$

y, además, los parámetros reológicos de la teoría cinético-colisional (μ_s^{KTGF} , p_s^{KTGF} , λ_s^{KTGF} , κ_s , γ_s , J_{sg}), de la teoría friccional (μ_s^f , p_s^f) y coeficientes de arrastre (K_{sg}) son definidos en función de las variables primarias del problema (α_s , α_g , \mathbf{u}_s , \mathbf{u}_g , p y θ) de acuerdo a los modelos presentados a lo largo de este capítulo.

*“Remember that all models are wrong;
the practical question is how wrong do
they have to be to not be useful.”*

– George P. E. Box (1919 - 2013)

Capítulo 3

El Método de Volúmenes Finitos para flujos de gas y partículas

El Método de Volúmenes Finitos (FVM) es un método numérico que, al igual que el Método de Diferencias Finitas (FDM) o el Método de Elementos Finitos (FEM), permite llevar un sistema de ecuaciones en derivadas parciales (que comúnmente describen un determinado fenómeno de transporte sobre un medio continuo) a un sistema de ecuaciones algebraicas de forma aproximada, cuya resolución es abordable por vías computacionales. El origen de este método se encuentra fuertemente vinculado al tipo de aplicaciones que busca abordar: la resolución de fenómenos de transporte en fluidos. El Método de Volúmenes Finitos hace énfasis en cantidades integradas en volúmenes y flujos a través de caras con una clara analogía física de tanques (celdas) y caños comunicantes (caras). El método data de finales de 1960 con los avances realizados en simultáneo por el grupo liderado por Spalding en el Imperial College of London (IC) [72, 34, 73], el grupo liderado por Harlow en Los Alamos National Laboratory (LANL) [74] y los métodos de proyección propuestos por Chorin [75, 76]. La teoría de FVM ha sido formalizada más recientemente en los trabajos de Ferziger [5], Versteeg [4], Hirsch [77], Leveque [30] y en la tesis doctoral de Jasak [78] y Márquez Damian [79].

Este capítulo busca sentar bases sólidas del Método de Volúmenes Finitos aplicado al modelo de gas y partículas, haciendo énfasis en los métodos de acoplamiento entre la presión y las velocidades de cada fase, y su implementación computacional.

3.1. Discretización por el Método de Volúmenes Finitos

El Método de Volúmenes Finitos (FVM) consiste en realizar balances de propiedades en un determinado volumen de control. De forma general, podemos expresar el balance integral de una cantidad genérica $(\rho \psi)$ en un volumen Ω de la siguiente forma:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi) d\Omega + \int_{\Gamma} \rho \psi \mathbf{u} \cdot d\mathbf{\Gamma} = + \int_{\Omega} S_{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{S}_{\Gamma} \cdot d\mathbf{\Gamma} \quad (3.1)$$

donde Γ es la frontera del dominio Ω , $d\mathbf{\Gamma}$ es el vector diferencial normal a la frontera y S_{Ω} y \mathbf{S}_{Γ} son las fuentes de volumen y de superficie de la cantidad $(\rho \psi)$ (cuyo orden tensorial no se especifica para mantener la generalidad del análisis). En la Ec. (3.1) se plantea que la variación temporal de la cantidad dentro del dominio Ω es igual a la suma de las ganancias o pérdidas de esta cantidad dentro del dominio debido a su transporte por convección y a su creación o destrucción por las fuentes de volumen y superficie.

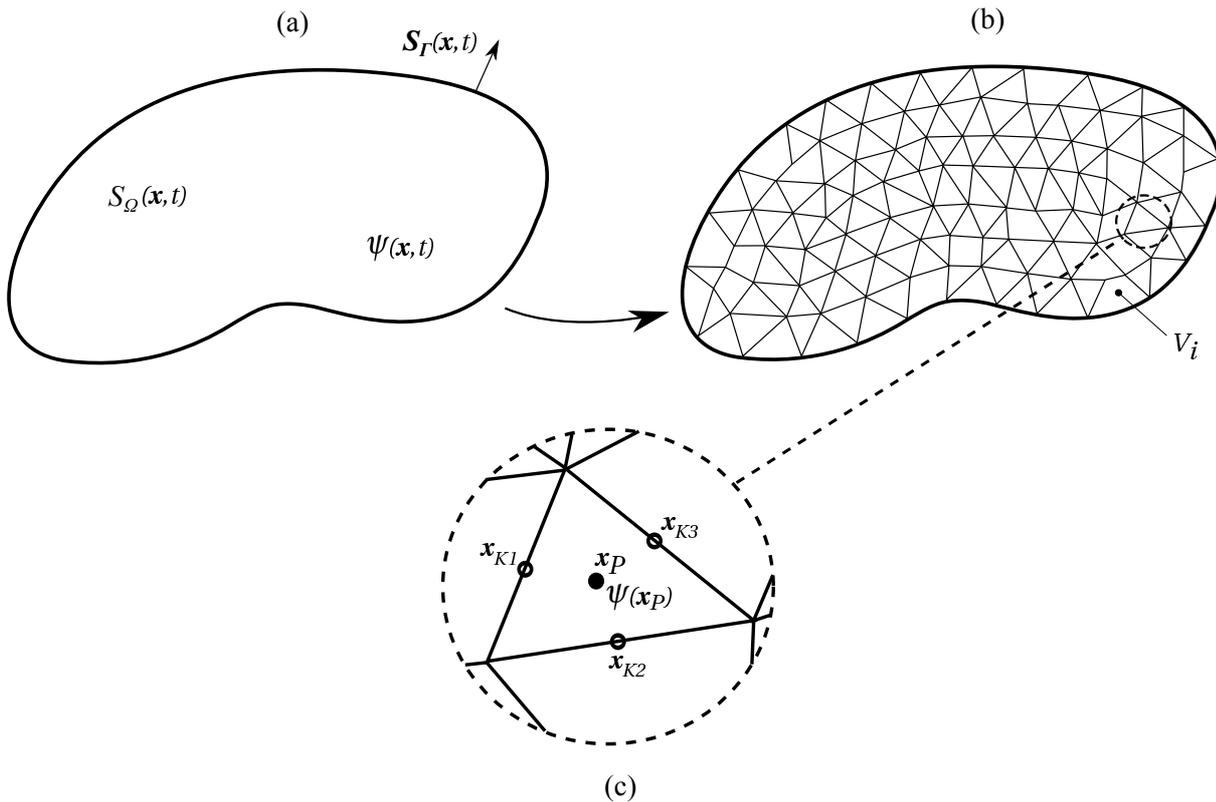


Figura 3.1: Esquema 2D de discretización: (a) Volumen de control continuo, (b) Discretización del dominio en celdas, (c) Celda aislada donde se realiza un balance integral discreto.

Mediante el FVM, el dominio Ω se discretiza en un conjunto de celdas V_i sin solapamientos

y ocupando aproximadamente la totalidad del dominio original Ω , como se aprecia en la Fig. 3.1. En el caso de utilizar celdas poliédricas, el balance de la propiedad genérica $(\rho \psi)$ de la Ec. (3.1) se reduce a:

$$\int_{V_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi) dV + \int_{\partial V_i} \rho \psi \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} = \int_{V_i} S_{V_i} dV + \int_{\partial V_i} \mathbf{S}_{\partial V_i} \cdot d\mathbf{S} \quad , \forall V_i \in \Omega \quad (3.2)$$

donde $d\mathbf{S}$ es el vector diferencial normal a la frontera de cada celda V_i .

Dado que las celdas son poliédricas, la superficie exterior puede subdividirse en cada una de sus caras K_i y así el balance sobre la celda resulta:

$$\int_{V_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi) dV + \sum_{K_i \in \partial V_i} \int_{K_i} \rho \psi \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} = \int_{V_i} S_{V_i} dV + \sum_{K_i \in \partial V_i} \int_{K_i} \mathbf{S}_{K_i} \cdot d\mathbf{S} \quad , \forall V_i \in \Omega \quad (3.3)$$

Por cada una de las celdas, se debe verificar la Ec. (3.3).

En el Método de Volúmenes Finitos colocados en centro de celdas [78], todas las incógnitas se localizan en el centroide o baricentro geométrico \mathbf{x}_P de la celda P . Este verifica:

$$\int_{V_i} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV = 0 \quad (3.4)$$

Ahora bien, para lograr resolver el balance de forma computacional, debemos llevar al conjunto de ecuaciones de balance dados por la Ec. (3.3) a un sistema lineal de la forma:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\psi} = \mathbf{b} \implies \sum_j a_{ij} \psi_j = b_i \quad (3.5)$$

donde a_{ij} son los coeficientes que afectan a cada valor de celda ψ_j en el balance de la celda V_i , ψ_j es el valor ψ en la celda j y b_i son los elementos del vector de términos independientes provenientes de la discretización. El sistema de ecuaciones definido en la Ec. (3.5) es un sistema lineal de n ecuaciones con n incógnitas. En este sentido, el balance de la cantidad ψ sobre el volumen de control delimitado por la celda V_i relaciona solamente los valores discretizados de ψ pertenecientes a la celda V_i y a sus celdas vecinas. Las celdas vecinas a V_i son aquellas que comparten una o más caras. A estas celdas también se las denomina comúnmente como primeros vecinos. En consecuencia el balance discreto sobre cada una de las celdas V_i puede expresarse como

$$a_{ii} \psi_i + \sum_m a_{im} \psi_m = b_i \quad , \forall V_i \in \Omega, \quad (3.6)$$

donde el subíndice m identifica las celdas vecinas a V_i .

La metodología general para arribar al sistema de ecuaciones algebraico dado por la Ec. (3.6) involucra la resolución de forma discreta de la integral de volumen de ψ dentro de una celda dada. Para ello, el FVM propone una discretización de segundo orden en el espacio que resulta de truncar la serie de Taylor para el centro de celda V_i en el término lineal. De forma general, se pueden expresar las integrales sobre el volumen de una celda como:

$$\begin{aligned} \int_{V_i} \phi(x) dV &\approx \int_{V_i} [\phi(\mathbf{x}_P) + (\Delta \mathbf{x})^T \cdot \nabla \phi] dV \\ &= \phi(\mathbf{x}_P) \int_{V_i} dV + \left[\int_{V_i} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^T dV \right] \cdot \nabla \phi \\ &= \phi(\mathbf{x}_P) V_i \end{aligned} \quad (3.7)$$

Análogamente, las integrales de superficie sobre las caras resultan:

$$\int_{K_i} \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{dS} \approx \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_{K_i}) S_{K_i} \quad (3.8)$$

donde ϕ es un campo escalar genérico y $\boldsymbol{\xi}$ es un campo vectorial genérico. La extensión de estas aproximaciones para cada término de balance de masa y momento lineal (con los correspondientes operadores de derivación espacial y temporal) por medio del FVM en mallas colocadas, se describe extensamente en las tesis doctorales de H. Jasak [78] y S. Marquez Damian [79].

3.2. Métodos segregados de acoplamiento presión-velocidad

Hasta el momento, se ha considerado las generalidades del Método de Volúmenes Finitos aplicados a una ecuación de balance genérica. Ahora, se especializará el estudio a las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos incompresibles. Debido a la elevada complejidad del Modelo de Dos Fluidos para gas y partículas, se comenzará estudiando las ecuaciones de flujo a una fase, enfatizando en un aspecto presente además en flujos a dos o más fases: el acople entre los campos de presión y velocidad.

Las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos Newtonianos incompresibles a una fase pueden expresarse como:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u}\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{g} \quad (3.10)$$

Aquí pueden notarse algunas características que deben tenerse en cuenta para su posterior resolución por métodos numéricos:

- Pueden identificarse 2 campos incógnita: la presión p y la velocidad \mathbf{u}
- La ecuación de conservación de masa (Ec. (3.9)) es una ecuación escalar donde solo se encuentra presente el campo vectorial de velocidades
- La ecuación de conservación de momento lineal (Ec. (3.10)) es una ecuación vectorial que tiene ambos campos incógnita

Al observar las Ecs. (3.9) y (3.10), se podría asumir que la forma natural de resolución es calcular la velocidad a partir de la ecuación vectorial de momento. Sin embargo, esto no puede ser extendido para la variable escalar, es decir, la presión no puede ser directamente calculada a partir de la ecuación de conservación de masa, dado que esta variable no está presente en la ecuación. Esto lleva a buscar otras estrategias de resolución.

Como se ha visto en forma genérica, el sistema de ecuaciones del continuo (Ecs. (3.9) y (3.10)) se puede llevar a un sistema de ecuaciones algebraicas por medio de un método numérico, como el FVM, y obtener así un sistema de n ecuaciones de masa y n ecuaciones de momento para los n campos de presión y velocidad, siendo n el número de celdas del dominio. Este sistema puede expresarse en forma matricial (por bloques) como:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_F & \mathbf{G} \\ \mathbf{D} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_b \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

donde la primer fila de la matriz de 2×2 bloques se corresponde con las ecuaciones discretas de momento lineal, mientras que la segunda fila se corresponde con la ecuación de balance de masa. Aquí, \mathbf{A}_F representa una matriz de $n \times n$ coeficientes que multiplican al campo de velocidades correspondiente a la discretización por FVM y \mathbf{G} y \mathbf{D} representan las matrices de coeficientes de la discretización de los operadores gradiente y divergencia respectivamente.

Además, \mathbf{f}_b es un vector de términos independientes y la matriz por bloques del lado izquierdo de la igualdad tiene un bloque de ceros.

Operando sobre el sistema matricial anterior, se puede obtener un sistema de ecuaciones algebraicas para los campos de presión dado por:

$$\mathbf{D}\mathbf{A}_F^{-1}\mathbf{G}\mathbf{p} = \mathbf{D}\mathbf{A}_F^{-1}\mathbf{f}_b \quad (3.12)$$

La resolución de este sistema puede ser muy costosa dado que la inversa de la matriz \mathbf{A}_F es probablemente una matriz llena y el triple producto matricial también lo será [80]. Para resolver este problema, una alternativa es descomponer la matriz \mathbf{A}_F en una matriz de coeficientes diagonal \mathbf{A}_P y una matriz no-diagonal \mathbf{H} ($\mathbf{A}_F = \mathbf{A}_P + \mathbf{H}$). Esto da lugar a la formulación de los métodos de acoplamiento segregados. En ellos, en lugar de resolver para todas las variables de forma simultánea, se resuelve una ecuación a la vez de forma iterativa hasta lograr disminuir los residuos de las ecuaciones de balance discretas por debajo de una tolerancia dada. De esta forma, el sistema de ecuaciones dado por la expresión (3.11) puede reescribirse como:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_P & \mathbf{G} \\ \mathbf{D} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_b - \mathbf{H}\mathbf{u}^0 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

donde \mathbf{u}^0 es un campo de velocidades conocido proveniente de un estado iterativo previo.

De forma análoga, se puede obtener un sistema de ecuaciones para los campos de presión dados por:

$$\mathbf{D}\mathbf{A}_P^{-1}\mathbf{G}\mathbf{p} = \mathbf{D}\mathbf{A}_P^{-1}(\mathbf{f}_b - \mathbf{H}\mathbf{u}^0) \quad (3.14)$$

Esta forma resulta abordable dado que \mathbf{A}_P es una matriz diagonal fácilmente invertible y el triple producto resulta en una matriz rara.

La formulación matricial propuesta, puede reescribirse en forma de stencils considerando una adecuada discretización de cada uno de los términos de las Ecs. (3.9) y (3.10) mediante FVM. Tal como se presenta en la Ec. (3.6), la ecuación de momento puede escribirse por celda como:

$$a_P^u \mathbf{u}_P + \sum_{NB} a_{NB}^u \mathbf{u}_{NB} = \mathbf{f}_P^u - \hat{\nabla} p_P \quad (3.15)$$

Aquí se utiliza una notación mixta o semidiscreta, donde el operador $\hat{\nabla}$ representa un operador discreto. Además, a_P^u y a_{NB}^u son los coeficientes discretos diagonales y fuera de la diagonal

respectivamente. \mathbf{f}_P^u representa el vector de términos independientes discreto y \mathbf{u}_P y \mathbf{u}_{NB} son los vectores de incógnitas de velocidad de la celda actual y las vecinas respectivamente.

Del termino del lado derecho de la ecuación puede extraerse la contribución dada por el gradiente de presión y dividir el coeficiente a_P^u de todos los términos de modo de obtener:

$$\mathbf{u}_P + \mathbf{H}_a(\mathbf{u}) = \mathbf{B}_P^u - \frac{1}{a_P^u} \hat{\nabla} p_P \quad (3.16)$$

donde $\mathbf{B}_P^u = \mathbf{f}_P^u / a_P^u$ y $\mathbf{H}_a(\mathbf{u}) = \frac{\sum_{NB} a_{NB}^u \mathbf{u}_{NB}}{a_P^u}$.

Luego, planteando el operador divergencia discreto sobre esta ecuación, teniendo en cuenta que por conservación de masa $\hat{\nabla} \cdot \mathbf{u}_P = 0$, se obtiene:

$$\hat{\nabla} \cdot \left[\frac{1}{a_P^u} (\hat{\nabla} p)_P \right] = \hat{\nabla} \cdot [-\mathbf{H}_a(\mathbf{u}) + \mathbf{B}_P^u] \quad (3.17)$$

De esta forma, se obtienen 2 sistemas matriciales (dados por las Ecs. (3.15) y (3.17)). Existen múltiples algoritmos para resolver el acoplamiento entre presión y velocidad haciendo uso de estas ecuaciones. A continuación se presentan algoritmos de la familia SIMPLE desarrollado por Patankar y Spalding [73] y el algoritmo PISO desarrollado por Issa [31] para problemas transitorios, y así, arribar finalmente al algoritmo combinado PIMPLE que es utilizado en el acoplamiento de las distintas variables del modelo para flujos de gas y partículas propuesto.

3.2.1. Algoritmo SIMPLE y derivados

El algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) y sus derivados (SIMPLE-C, SIMPLE-R, SIMPLE-X, MSIMPLE-R, CLEAR, entre otros) [73, 81, 82, 83, 84, 85, 86] son posiblemente la familia de algoritmos segregados de mayor uso en la actualidad en códigos de CFD [87, 88, 5, 4, 89, 90]. Asimismo, a lo largo de los años han surgido nuevas variantes para mejorar las tasas de convergencia del método SIMPLE estándar. En particular, todos estos métodos han sido concebidos para la resolución de flujos estacionarios y luego han sido extendidos a problemas transitorios mediante el uso de una secuencia de iteraciones por paso de tiempo. Es por ello que, en general, en estos métodos se parte de una ecuación de momento del continuo (como la Ec. (3.10)) sin el término de evolución temporal.

Siguiendo la generalidad de la secuencia presentada en la sección anterior, el algoritmo SIMPLE estandar se compone de las siguientes etapas:

1. Iniciar el proceso iterativo tomando los campos de la iteración anterior como condiciones iniciales p^0 , \mathbf{u}^0 y los parámetros físicos, geométricos y condiciones de borde del problema en cuestión.
2. Discretizar y resolver la ecuación de momento con valores constantes del campo de presiones para una primer predicción del campo de velocidades \mathbf{u}^* mediante la Ec. (3.15):

$$a_P^u \mathbf{u}_P^* + \sum_{NB} a_{NB}^u \mathbf{u}_{NB}^* = \mathbf{f}_P^u - \hat{\nabla} p_P^0 \quad (3.18)$$

3. Calcular el operador \mathbf{H}_a a partir del nuevo campo de velocidades \mathbf{u}^* :

$$\mathbf{H}_a = \frac{-\sum_{NB} a_{NB}^u \mathbf{u}_{NB}^* + \mathbf{f}_P^u}{a_P^u} \quad (3.19)$$

4. Calcular la presión a partir de la Ec. (3.17):

$$\hat{\nabla} \cdot \left[\frac{1}{a_P^u} (\hat{\nabla} p_P^{**}) \right] = \hat{\nabla} \cdot [\mathbf{H}_a(\mathbf{u}^*)] \quad (3.20)$$

5. Corregir las velocidades en centro de celda mediante:

$$\mathbf{u}_P^{**} = \mathbf{H}_a(\mathbf{u}^*) - \frac{\hat{\nabla} p_P^{**}}{a_P^u} \quad (3.21)$$

6. Se vuelve al paso 2 con \mathbf{u}^{**} y p^{**} como valores iniciales, recalculando los coeficientes de las matrices en base a estos nuevos campos, y se itera hasta obtener una determinada tolerancia de residuos prescripta.

Dada la explicitud con que se resuelve cada etapa (utilizando valores de las variables de iteraciones previas), el algoritmo SIMPLE en la forma que fue presentado puede entrar en zonas de inestabilidad numérica. Esto significa que la convergencia del método puede no estar garantizada para ciertas condiciones del problema. Una práctica muy común para favorecer los rangos de estabilidad del método es el uso de factores de sobre-relajación. Estos coeficientes varían entre 0 y 1 y regulan el grado de evolución durante el cómputo de una determinada variable en una dada etapa del método [78, 88].

3.2.2. Algoritmo PISO

El algoritmo PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) fue originalmente concebido para la resolución de flujos en estado transitorio [31, 32] y su característica principal frente al método SIMPLE es la de reforzar el acoplamiento de la presión y la velocidad mediante múltiples iteraciones para el cálculo de la presión y la corrección de la velocidad. A esta etapa se la conoce como *paso corrector*. Este procedimiento recursivo permite prescindir del uso de factores de sobre-relajación, dado que los rangos de estabilidad resultan naturalmente incrementados.

La secuencia del algoritmo PISO se puede resumir de la siguiente forma:

1. Iniciar el proceso iterativo tomando los campos de la iteración anterior como condiciones iniciales p^0 , \mathbf{u}^0 y los parámetros físicos, geométricos y condiciones de borde del problema en cuestión.
2. Discretizar y resolver la ecuación de momento con valores constantes del campo de presiones para una primer predicción del campo de velocidades \mathbf{u}^* mediante la Ec. (3.15):

$$(b_P^u + a_P^u)\mathbf{u}_P^* + \sum_{NB} a_{NB}^u \mathbf{u}_{NB}^* = \mathbf{f}_P^u + b_P^u \mathbf{u}_P^0 - \hat{\nabla} p_P^0 \quad (3.22)$$

siendo b_P^u el coeficiente dado por la discretización del término temporal

3. Comienza el bucle del paso corrector:
 - 3.1. Calcular el operador \mathbf{H}_a a partir del nuevo campo de velocidades \mathbf{u}^* :

$$\mathbf{H}_a = \frac{-\sum_{NB} a_{NB}^u \mathbf{u}_{NB}^* + \mathbf{f}_P^u + b_P^u \mathbf{u}_P^0}{(a_P^u + b_P^u)} \quad (3.23)$$

- 3.2. Calcular la presión a partir de la Ec. (3.17):

$$\hat{\nabla} \cdot \left[\frac{1}{(a_P^u + b_P^u)} (\hat{\nabla} p_P^{**}) \right] = \hat{\nabla} \cdot [\mathbf{H}_a(\mathbf{u}^*)] \quad (3.24)$$

- 3.3. Corregir las velocidades en centro de celda mediante:

$$\mathbf{u}_P^{**} = \mathbf{H}_a(\mathbf{u}^*) - \frac{\hat{\nabla} p_P^{**}}{(a_P^u + b_P^u)} \quad (3.25)$$

3.4. Se vuelve al paso 3.1 con \mathbf{u}^{**} y p^{**} como valores iniciales y se itera hasta obtener una determinada tolerancia de residuos prescripta.

Como puede notarse, no se han definido los coeficientes a_P^u y a_{NB}^u . Estos dependen exclusivamente de la discretización de los términos de derivación espacial adoptada.

En el Apéndice B, se utiliza la formulación por bloques matriciales del sistema discretizado para describir una corrección para mitigar errores de altas frecuencias debidas al desacople de los campos de presión y velocidad [91].

3.2.3. Métodos combinados: El algoritmo PIMPLE

Existen métodos combinados que hacen uso de las virtudes de distintos métodos de acoplamiento. En particular, el método PISO-SIMPLE, también conocido como PIMPLE [89, 29], hace uso de una versión transitoria del algoritmo SIMPLE dado por iteraciones sucesivas por cada paso temporal partiendo de la etapa predictor de momento (paso 2 del algoritmo SIMPLE) y haciendo uso de factores de relajación. Esto permite reducir las instabilidades producto de la linealización del término advectivo ($\nabla \cdot \mathbf{uu}$). Asimismo, el método PIMPLE hace uso de iteraciones internas del paso corrector (resolución de la ecuación de presión y corrección de velocidad, paso 3 del algoritmo PISO) para favorecer la estabilidad del acople presión-velocidad. De esta forma, por medio de iteraciones externas (como en SIMPLE), este método permite utilizar pasos de tiempo mayores que para el método PISO.

3.3. Resolución del Modelo gas-partículas mediante FVM

Como ya se ha descrito, TFM aplicado a gas y partículas cuenta con varios campos incógnita. En el marco de una resolución por métodos de acoplamiento segregados, esto se traduce en una necesidad de un alto grado de acoplamiento entre las variables para garantizar estabilidad de la resolución. Las ecuaciones de balance del modelo continuo en su forma diferencial, tal como fueron presentadas en el Capítulo 2 (Ecs. (2.157) a (2.162)), son reformuladas de modo de obtener:

$$\alpha_s + \alpha_g = 1 \quad (3.26)$$

$$\nabla \cdot (\alpha_s \mathbf{u}_s + \alpha_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_s \mathbf{u}_s = 0 \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \mathbf{u}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) = -\frac{\alpha_s}{\rho_s} \nabla p - \frac{1}{\rho_s} \nabla p_s + \nabla \cdot \alpha_s \tau_s + \alpha_s \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_s} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\frac{\alpha_g}{\rho_g} \nabla p + \nabla \cdot \alpha_g \tau_g + \alpha_g \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_g} (\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_g) \quad (3.30)$$

$$\frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \theta) + \frac{3}{2} \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{u}_s \theta) = (-p_s \mathbf{I} + \tau_s) : \nabla \mathbf{u}_s - \nabla \cdot (\kappa_s \nabla \theta) + \gamma_s + J_{sg} \quad (3.31)$$

Aquí, la ecuación de continuidad de la fase gaseosa (Ec. (2.158)) es reemplazada por una ecuación de conservación de masa total, obtenida a partir de la suma de las Ecs. (2.158) y (2.159) y haciendo uso de la Ec. (2.157). De esta forma, la fracción α_g es calculada una vez obtenida α_s a partir de la Ec. (3.28). El modelo computacional que se describe a continuación hace uso del método de acoplamiento PIMPLE y la discretización se hace mediante el Método de Volúmenes Finitos (FVM).

A continuación se analizarán las discretizaciones de cada una de las ecuaciones del modelo y la metodología de acoplamiento entre las mismas. Por simplicidad de notación, se omitirán los subíndices P para referenciar a los valores centrados en celda, entendiéndose que cada formulación semi-discreta es una forma compacta de escribir un stencil de balance local sobre las celdas del dominio discreto para la celda P .

3.3.1. Ecuaciones de momento de cada fase

Las Ecs. (3.29) y (3.30) pueden escribirse en notación semi-discreta tal como ha sido expresado para flujos a una fase y como es presentado por Passalacqua *et al.* [29]:

$$A_s \mathbf{u}_s = \mathbf{H}_s - \frac{\alpha_s}{\rho_s} \hat{\nabla} p - \frac{1}{\rho_s} \hat{\nabla} p_s + \alpha_s \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_s} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) \quad (3.32)$$

$$A_g \mathbf{u}_g = \mathbf{H}_g - \frac{\alpha_g}{\rho_g} \hat{\nabla} p + \alpha_g \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_g} (\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_g) \quad (3.33)$$

donde A_i son los coeficientes diagonales provenientes de la matriz de discretización de los término temporales, advectivos y difusivos, y \mathbf{H}_i son los operadores que contienen los coeficientes fuera de la diagonal de la misma matriz de discretización. Además, por cuestiones de simplicidad de notación, para los desarrollos subsiguientes, los operadores involucrados también están referenciados a valores centrados en celda (en \mathbf{x}_P).

Se definen los flujos en cara como:

$$\varphi_i = \mathbf{u}_{i,f} \cdot \mathbf{S} \quad (3.34)$$

donde i es el índice de fase, el subíndice f indica que es un valor interpolado en la cara y \mathbf{S} representa el vector normal a dicha cara.

Además, cada flujo de fase puede expresarse como suma de varias contribuciones:

$$\varphi_i = \varphi_i^S + \varphi_i^C + \varphi_i^P + \varphi_i^{PP} + \varphi_i^G \quad (3.35)$$

donde el supraíndice S representa la contribución al flujo de la velocidad de la propia fase, C representa la contribución de la fase complementaria, P representa la contribución al flujo dada por la presión, PP representa la contribución dada por la presión de partículas y G representa la contribución dada por la gravedad.

Hay muchas formas de vincular las ecuaciones de momento de cada fase (Ecs. (3.32) y (3.33)) a través de la fuerza de arrastre [35]. A continuación se presentarán dos de los métodos más usados para acople por arrastre siguiendo la nomenclatura de Karema *et al.* [92]: el *Método Parcialmente Implícito* (PIM) y el *Algoritmo de Eliminación Parcial* (PEA).

El PIM trata implícitamente a la velocidad de la fase i sobre el término de arrastre de la ecuación de momento para la fase i . Esto implica que las velocidades centradas en celda, haciendo uso de las Ecs. (3.32) y (3.33), se pueden calcular como:

$$\mathbf{u}_{s,\text{PIM}} = \zeta_s \left(\mathbf{H}_s + \frac{K_{sg}}{\rho_s} \mathbf{u}_g - \frac{\alpha_s}{\rho_s} \hat{\nabla} p - \frac{1}{\rho_s} \hat{\nabla} p_s + \alpha_s \mathbf{g} \right) \quad (3.36)$$

$$\mathbf{u}_{g,\text{PIM}} = \zeta_g \left(\mathbf{H}_g + \frac{K_{sg}}{\rho_g} \mathbf{u}_s - \frac{\alpha_g}{\rho_g} \hat{\nabla} p + \alpha_g \mathbf{g} \right) \quad (3.37)$$

donde

$$\zeta_i = \frac{1}{A_i + \frac{K_{sg}}{\rho_i}} \quad (3.38)$$

Aquí, el gradiente de la presión de sólido puede expresarse como:

$$\hat{\nabla} p_s = \left(\frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right) \hat{\nabla} \alpha_s \quad (3.39)$$

donde la dependencia de p_s con θ es usualmente desestimada para la derivación de la Ec. (3.39) [29].

De acuerdo con las Ecs. (3.34), (3.35), (3.36) y (3.37), el flujo total de cada fase puede calcularse en base a las siguientes contribuciones:

$$\varphi_{s,\text{PIM}}^{\text{S}} = \zeta_{s,f} \mathbf{H}_{s,f} \cdot \mathbf{S} \quad (3.40) \quad \varphi_{g,\text{PIM}}^{\text{S}} = \zeta_{g,f} \mathbf{H}_{g,f} \cdot \mathbf{S} \quad (3.41)$$

$$\varphi_{s,\text{PIM}}^{\text{C}} = \zeta_{s,f} \left(\frac{K_{sg}}{\rho_s} \right)_f \varphi_s^0 \quad (3.42) \quad \varphi_{g,\text{PIM}}^{\text{C}} = \zeta_{g,f} \left(\frac{K_{sg}}{\rho_g} \right)_f \varphi_s^0 \quad (3.43)$$

$$\varphi_{s,\text{PIM}}^{\text{P}} = -\zeta_{s,f} \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} \right)_f \hat{\nabla} p \cdot \mathbf{S} \quad (3.44) \quad \varphi_{g,\text{PIM}}^{\text{P}} = -\zeta_{g,f} \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} \right)_f \hat{\nabla} p \cdot \mathbf{S} \quad (3.45)$$

$$\varphi_{s,\text{PIM}}^{\text{PP}} = -\zeta_{s,f} \left(\frac{1}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right)_f \hat{\nabla} \alpha_s \cdot \mathbf{S} \quad (3.46) \quad \varphi_{g,\text{PIM}}^{\text{PP}} = 0 \quad (3.47)$$

$$\varphi_{s,\text{PIM}}^{\text{G}} = \zeta_{s,f} \alpha_{s,f} \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} \quad (3.48) \quad \varphi_{g,\text{PIM}}^{\text{G}} = \zeta_{g,f} \alpha_{g,f} \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} \quad (3.49)$$

donde el supraíndice 0 indica valores almacenados de iteraciones previas.

La expresión final para los flujos de cada fase es obtenida al incluir cada contribución a la Ec. (3.35). Este método de acoplamiento se encuentra implementado en la distribución oficial de OpenFOAM® [89].

Por otro lado, el PEA, originalmente propuesto por Spalding [34], incorpora la velocidad obtenida en Ec. (3.36) en la Ec. (3.33) y la Ec. (3.37) en la Ec. (3.32). Esto lleva a otra expresión para las velocidades centradas en celda dadas por:

$$\mathbf{u}_{s,\text{PEA}} = \xi_s \left\{ \mathbf{H}_s + \frac{K_{sg} \zeta_g}{\rho_s} \mathbf{H}_g - \left[\frac{\alpha_s}{\rho_s} + \frac{K_{sg} \alpha_g \zeta_g}{\rho_g \rho_s} \right] \hat{\nabla} p - \frac{1}{\rho_s} \hat{\nabla} p_s + \left[\alpha_s + \frac{K_{sg} \alpha_g \zeta_g}{\rho_s} \right] \mathbf{g} \right\} \quad (3.50)$$

$$\mathbf{u}_{g,\text{PEA}} = \xi_g \left\{ \mathbf{H}_g + \frac{K_{sg} \zeta_s}{\rho_g} \mathbf{H}_s - \left[\frac{\alpha_g}{\rho_g} + \frac{K_{sg} \alpha_s \zeta_s}{\rho_s \rho_g} \right] \hat{\nabla} p - \frac{K_{sg} \zeta_s}{\rho_s \rho_g} \hat{\nabla} p_s + \left[\alpha_g + \frac{K_{sg} \alpha_s \zeta_s}{\rho_g} \right] \mathbf{g} \right\} \quad (3.51)$$

donde:

$$\xi_i = \frac{1}{A_i + \frac{K_{sg}}{\rho_i} - \frac{K_{sg}^2 \zeta_j}{\rho_i \rho_j}} \quad (3.52)$$

y j representa la fase complementaria a la fase i .

Para este método, las contribuciones al flujo son:

$$\varphi_{s,PEA}^S = \xi_{s,f} \mathbf{H}_{s,f} \cdot \mathbf{S} \quad (3.53)$$

$$\varphi_{g,PEA}^S = \xi_{g,f} \mathbf{H}_{g,f} \cdot \mathbf{S} \quad (3.54)$$

$$\varphi_{s,PEA}^C = \xi_{s,f} \left(\frac{K_{sg} \lambda_g}{\rho_s} \mathbf{H}_g \right)_f \cdot \mathbf{S} \quad (3.55)$$

$$\varphi_{g,PEA}^C = \xi_{g,f} \left(\frac{K_{sg} \lambda_s}{\rho_g} \mathbf{H}_s \right)_f \cdot \mathbf{S} \quad (3.56)$$

$$\varphi_{s,PEA}^P = -\xi_{s,f} \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} + \frac{K_{sg} \alpha_g \lambda_g}{\rho_g \rho_s} \right)_f \hat{\nabla} p \cdot \mathbf{S} \quad (3.57)$$

$$\varphi_{g,PEA}^P = -\xi_{g,f} \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} + \frac{K_{sg} \alpha_s \lambda_s}{\rho_s \rho_g} \right)_f \hat{\nabla} p \cdot \mathbf{S} \quad (3.58)$$

$$\varphi_{s,PEA}^{PP} = -\xi_{s,f} \left(\frac{1}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right)_f \hat{\nabla} \alpha_s \cdot \mathbf{S} \quad (3.59)$$

$$\varphi_{g,PEA}^{PP} = -\xi_{g,f} \left(\frac{K_{sg} \lambda_s}{\rho_s \rho_g} \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_g} \right)_f \hat{\nabla} \alpha_g \cdot \mathbf{S} \quad (3.60)$$

$$\varphi_{s,PEA}^G = \xi_{s,f} \left(\alpha_s + \frac{K_{sg} \alpha_g \lambda_g}{\rho_s} \right)_f \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} \quad (3.61)$$

$$\varphi_{g,PEA}^G = \xi_{g,f} \left(\alpha_g + \frac{K_{sg} \alpha_s \lambda_s}{\rho_g} \right)_f \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} \quad (3.62)$$

La derivación completa de estas expresiones está detallada en el trabajo de Passalacqua *et al.* [29]. Tiene la ventaja de lograr un desacoplamiento de cada velocidad de fase de su fase complementaria, lo que resulta en un método con un mayor grado de implícitud favoreciendo así la convergencia de momento para problemas dominados por arrastre [35]. Muchos autores han adoptado este método [29, 70, 93] y su estabilidad y convergencia ha sido estudiada en la literatura [94, 92].

En el Capítulo 6 se explorarán los rangos de estabilidad de cada uno de los métodos de acoplamiento por arrastre mediante técnicas de descomposición de Fourier con el fin de determinar los parámetros físicos y numéricos que pueden afectar sensiblemente sus cualidades de convergencia.

3.3.2. Ecuaciones de continuidad de cada fase

La conservación total de flujo debe verificarse localmente por cada paso de tiempo (Ec. (3.27)). Es por ello que resulta innecesario resolver ambas ecuaciones de continuidad de cada fase. En su lugar, la ecuación de continuidad de la fase dispersa es resuelta y la fracción de volumen de la fase restante es calculada mediante la Ec. (3.26). Entonces, la ecuación de

continuidad para la fase s3lida puede ser escrita en forma semi-discreta como:

$$\frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + \sum_f \alpha_{s,f} \varphi_s = 0 \quad (3.63)$$

donde el flujo dado por la fase s3lida puede ser expresada en t3rminos del flujo global de fase φ y el flujo relativo $\varphi_{r,s}$ como:

$$\varphi_s = \varphi + \alpha_{g,f} \varphi_{r,s} \quad (3.64)$$

y:

$$\varphi_{r,s} = \varphi_s - \varphi_g \quad (3.65)$$

$$\varphi = \alpha_{s,f} \varphi_s + \alpha_{g,f} \varphi_g \quad (3.66)$$

Haciendo uso de las Ecs. (3.35), (3.66) y (3.65), los flujos globales y relativos resultan:

$$\varphi = \alpha_{s,f} \check{\varphi}_s + \alpha_{s,f} \varphi_s^{PP} + \alpha_{g,f} \check{\varphi}_g + \alpha_{g,f} \varphi_g^{PP} \quad (3.67)$$

$$\varphi_{r,s} = \check{\varphi}_s + \varphi_s^{PP} - \check{\varphi}_g - \varphi_g^{PP} \quad (3.68)$$

donde:

$$\check{\varphi}_i = \varphi_i^S + \varphi_i^C + \varphi_i^P + \varphi_i^G \quad (3.69)$$

Entonces, usando las Ecs. (3.67) y (3.68), el flujo para la fase s3lida resulta:

$$\varphi_s = \check{\varphi} + \alpha_{g,f} \check{\varphi}_{r,s} + \varphi_s^{PP} \quad (3.70)$$

donde:

$$\check{\varphi} = \alpha_{s,f} \check{\varphi}_s + \alpha_{g,f} \check{\varphi}_g \quad (3.71)$$

$$\check{\varphi}_{r,s} = \check{\varphi}_s - \check{\varphi}_g \quad (3.72)$$

Finalmente, la Ec. (3.70) puede incluirse en la Ec. (3.63) dando lugar a la siguiente forma semi-discreta en la ecuaci3n de la fase continua:

$$\frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + \sum_f \alpha_{s,f} \check{\varphi} + \sum_f \alpha_{s,f} \alpha_{g,f} \check{\varphi}_{r,s} - \sum_f D_i^{PP} \hat{\nabla} \alpha_s \cdot \mathbf{S} = 0 \quad (3.73)$$

donde:

$$D_{i,\text{PIM}}^{PP} = -\zeta_{s,f} \left(\frac{1}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right)_f \quad (3.74)$$

$$D_{i,\text{PEA}}^{PP} = -\xi_{s,f} \left(\frac{1}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right)_f \quad (3.75)$$

Aquí, el cuarto término de la Ec. (3.73) puede interpretarse como una difusión de la fracción de partículas con una difusividad dependiente de la presión de sólidos. Para mantener la fracción de cada fase entre cero y uno, se utiliza una técnica de división del operador donde los primeros tres términos son resueltos como una ecuación de transporte puro y el efecto de la presión de partículas es agregado implícitamente. Este procedimiento está basado en el trabajo de Weller [89] y Passalacqua *et al.* [29].

La solución de los términos de transporte se basan en el integrador MULES [95, 79], el cual es un esquema basado en corrección del flujo [96] y garantiza que la solución va a estar acotada entre valores extremos determinados. Si los mismos se eligen para que α_s se mantenga en $[0, 1]$, el empaquetamiento máximo debe ser impuesto por los modelos físicos. Pero, si los extremos son seleccionados para ser $[0, \alpha_{s,\text{max}}]$, entonces el integrador MULES va a acotar los valores acorde al empaquetamiento máximo.

El límite máximo para α_s impuesto por MULES es un tema que está sujeto a discusión. Si el límite máximo es elegido como $\alpha_{s,\text{max}}$, la condición será satisfecha rigurosamente y mucho se ganará desde el punto de vista de la estabilidad del método de resolución. Sin embargo, el efecto físico del modelo cinético-friccional sobre el límite de empaquetamiento va a superponerse con los límites impuestos numéricamente. Para este desarrollo, se han impuesto estrictamente los límites para α_s en $[0, 1]$ con MULES y dejando el máximo empaquetamiento a ser determinado por los modelos cinético-friccionales.

3.3.3. Ecuación de energía granular

El cierre matemático del sistema a gas y partículas depende de la definición de μ_s y p_s . Estos parámetros están basados en los modelos cinético-colisionales y friccionales. La contribución cinético-colisional está relacionada al campo de energía granular, la cual responde a un balance dado por la Ec. (3.31). Esta ecuación puede ser reescrita en forma semi-discreta como:

$$A(\theta) = B(\theta) \quad (3.76)$$

$$A(\theta) = \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \theta) + \frac{3}{2} \hat{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{u}_s \theta) \quad (3.77)$$

$$B(\theta) = \hat{\nabla} \cdot (\kappa_s \hat{\nabla} \theta) + [(-\tilde{p}_s \mathbf{I} : \hat{\nabla} \mathbf{u}_s) + \tilde{\gamma}_s] \theta + (\tau_s : \hat{\nabla} \mathbf{u}_s) + J_{sg} \quad (3.78)$$

donde $\tilde{\phi} = \frac{\phi}{\theta}$ siendo ϕ un parámetro genérico.

Debe notarse que el primer término del lado derecho de la Ec. (3.31) es dividido para el tratamiento numérico. Esto genera un término de disipación de energía granular debido al tensor de corte que es tratado explícitamente (penúltimo término en la Ec. (3.78)), y un término de disipación de energía granular debido a esfuerzos normales, el cual es tratado implícitamente como un término reactivo (primer término dentro de los corchetes en la Ec. (3.78)). Además de esto, los otros términos disipativos γ_s y J_{sg} son también tratados como términos reactivos para la implementación numérica.

En muchas aplicaciones, la disipación debida a las colisiones inelásticas γ_s tiende a dominar el fenómeno de disipación-producción cerca del límite de empaquetamiento. Debido a su signo negativo, $\tilde{\gamma}_s$ tiene un efecto estabilizador sobre la solución numérica, siendo:

$$\tilde{\gamma}_s = 3(e^2 - 1) \alpha_s^2 \rho_s g_0 \left[\frac{4}{d_p} \left(\frac{\theta^0}{\pi} \right)^2 - \hat{\nabla} \cdot \mathbf{u}_s \right] \quad (3.79)$$

De la Ec. (3.79), resulta claro que debe realizarse un tratamiento especial cuando el coeficiente de restitución $e \rightarrow 1$, dado que $\tilde{\gamma}_s \rightarrow 0$ generando una dominancia no-diagonal en la matriz discreta. Para evitar esto, se opta por fijar un coeficiente de restitución (e_{\max}) por encima del cual pueden aparecer inestabilidades numéricas. Si el coeficiente de restitución real del problema es menor a este valor máximo, el procedimiento de solución es directo. Por otro lado, si el coeficiente de restitución está por encima del valor máximo, entonces el término difusivo se agrega implícitamente y se sustrae explícitamente. El coeficiente resulta:

$$\tilde{\gamma}_s^m = 3(e_{\max}^2 - 1) \alpha_s^2 \rho_s g_0 \left[\frac{4}{d_p} \left(\frac{\theta^0}{\pi} \right)^2 - \hat{\nabla} \cdot \mathbf{u}_s \right] \quad (3.80)$$

Entonces, la ecuación de energía granular resulta:

$$A(\theta) = B(\theta) + \tilde{\gamma}_s^m (\theta^0 - \theta) \quad (3.81)$$

La dificultad numérica de tener pequeños valores de $\tilde{\gamma}_s$ son evitadas agregando un término extra de difusividad sin generar perturbaciones sobre el cálculo de θ .

3.3.4. Ecuación de presión discreta

La ecuación de presión es derivada de la condición de incompresibilidad sobre la ecuación de conservación de masa total, la cual es reescrita en forma discreta como:

$$\sum_f \varphi = \sum_f (\alpha_{s,f} \varphi_s + \alpha_{g,f} \varphi_g) = 0 \quad (3.82)$$

Reemplazando φ_s y φ_g por sus contribuciones, dadas por las Ecs. (3.40) a (3.49) (o Ecs. (3.53) a (3.62) para PEA) y teniendo en cuenta que las Ecs. (3.44) y (3.45) (o Ecs. (3.57) y (3.58)) tienen un término que involucra a $\hat{\nabla}p$, la ecuación de presión puede expresarse como:

$$\sum_f \left[D^P(\hat{\nabla}p \cdot \mathbf{S}) \right] = \sum_f (\alpha_{s,f} \hat{\varphi}_s + \alpha_{g,f} \hat{\varphi}_g) \quad (3.83)$$

donde:

$$D_{\text{PIM}}^P = - \left[\alpha_{s,f} \zeta_{s,f} \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} \right)_f + \alpha_{g,f} \zeta_{g,f} \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} \right)_f \right] \quad (3.84)$$

$$D_{\text{PEA}}^P = - \left[\alpha_{s,f} \xi_{s,f} \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} + \frac{K_{sg} \alpha_g \zeta_g}{\rho_g \rho_s} \right)_f + \alpha_{g,f} \xi_{g,f} \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} + \frac{K_{sg} \alpha_s \zeta_s}{\rho_s \rho_g} \right)_f \right] \quad (3.85)$$

y:

$$\hat{\varphi}_i = \varphi_i^S + \varphi_i^C + \varphi_i^{\text{PP}} + \varphi_i^G \quad (3.86)$$

Una vez resuelta la ecuación de presión, cada flujo de fase es corregido de acuerdo con:

$$\varphi_{i,\text{PIM}} = \hat{\varphi}_{i,\text{PIM}} - \alpha_{i,f} \zeta_{i,f} \left(\frac{\alpha_i}{\rho_i} \right)_f \hat{\nabla}p \cdot \mathbf{S} \quad (3.87)$$

o:

$$\varphi_{i,\text{PEA}} = \hat{\varphi}_{i,\text{PEA}} - \alpha_{i,f} \xi_{i,f} \left(\frac{\alpha_i}{\rho_i} + \frac{K_{sg} \alpha_j \zeta_j}{\rho_i \rho_j} \right)_f \hat{\nabla}p \cdot \mathbf{S} \quad (3.88)$$

Para asegurar la consistencia en la corrección de los campos de velocidad centrados en celda, Passalacqua *et al.* [29] destacaron la necesidad de reconstruir los flujos de cada fase haciendo uso de coeficientes centrados en celda. La operación de reconstrucción es análoga a la operación de interpolación para el cálculo de los flujos en caras. Cuando esta última lleva valores de celdas vecinas a la cara compartida entre ellas, la reconstrucción lleva valores de caras a centro de celdas. Existen diversas maneras de realizar esta operación [97, 98, 99, 100, 101] y en este trabajo se sigue la metodología aplicada en OpenFOAM[®] basada en el trabajo de Weller *et al.* [97].

Para PIM, la velocidad centrada en celda corregida resulta:

$$\mathbf{u}_{i,\text{PIM}} = \mathbf{u}_{i,\text{PIM}}^0 + \zeta_i \mathcal{R} \left[\frac{\varphi_i - \hat{\varphi}_i}{\zeta_{i,f}} \right] \quad (3.89)$$

donde $\mathcal{R}[\dots]$ es el operador de reconstrucción de campos centrados en cara a campos centrados en celda.

El procedimiento para PEA no es tan directo dado que ambos coeficientes ξ_i y ζ_i deben usarse en su forma centrada en celda para la corrección de velocidades. Esto lleva a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{s,\text{PEA}} = & \mathbf{u}_{s,\text{PEA}}^0 + \\ & \xi_s \left\{ \mathcal{R} \left[\alpha_{s,f} \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} - \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} \right)_f \hat{\nabla} p \cdot \mathbf{S} \right] - \mathcal{R} \left[\left(\frac{1}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right)_f \hat{\nabla} \alpha_s \cdot \mathbf{S} \right] \right. \\ & \left. + \frac{K_{sg} \zeta_g}{\rho_s} \mathcal{R} \left[\alpha_{g,f} \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} - \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} \right)_f \hat{\nabla} p \cdot \mathbf{S} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.90)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{g,\text{PEA}} = & \mathbf{u}_{g,\text{PEA}}^0 + \\ & \xi_g \left\{ \mathcal{R} \left[\alpha_{g,f} \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} - \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} \right)_f \hat{\nabla} p \cdot \mathbf{S} \right] - \frac{K_{sg} \zeta_s}{\rho_s} \mathcal{R} \left[\left(\frac{1}{\rho_g} \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_g} \right)_f \hat{\nabla} \alpha_g \cdot \mathbf{S} \right] \right. \\ & \left. + \frac{K_{sg} \zeta_s}{\rho_g} \mathcal{R} \left[\alpha_{s,f} \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} - \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} \right)_f \hat{\nabla} p \cdot \mathbf{S} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.91)$$

Por otra parte, el algoritmo hace uso de una etapa predictora de momento, donde se busca resolver de forma preliminar (previo al paso corrector y la ecuación de presión) un campo de velocidades para cada fase. Esto se realiza con el fin de acelerar la convergencia del método partiendo de campos aproximados de velocidad más cercanos al buscado luego del proceso iterativo. En este contexto, el predictor de momento puede expresarse como:

$$A_s^* \mathbf{u}_s = \mathbf{H}_s^* + \mathcal{R} \left[\alpha_{s,f} \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} - \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} \right)_f \hat{\nabla} p^0 \cdot \mathbf{S} - \left(\frac{1}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right)_f \hat{\nabla} \alpha_s \cdot \mathbf{S} \right] \quad (3.92)$$

$$A_g^* \mathbf{u}_g = \mathbf{H}_g^* + \mathcal{R} \left[\alpha_{g,f} \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} - \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} \right)_f \hat{\nabla} p^0 \cdot \mathbf{S} \right] \quad (3.93)$$

donde:

$$A_i^* = A_i + \frac{K_{sg}}{\rho_i} \quad (3.94)$$

$$\mathbf{H}_i^* = \mathbf{H}_i + \frac{K_{sg}}{\rho_i} \mathbf{u}_j \quad (3.95)$$

El lector puede notar que la etapa predictora preserva la misma forma en ambos métodos de acoplamiento considerados, pero, para PEA, la parte implícita del término de arrastre debe ser incluida luego del cálculo de los coeficientes ξ_i y ζ_i .

3.3.5. Algoritmo de resolución del modelo completo

Como ya se ha mencionado, el algoritmo PIMPLE es una combinación de SIMPLE y PISO, lo que permite el acople entre fases y, mediante el uso de factores de sobre-relajación, reforzar la convergencia del proceso iterativo. La secuencia consiste de los siguientes pasos:

1. Leer los parámetros físicos y numéricos, condiciones de borde y valores de campos almacenados de iteraciones pasadas.
2. Comenzar el bucle PIMPLE e iterar hasta obtener un determinado nivel de convergencia.
 - 2.1. Comenzar el bucle de la ecuación de continuidad para la fase sólida hasta obtener convergencia.
 - 2.1.1. Resolver la ecuación de continuidad de la fase sólida (Ec. (3.73)) usando el integrador MULES sin la contribución de la presión de sólido al flujo.
 - 2.1.2. Incluir la contribución de la presión de sólido de forma implícita en α_s .
 - 2.1.3. Relajar la ecuación de continuidad y resolver para α_s , luego calcular $\alpha_g = 1 - \alpha_s$.
 - 2.2. Calcular K_{sg} de acuerdo al modelo de arrastre seleccionado.
 - 2.3. Calcular los coeficientes de la ecuación de energía granular.
 - 2.4. Relajar y resolver la ecuación de energía granular (Ec. (3.81)).
 - 2.5. Calcular μ_s y p_s de acuerdo al modelo cinético-friccional elegido.
 - 2.6. Ensamblar las matrices de momento de cada fase, agragar los términos explícitos y resolver el sistema lineal de momento para los predictores de velocidad de fase (Ecs. (3.92) y (3.93)).

- 2.7. Comenzar el bucle corrector e iterar hasta obtener convergencia.
 - 2.7.1. Interpolar los coeficientes de la matriz de momento y las fracciones α a las caras.
 - 2.7.2. Construir el lado derecho de la ecuación de presión y los coeficientes de difusión, ensamblar y resolver la ecuación de presión (Ec. (3.83)).
 - 2.7.3. Agregar la contribución de presión y corregir los flujos de cada fase (Ec. (3.87) y (3.88)).
 - 2.7.4. Relajar el campo de presiones.
 - 2.7.5. Reconstruir las velocidades centradas en celda (Ecs. (3.89), (3.90) y (3.91)).
3. Reiniciar la secuencia para el siguiente paso de tiempo.

“It is through science that we prove, but through intuition that we discover.”

– Henri Poincaré (1854-1912)

Capítulo 4

Conservatividad de las formulaciones del modelo gas-partículas

En el proceso de resolución de las ecuaciones del modelo de gas y partículas, se pueden presentar casos particulares que pueden comprometer la estabilidad del método. Un ejemplo de ello se presenta cuando la fase sólida alcanza fracciones muy bajas (*i.e.* $\alpha_s \rightarrow 0$). En estos casos, la ecuación de momento tiende a una ecuación singular, lo cual se traduce en soluciones numéricas altamente oscilatorias para el campo de velocidades. Este comportamiento puede ser tratado de varias maneras. Oliveira *et al.* [27] proponen reformular las ecuaciones de momento a una forma no-conservativa, también conocida como forma fase-intensiva [89, 29]. Sin embargo, las formas no-conservativas pueden llevar a predicciones inexactas del campo de velocidades cuando hay presencia de ondas de choque [30, 28].

Como se ha visto, FVM deriva de la forma integral de las ecuaciones de conservación. Es por esto que, en vistas de obtener una solución débil del problema discreto, el uso de un método conservativo provee cierto grado de consistencia desde el punto de vista matemático. El teorema de Lax prueba que, si la aproximación hecha por un método conservativo converge hacia una función dada a medida que la malla es refinada, entonces esta función es una solución débil del problema [30]. De hecho, en problemas que involucran ondas de choque, el uso de métodos conservativos basados en la forma integral de las leyes de conservación resultan esenciales para predecir correctamente las velocidades de las ondas de choque.

En este capítulo, se estudiará el impacto de utilizar distintas formulaciones de la ecuación de momento, haciendo especial énfasis en el término advectivo, sobre las soluciones de problemas con presencia de discontinuidades tipo ondas de choque. Las tres formulaciones a analizar son utilizadas en gran cantidad de códigos computacionales en la actualidad. ¹

4.1. Conservatividad para la ecuación de Burgers

Aunque no debieran aparecer problemas en el cálculo de funciones suaves, las formas no-conservativas fallan en converger hacia soluciones débiles cuando se transportan funciones discontinuas. Para ilustrar este comportamiento, se propone analizar el transporte unidimensional de una función escalón usando la ecuación de Burgers:

$$u_t + \frac{1}{2}(u^2)_x = 0 \quad (4.1)$$

cuya forma discreta resulta:

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{1}{2}(u_k^n)^2 - \frac{1}{2}(u_{k-1}^n)^2 \right] \quad (4.2)$$

Esta ecuación en forma no-conservativa es:

$$u_t + u u_x = 0 \quad (4.3)$$

cuya forma discreta resulta:

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u_k^n (u_k^n - u_{k-1}^n) \quad (4.4)$$

Puede apreciarse que la forma conservativa predice una velocidad del frente de onda en mayor concordancia con la solución analítica respecto a la forma no-conservativa. Para un solo paso de tiempo, la diferencia puede ser cuantificada por:

$$d_I = (u_k^{n+1})_C - (u_k^{n+1})_{NC} = \frac{1}{2} \Delta x \Delta t \left(\frac{u_k^n - u_{k-1}^n}{\Delta x} \right)^2 = \frac{1}{2} \Delta x \Delta t (u_x)^2 \quad (4.5)$$

¹Los principales resultados de este capítulo han sido publicados en el trabajo de Venier C.M., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *Numerical Aspects of Eulerian gas-particle*. Computers and Fluids vol. 133 p. 151-169. 2016. [102]

donde el subíndice k es el índice de celda, n es el índice de paso de tiempo, el subíndice C corresponde a la forma conservativa y NC a la forma no-conservativa. Además, el subíndice x representa la derivada discreta espacial.

Aquí se ha utilizado esquemas Upwind y forward-Euler para la discretización espacial y temporal respectivamente. Resulta claro que las diferencias en la predicción de la velocidad se vuelven pequeñas para funciones suaves de la solución. Además, $d_I \geq 0$, lo que indica que la formulación no-conservativa siempre da una predicción de la velocidad menor a aquella obtenida con la forma conservativa.

4.2. Formulación de las ecuaciones de momento

4.2.1. Formulación conservativa

El problema anterior permite poner de manifiesto la importancia de utilizar un método conservativo para resolver problemas en presencia de ondas de choque. Sin embargo, cuando se extienden estos conceptos a las ecuaciones de momento del modelo multifásico Euleriano, existen algunas variantes que deben tenerse en cuenta. La forma conservativa bajo este modelo puede expresarse como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) = \mathbf{R}_i \quad (4.6)$$

donde \mathbf{R}_i representa todos los términos restantes de la ecuación de cantidad de movimiento. Este término no juega un rol importante en el presente estudio.

Una práctica común para una posterior implementación computacional es la de restar de cada ecuación de momento, la correspondiente ecuación de continuidad de cada fase. Esto se realiza para evitar errores en la solución debida a desbalances de masa [103, 28]. Entonces, la Ec. (4.6) resulta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) - \mathbf{u}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} - \mathbf{u}_i \nabla \cdot (\alpha_i \mathbf{u}_i) = \mathbf{R}_i \quad (4.7)$$

La Ec. (4.7) será referenciada como la *forma conservativa* en los desarrollos subsiguientes. El segundo y cuarto término es aproximado utilizando FVM de la siguiente manera:

$$\int_V \nabla \cdot (\alpha_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) dV - \int_V \mathbf{u}_i \nabla \cdot (\alpha_i \mathbf{u}_i) dV \approx \sum_f (\alpha_i \mathbf{u}_i)_f \varphi_i - \mathbf{u}_i \sum_f \alpha_{i,f} \varphi_i \quad (4.8)$$

el cual puede expresarse en forma semi-discreta como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \mathbf{u}_i) - \mathbf{u}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \sum_f (\alpha_i \mathbf{u}_i)_f \varphi_i - \mathbf{u}_i \sum_f \alpha_{i,f} \varphi_i = \mathbf{R}_i \quad (4.9)$$

Aquí \mathbf{u}_i y α_i han sido usadas indistintamente para representar las variables en su forma continua y en su forma discreta centrada en celda. Esta formulación es actualmente adoptada en muchos códigos computacionales conocidos en la comunidad [90, 89, 70]. En lenguaje de OpenFOAM®, esta formulación se escribe como:

```
fvVectorMatrix UEqn
(
    fvm::ddt(alpha, U)
    - fvc::Sp(fvc::ddt(alpha), U)
    + fvc::div(alpha*f*phi, U)
    - fvc::Sp(fvc::div(alpha*f*phi), U)
    - fvc::Sp(Rc)
);
```

Aquí `ddt` es el operador derivada temporal, `Sp` es usado para referirse a los términos fuente reactivos y `div` es el operador divergencia. El término `Rc` usualmente representa los términos difusivos, reactivos y fuente en la ecuación de momento, pero aquí es expresado de forma condensada en un solo término para favorecer la claridad. Los términos advectivos son discretizados de forma explícita (a través del operador `fvc`) para simplificar el análisis posterior. Además:

```
surfaceScalarField alphaf = fvc::interpolate(alpha);
surfaceScalarField phi = linearInterpolate(U) & mesh.Sf();
```

donde el operador `interpolate` interpola a las caras los valores centrados en celda de acuerdo al esquema seleccionado. Además, el flujo `phi` es una interpolación lineal de los valores de las velocidades en centro de celda.

4.2.2. Formulación no-conservativa

Por otro lado, la formulación no-conservativa puede obtenerse operando sobre el segundo y cuarto término de la Ec. (4.7), de modo de arribar a la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \mathbf{u}_i) + \alpha_i \mathbf{u}_i \cdot \nabla \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} = \mathbf{R}_i \quad (4.10)$$

La Ec. (4.10) será referenciada como la *forma no-conservativa*. Esta forma puede considerarse en algún aspecto como no natural en el marco de métodos numéricos basados en la forma integral de las ecuaciones de balance. Esto se debe a que en ellos el teorema de Gauss no simplifica las derivadas espaciales, siendo de esta manera poco utilizada en los modelos computacionales, con algunas pocas excepciones [104]. La forma semi-discreta de la Ec. (4.10) es obtenida al considerar:

$$\int_V \alpha_i \mathbf{u}_i \cdot \nabla \mathbf{u}_i dV \approx \alpha_i \mathbf{u}_i \cdot \sum_f \mathbf{S} \mathbf{u}_{i,f} \quad (4.11)$$

y así arribar a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \mathbf{u}_i) - \mathbf{u}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \alpha_i \mathbf{u}_i \cdot \sum_f \mathbf{S} \mathbf{u}_{i,f} = \mathbf{R}_i \quad (4.12)$$

Lo cual puede expresarse en código de OpenFOAM® como:

```
fvVectorMatrix UEqn
(
    fvm::ddt(alpha, U)
    - fvc::Sp(fvc::ddt(alpha), U)
    + ((alpha*U) & fvc::grad(U))
    - fvc::Sp(Rc)
);
```

4.2.3. Formulación fase-intensiva

Park [28] ha mostrado las diferencias de utilizar ambas formulaciones (Ecs. (4.9) y (4.12)) en algunos casos particulares, enfatizando en la importancia de utilizar una formulación tan conservativa como sea posible para poder predecir de forma correcta el campo de velocidades. Este análisis es retomado aquí con la incorporación de una forma no-conservativa más

comúnmente adoptada en códigos computacionales: la *forma fase-intensiva* [27, 89]. Esta formulación puede obtenerse reescribiendo el producto escalar del segundo término de la Ec. (4.10):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \mathbf{u}_i) + \alpha_i \nabla \cdot (\mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) - \alpha_i \mathbf{u}_i (\nabla \cdot \mathbf{u}_i) - \mathbf{u}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} = \mathbf{R}_i \quad (4.13)$$

La versión semi-discreta de esta formulación es obtenida reescribiendo el segundo y tercer término de la Ec. (4.13) como:

$$\int_V \alpha_i \nabla \cdot (\mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) dV - \int_V \alpha_i \mathbf{u}_i (\nabla \cdot \mathbf{u}_i) dV \approx \alpha_i \sum_f \mathbf{u}_{i,f} \varphi_i - \alpha_i \mathbf{u}_i \sum_f \varphi_i \quad (4.14)$$

y finalmente

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \mathbf{u}_i) - \mathbf{u}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \alpha_i \sum_f \mathbf{u}_{i,f} \varphi_i - \alpha_i \mathbf{u}_i \sum_f \varphi_i = \mathbf{R}_i \quad (4.15)$$

que puede ser escrito en código de OpenFOAM® como:

```
fvVectorMatrix UEqn
(
    fvm::ddt(alpha, U)
    - fvc::Sp(fvc::ddt(alpha), U)
    + alpha*fvc::div(phi, U)
    - (alpha*U)*fvc::div(phi)
    - fvc::Sp(Rc)
);
```

4.2.4. Cuantificación de las diferencias

El análisis hecho para la ecuación de Burgers puede extenderse a TFM en problemas unidimensionales como se verá a continuación. Una manera completamente discreta de la *forma conservativa* puede obtenerse utilizando un esquema Upwind para la interpolación en caras y forward-Euler para las derivadas temporales. De esta forma, la Ec. (4.9) resulta:

$$\begin{aligned} \frac{V}{\Delta t} \alpha_k^n (u_k^{n+1} - u_k^n) - \frac{V}{\Delta t} u_k^n (\alpha_k^n - \alpha_k^{n-1}) + (\alpha^n u^n)_{k+\frac{1}{2}} \varphi_{k+\frac{1}{2}}^n + (\alpha^n u^n)_{k-\frac{1}{2}} \varphi_{k-\frac{1}{2}}^n - u_k^n \alpha_{k+\frac{1}{2}}^n \varphi_{k+\frac{1}{2}}^n \\ - u_k^n \alpha_{k-\frac{1}{2}}^n \varphi_{k-\frac{1}{2}}^n = R_k^n V \end{aligned} \quad (4.16)$$

donde el índice en forma de fracción representa las interpolaciones en caras de los valores centrados en celda. Entonces:

$$\begin{aligned}
& \alpha_k^n (u_k^{n+1} - u_k^n) \left(\frac{V}{\Delta t} \right) - u_k^n (\alpha_k^n - \alpha_k^{n-1}) \left(\frac{V}{\Delta t} \right) + \alpha_k^n u_k^n \left(\frac{u_{k+1}^n + u_k^n}{2} \right) \left(\frac{V}{\Delta x} \right) \\
& + \alpha_{k-1}^n u_{k-1}^n \left(\frac{u_k^n + u_{k-1}^n}{2} \right) \left(\frac{V}{\Delta x} \right) - \alpha_k^n u_k^n \left(\frac{u_{k+1}^n + u_k^n}{2} \right) \left(\frac{V}{\Delta x} \right) - \alpha_{k-1}^n u_k^n \left(\frac{u_k^n + u_{k-1}^n}{2} \right) \left(\frac{V}{\Delta x} \right) \\
& = R_k^n V
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Esto lleva a una expresión para el siguiente paso de tiempo de la forma:

$$(u_k^{n+1})_C = u_k^n \left(2 - \frac{\alpha_k^{n-1}}{\alpha_k^n} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\alpha_k^n} R_k^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{\alpha_{k-1}^n}{2\alpha_k^n} \left[(u_k^n)^2 - (u_{k-1}^n)^2 \right] \tag{4.18}$$

El mismo procedimiento puede realizarse para las formulaciones no-conservativas, obteniendo así:

$$(u_k^{n+1})_{NC} = u_k^n \left(2 - \frac{\alpha_k^{n-1}}{\alpha_k^n} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\alpha_k^n} R_k^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u_k^n (u_k^n - u_{k-1}^n) \tag{4.19}$$

$$(u_k^{n+1})_{PI} = u_k^n \left(2 - \frac{\alpha_k^{n-1}}{\alpha_k^n} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\alpha_k^n} R_k^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{2} \left[(u_k^n)^2 - (u_{k-1}^n)^2 \right] \tag{4.20}$$

donde el subíndice C corresponde a la *forma conservativa*, el subíndice NC corresponde a la *forma no-conservativa* y el subíndice PI corresponde a la *forma fase-intensiva*. El índice de fase ha sido omitido para mantener la simplicidad del análisis. El lector puede notar que las Ecs. (4.18), (4.19) y (4.20) son iguales con excepción del último término. De esta forma, las diferencias entre estas expresiones estarán dadas por estos términos.

4.3. Tratamiento ante la desaparición de una fase

El límite cuando α_s tiende a cero es un detalle que está fuertemente relacionado al tratamiento de la ecuación de momento dado que, en estas condiciones, las ecuaciones en su *forma conservativa* se vuelven singulares. Esto se traduce en un impedimento para la convergencia del método iterativo.

Este problema puede evitarse especificando que la velocidad de la fase dispersa sea igual a la de la fase continua en aquellas celdas del dominio discreto en donde la fracción α_s adquiere

valores debajo de un cierto valor crítico. Una forma natural de lograr esto es preservar la fuerza de arrastre como único término remanente no-nulo cuando $\alpha_s \rightarrow 0$. En estas condiciones, la ecuación de momento para dicha fase resulta:

$$\frac{K_{sg}}{\rho_s}(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) = 0 \quad (4.21)$$

Si $K_{sg} \neq 0$, entonces $\mathbf{u}_s = \mathbf{u}_g$, lo cual puede ser garantizado (por ejemplo utilizando el modelo de Wen-Yu) mediante:

$$K_{sg} = 0,75 \frac{C_d \alpha_{s,low} \alpha_g^{-1,65} \rho_g}{d_p} \max(|\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|, U_{r,low}) \quad (4.22)$$

donde $\alpha_{s,low}$ y $U_{r,low}$ son algunos valores mínimos para evitar expresiones singulares. Este método está actualmente implementado en OpenFOAM®[89]. Sin embargo, a pesar de que este método puede ser considerado físicamente adecuado (la velocidad de la fase dispersa tiende a la de la fase continua a medida que la fracción de fase dispersa se acerca a cero), presenta desventajas. Por ejemplo, en un problema de lechos fluidizados, las partículas en muy bajas concentraciones adquieren la velocidad del gas y terminan saliendo del dominio generando una pérdida de masa sólida.

Otra alternativa para evitar una ecuación de momento singular sin los problemas mencionados, es calcular \mathbf{u}_s a partir de un balance entre las fuerzas de arrastre, flotación y esfuerzos normales. Esto lleva a una ecuación de momento que puede ser escrita como:

$$0 = -\frac{\alpha_{s,low}}{\rho_s} \nabla p - \frac{1}{\rho_s} \nabla p_s(\alpha_{s,low}) + \alpha_{s,low} \mathbf{g} + \frac{K_{sg}(\alpha_{s,low})}{\rho_s} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) \quad (4.23)$$

La *forma fase-intensiva*, en este sentido, tiene relativamente algunas ventajas siguiendo el procedimiento de Oliveira *et al.* [27]. Aquí, los primeros dos términos de las Ecs. (4.9), (4.12) y (4.15) pueden ser reescritos como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \mathbf{u}_i) - \mathbf{u}_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} = \alpha_i \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} \quad (4.24)$$

Esto permite dividir cada uno de los términos de la Ec. (4.10) por α_s de modo de aislar la singularidad solo al tensor de tensiones sólido que resulta proporcional a $\nabla \alpha_s / \alpha_s$ y puede limitarse mediante manipulación numérica.

Aquí, para mantener las mismas condiciones y poder realizar comparaciones entre las distintas formas de tratamiento del término advectivo en el modelo continuo, se adopta un

criterio único. Este consiste en ajustar la velocidad de sólido a cero cuando la fracción α_s adquiere valores por debajo de un valor crítico mínimo. Sumado a esto, dado que diferentes formulaciones del término transitorio también pueden contribuir a las diferencias entre las predicciones numéricas, estos términos serán formulados tal como son presentados en la Ec. (4.24). Esto se realiza para mantener el foco del análisis entre las distintas posibles formulaciones del término advectivo.

4.4. Validación en casos prácticos

4.4.1. Problema de Dam Break para ecuaciones de Shallow Water

Para ilustrar la precisión relativa de los 3 métodos mencionados, se considerará un problema unidimensional de Dam Break. Aquí se utilizarán las ecuaciones de Shallow Water para predecir el campo de velocidades u y α , siendo este último el nivel de líquido (este cumple un rol similar al de la fracción de fase en TFM).

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha u) = 0 \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha u) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha u^2) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} g \alpha^2 \right) = 0 \quad (4.26)$$

con las siguientes condiciones iniciales:

$$u = 0, \quad x \in (-5; 5)$$

$$\alpha = \begin{cases} 3, & x \in (-5; 0) \\ 1, & x \in [0; 5) \end{cases} \quad (4.27)$$

Este modelo es mucho más simple que el modelo tridimensional de dos fases, sin embargo, permite obtener una solución analítica para comparar con las predicciones numéricas. Esto puede realizarse mediante un análisis de autovalores, lo cual lleva a una expresión para la velocidad del frente de onda dada por $s = u + g\alpha$ [30]. Esta solución, para un dado instante de tiempo y para las distintas formulaciones del término advectivo, puede apreciarse en la Fig. 4.1. Aquí, una onda de rarefacción viaja hacia la izquierda mientras una onda de choque viaja hacia la derecha. Puede apreciarse que para variaciones suaves del campo transportado (por

ejemplo en la onda de rarefacción), no se aprecian diferencias entre las distintas formulaciones. Sin embargo, en la zona de la onda de choque, la *forma conservativa* predice resultados más precisos.

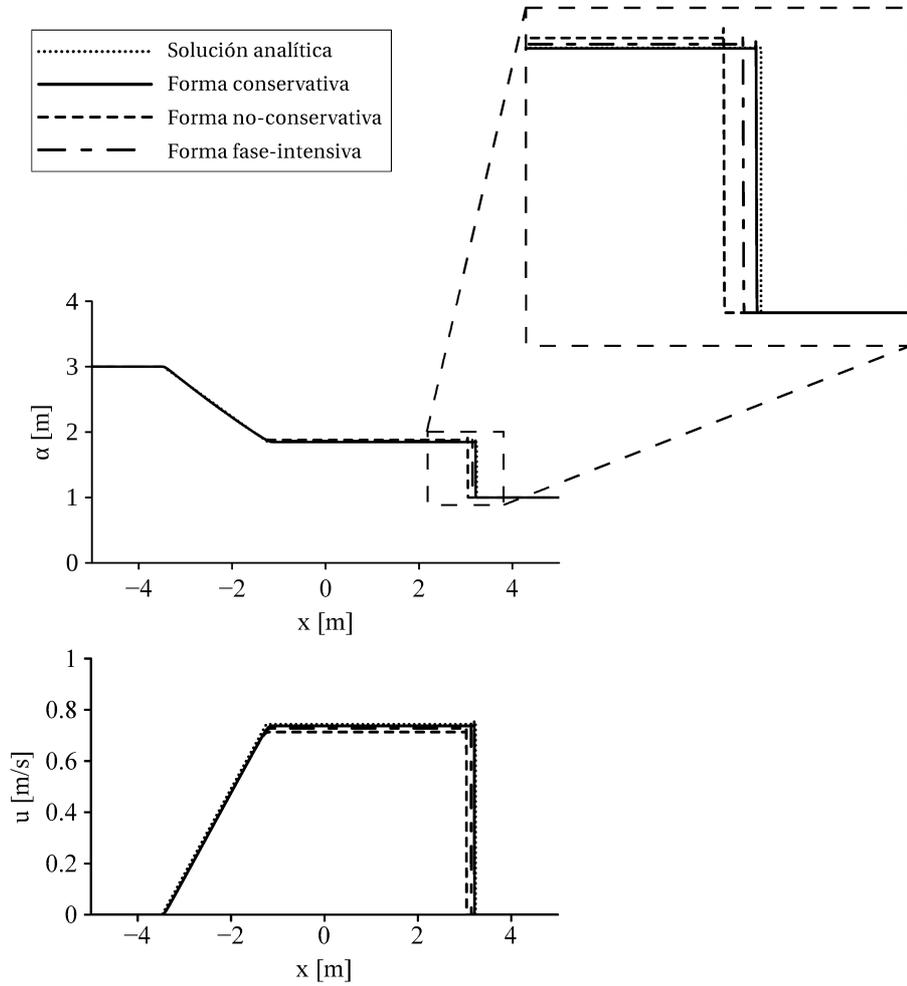


Figura 4.1: Nivel de líquido y velocidad en $t = 2$ s para las diferentes formulaciones

Las diferencias entre las soluciones de las distintas formulaciones consideradas, pueden ser cuantificadas para un dado paso de tiempo mediante la sustracción de la Ec. (4.18), Ec. (4.19) y Ec. (4.20) unas con otras:

$$d_{C-PI} = \frac{1}{2} \Delta x \Delta t \left(\frac{1}{\alpha_k^n} \right) \left[\frac{(u_k^n)^2 - (u_{k-1}^n)^2}{\Delta x} \right] \left(\frac{\alpha_k^n - \alpha_{k-1}^n}{\Delta x} \right) = \frac{1}{2} \Delta x \Delta t \left(\frac{1}{\alpha} \right) \alpha_x (u^2)_x \quad (4.28)$$

$$d_{PI-NC} = \frac{1}{2} \Delta x \Delta t \left(\frac{u_k^n - u_{k-1}^n}{\Delta x} \right)^2 = \frac{1}{2} \Delta x \Delta t (u_x)^2 \quad (4.29)$$

$$d_{C-NC} = d_{C-PI} + d_{PI-NC} = \frac{1}{2} \Delta x \Delta t \left[\left(\frac{1}{\alpha} \right) \alpha_x (u^2)_x + (u_x)^2 \right] \quad (4.30)$$

Aquí pueden realizarse varias observaciones de estas expresiones. En todos los casos, estas diferencias se incrementan cuando hay presencia de discontinuidades en los campos u y α . El lector puede notar que la Ec. (4.29) es igual a la Ec. (4.5). Esto es esperable dado que los términos advectivos para TFM y la ecuación de Burgers son iguales, excepto por la presencia de α_i . Sin embargo, como resulta claro de la Ec. (4.29), este campo no tiene un impacto sobre las diferencias entre las predicciones de velocidad de la *forma fase-intensiva* y la *forma no-conservativa*. Además, esta expresión es siempre positiva cuando el campo de velocidades varía, lo que implica que, para un problema unidimensional, la *forma fase-intensiva* siempre predice una velocidad del frente de onda mayor a la de la *forma no-conservativa*. El análisis de las Ecs. (4.28) y (4.30), sin embargo, no es directo. Las diferencias entre las formulaciones no-conservativas con respecto a la formulación conservativa tienen impacto sobre las variaciones del campo α . Es por esto que estas expresiones toman valores tanto positivos como negativos dependiendo del signo de los saltos relativos de los campos u y α .

La *forma fase-intensiva* ha sido muy adoptada en códigos multifásicos dada su robustez para tratar problemas con desaparición de fases, pero poco se ha discutido en la literatura acerca de su precisión respecto al uso de formulaciones conservativas. Park *et al.* [28] ha analizado las diferencias entre la *forma conservativa* y la *forma no-conservativa* mediante su aplicación en ejemplos prácticos. Sin embargo, como se muestra en la Ec. (4.29), las diferencias entre la *forma fase-intensiva* y la *forma no-conservativa* pueden también ser muy significativas. De hecho, dependiendo del caso estudiado, la *forma fase-intensiva* puede predecir resultados más cercanos a la *forma conservativa* que los propios de la *forma no-conservativa* (como se expuso en el ejemplo anterior). En general:

$$\text{si } \alpha_x (u^2)_x \geq 0 \implies |d_{C-NC}| \geq |d_{C-PI}| \quad (4.31)$$

lo que significa que, con respecto a la *forma conservativa* de la solución de velocidad, la *forma fase-intensiva* dará un resultado más preciso que la *forma no-conservativa*. Sin embargo, esto no está garantizado cuando α y u^2 tienen variaciones opuestas. En estas condiciones, pequeños valores de α_x con respecto a u_x pueden favorecer la precisión de la *forma fase-intensiva* dado

que:

$$\lim_{\alpha_x \rightarrow 0} |d_{C-PI}| = 0 \quad (4.32)$$

y:

$$\lim_{\alpha_x \rightarrow 0} |d_{C-NC}| = |d_{PI-NC}| \quad (4.33)$$

La diferencia entre las predicciones de velocidad de cada formulación ha sido establecida y cuantificada para una dada discretización en un problema unidimensional. Los siguientes casos permitirán ilustrar como surgen estas diferencias en problemas bidimensionales, donde las ondas de choque son transportadas en múltiples direcciones. Las mismas conclusiones pueden ser extendidas a estos problemas al considerar que el sistema discreto puede expresarse como:

$$\mathbf{A} \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{v} \end{pmatrix}^{n+1} = \mathbf{B}_{\{C,NC,PI\}} \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{v} \end{pmatrix}^n + \begin{pmatrix} r_u \\ r_v \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

donde \mathbf{A} y \mathbf{B} son matrices de discretización, \underline{u} y \underline{v} son los vectores velocidad que contienen los valores en celdas de las componentes horizontales y verticales respectivamente y r_u y r_v contienen los términos fuente de cada componente. Siguiendo las mismas discretizaciones explícitas en tiempo como en el caso unidimensional, son esperables diferentes predicciones de velocidad debido a la matriz de coeficientes \mathbf{B} , que resulta de los distintos procedimientos de discretización dado por las Ecs. (4.9), (4.12) y (4.15).

A diferencia del caso unidimensional de Dam Break, en los siguientes ejemplos no se dispone de una solución analítica. No obstante, aún existen características de la solución que pueden ser tenidas en cuenta para determinar los niveles relativos de precisión de cada formulación (*i.e.* análisis de convergencia en malla, datos experimentales, etc.).

4.4.2. Problema de inestabilidad de Rayleigh-Taylor

El problema de inestabilidad de Rayleigh-Taylor será analizado y resuelto por medio del TFM. El problema consiste en dos fases que se encuentran inicialmente segregadas en un recinto vertical. La fase más densa se encuentra en fase pura en la región superior del dominio como se puede apreciar en la Fig. 4.2. Una pequeña perturbación inicial en la interfase (descrita por la Ec. (4.35)) se verá amplificada debido al efecto de la gravedad y a la diferencia de densidades de ambas fases. Los parámetros físicos del problema son $\rho_s = 10,0 \text{ kg/m}^3$, $\rho_g = 1,0 \text{ kg/m}^3$,

$\nu_s = \nu_g = 0,01 \text{ m}^2/\text{s}$ y el dominio es un contenedor rectangular de $1\text{m} \times 5\text{m}$. Las dos fases son modeladas como fluidos, es decir, no se utilizan los modelos reológicos de cierre basados en KTGF-FT.

$$\delta_0 = -0,001 \left[\cos \left(\frac{2\pi x}{L} - \pi \right) + 1 \right] + 4,5 \quad (4.35)$$

Para este problema, se consideran los siguientes refinamientos de malla: 32×160 (4x), 64×320 (2x), 128×640 (1x), 256×1280 (1/2x) y 512×2560 (1/4x).

El crecimiento inicial de la amplitud de la interfase [105] estará dado por:

$$\delta = \delta_0 \cosh(\gamma t) \quad (4.36)$$

donde $\gamma = \sqrt{\mathcal{A}g\lambda}$, $\mathcal{A} = \frac{\rho_s - \rho_g}{\rho_s + \rho_g}$ es el número de Atwood y λ número de onda.

Durante la etapa de evolución lineal, se obtiene un buen nivel de concordancia entre la simulación y las predicciones teóricas para una malla de 1x (Fig. 4.3).

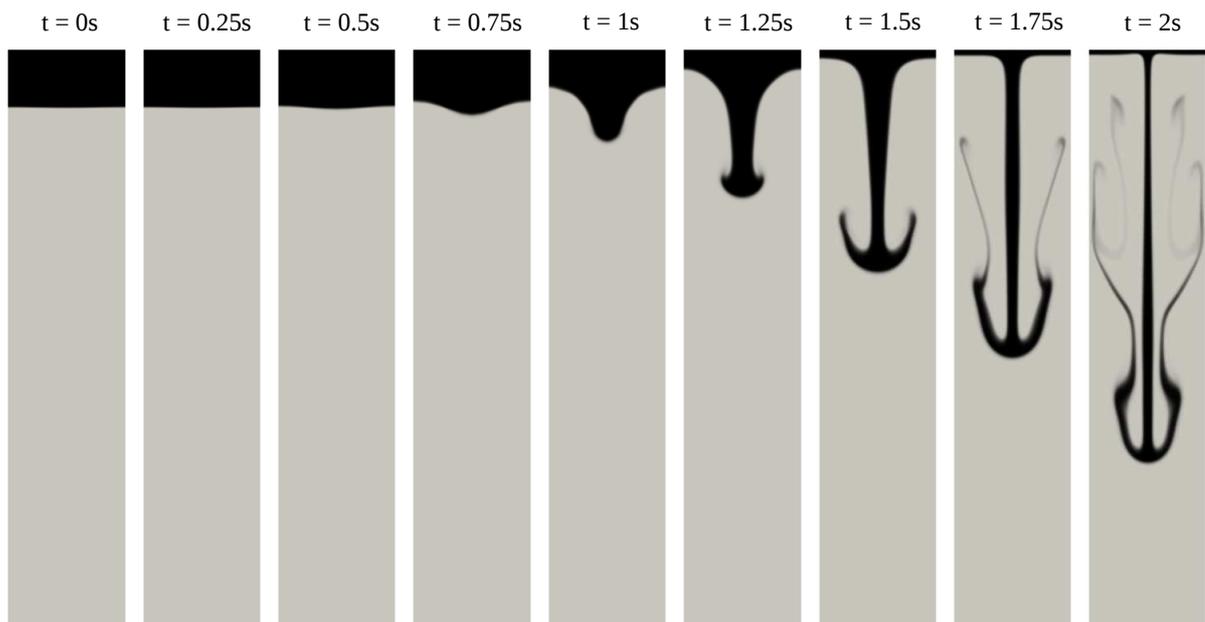


Figura 4.2: Evolución de la interfase en el problema de Rayleigh-Taylor

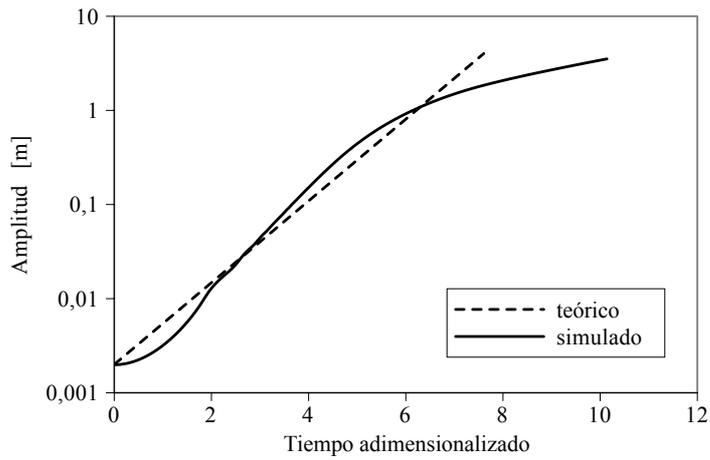


Figura 4.3: Crecimiento de la amplitud de la interfase simulada respecto a la predicción lineal

La comparación entre la formulación conservativa y no-conservativa se realiza utilizando interpolaciones con esquemas tipo Upwind y un tratamiento explícito de los términos advectivos. La solución tiende a diferir en las etapas más avanzadas, donde no se dispone de solución teórica. Sin embargo, la precisión de cada formulación puede ser estudiada mediante un análisis de convergencia en malla. La Fig. 4.4 muestra la forma de la interfase para diferentes refinamientos de malla en $t = 1,5$ s.

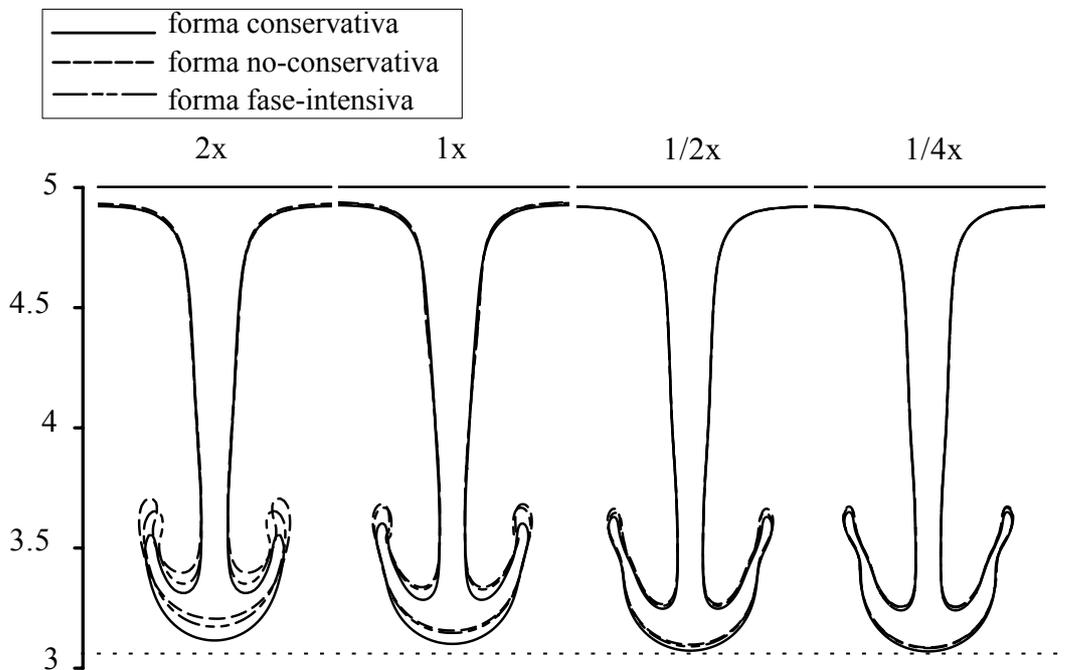


Figura 4.4: Líneas de contorno ($\alpha_g = 0,5$) para diferentes refinamientos de malla y formulaciones en $t = 1,5$ s

Al analizar la Fig. 4.5, resulta claro que todas las formulaciones tienden a la misma solución mientras la malla es refinada, pero la *forma conservativa* siempre predice crecimientos más veloces de la interfase y tiene mayor concordancia con la solución convergida en malla. Además, la *forma conservativa* predice, para una malla gruesa de $1x$, una amplitud similar a las predicciones de las formulaciones no-conservativas con la malla más fina ($1/4x$). Es por ello que la adopción de una *forma conservativa* puede ser utilizada para minimizar costos computacionales cuando el interés radica en predecir el avance de la interfase.

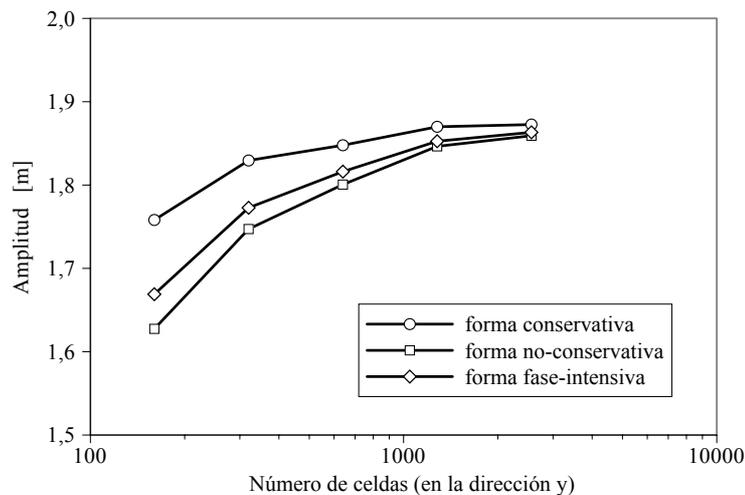


Figura 4.5: Amplitud de la interfase para diferentes formulaciones y refinamiento de malla

4.4.3. Crecimiento de una burbuja en un lecho fluidizado de partículas

A continuación se analizará un problema de crecimiento de una burbuja de aire en un lecho fluidizado de partículas. Este problema es considerado bidimensional y consiste en la inyección de aire por la parte inferior de un contenedor que esta parcialmente lleno con partículas en estado de mínima fluidización (Fig. 4.6). Los parámetros geométricos y físicos están basados en el experimento de Kuipers *et al.* [106] y se encuentran detallados en la Tabla 4.1.

Patil *et al.* [38] han puesto en evidencia la necesidad de tener en cuenta efectos friccionales como contribución al tensor de tensiones sólido para predecir correctamente la forma de la burbuja y la expansión del lecho. Sumado a esto, Passalacqua *et al.* [37] han mostrado que los modelos tradicionalmente utilizados de efectos friccionales fallan al momento de predecir correctamente el diámetro de burbuja. En su trabajo, muestran como esto puede remediarse

haciendo uso de un modelo modificado de Srivastava-Sunderasan (con $\alpha_{s,\min} = 0,63$ y $\alpha_{s,\max} = 0,65$).

Respecto al caso anteriormente visto, este problema introduce la complejidad de la interacción de partículas al análisis de conservatividad. La evolución del crecimiento de la burbuja hasta su desprendimiento de la boca de entrada puede apreciarse en la Fig. 4.7.

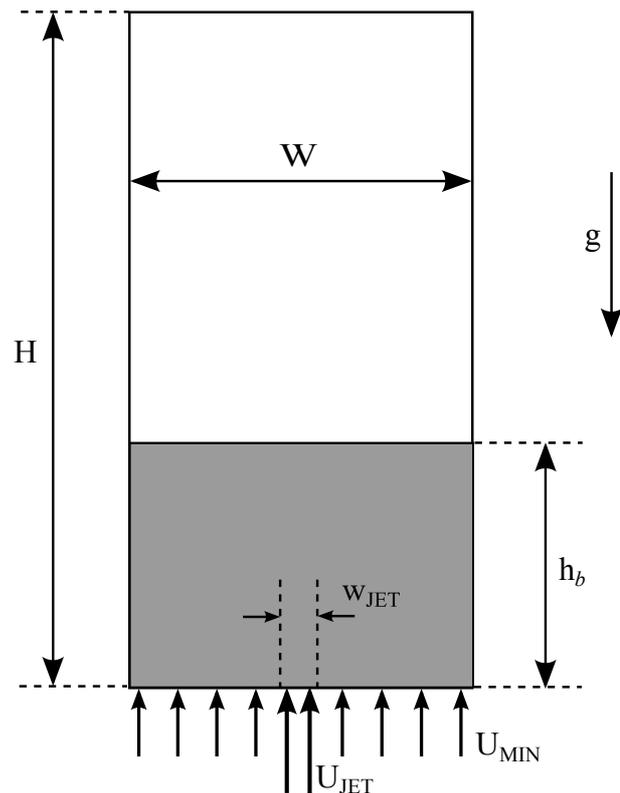


Figura 4.6: Esquema del problema de crecimiento de burbuja en lecho fluidizado

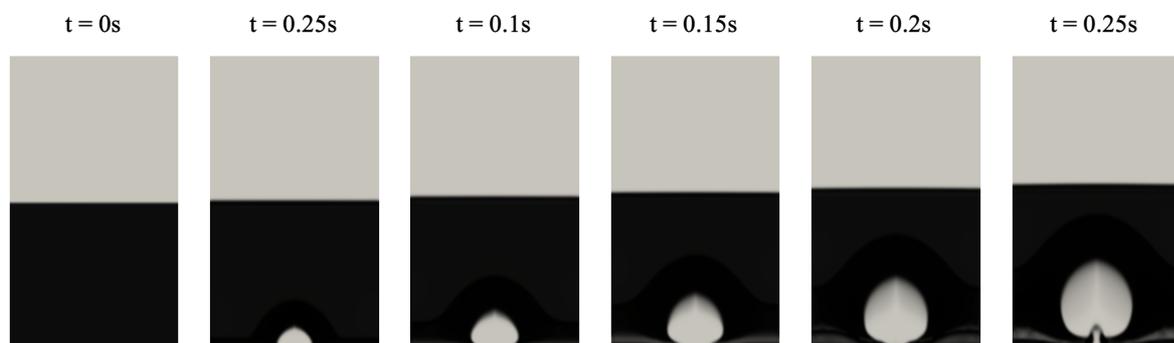


Figura 4.7: Evolución transitoria del crecimiento de una burbuja en un lecho fluidizado

Parámetro	Valor
Densidad del gas	1,2 kg/m ³
Viscosidad del gas	1,84 × 10 ⁻⁵ Pa s
Densidad de sólidos	2660 kg/m ³
Diámetro de partículas	500 × 10 ⁻⁶ m
Coefficiente de restitución	0,95
Ancho (W)	0,57 m
Alto (H)	1,0 m
Altura inicial del lecho (h _b)	0,5 m
Espesor del inyector del jet (w _{JET})	0,015 m
Malla	152 × 200 cells
Paso de tiempo	1,0 × 10 ⁻⁴ s
Modelo de arrastre	Gidaspow
Modelo de viscosidad friccional	Srivastava and Sunderasan
Límite de empaquetamiento	0,65
Fracción mínima de efectos friccionales	0,63
Velocidad de entrada del jet (U _{JET})	10,0 m/s
Velocidad de fluidización (U _{MIN})	0,25 m/s
Fracción inicial del lecho	0,598

Tabla 4.1: Modelos y parámetros involucrados

La Fig. 4.8 muestra las diferencias entre formulaciones en términos de forma de la burbuja y tiempo de desprendimiento. Puede apreciarse que la *forma fase-intensiva* predice una burbuja más estirada y puntiaguda, mientras que la *forma no-conservativa* predice una burbuja más redondeada. La *forma conservativa* predice una forma intermedia respecto a estas últimas. Además, distintos refinamientos de malla han sido propuestos y, basándose en la Tabla 4.2, puede apreciarse que la *forma conservativa* predice el menor tiempo de desprendimiento y la mayor concordancia con los resultados experimentales de la literatura [106].

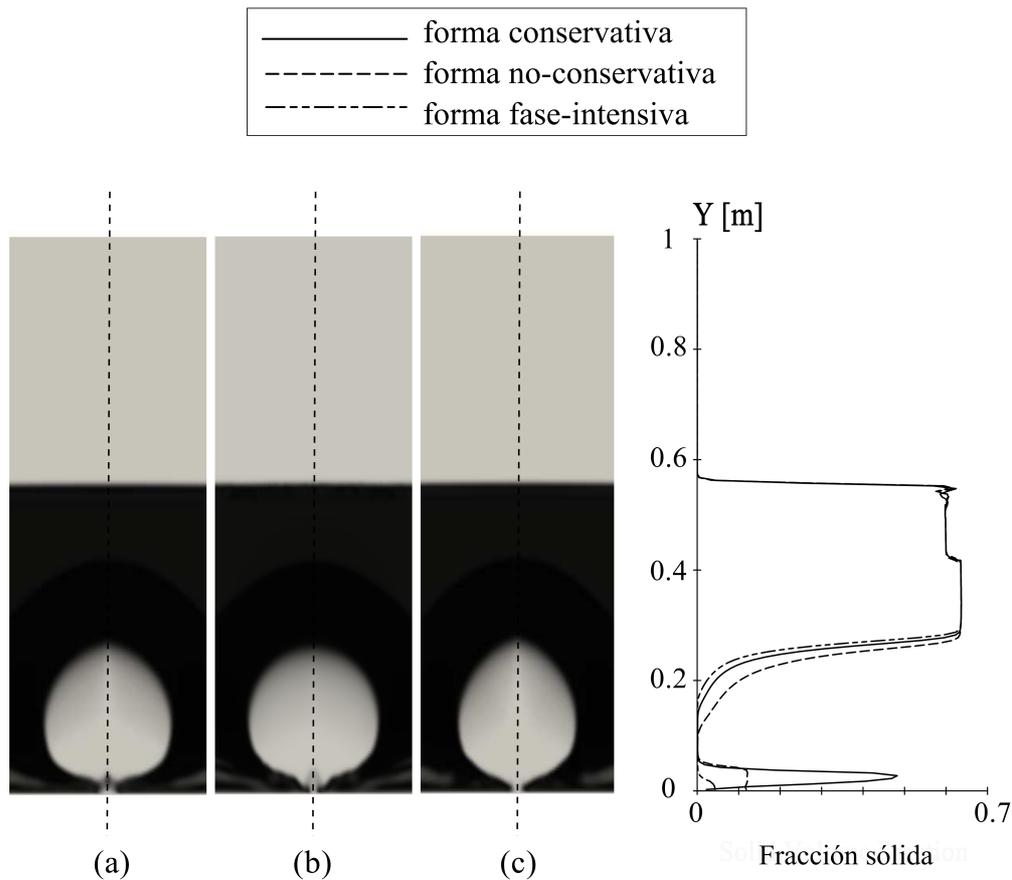


Figura 4.8: Forma de la burbuja en $t= 0,22$ s para (a) la *forma conservativa*, (b) la *forma no-conservativa* y (c) la *forma fase-intensiva*

Experimento	0,170 s		
Refinamiento de malla	C	NC	PI
1/2x (304 × 400 celdas)	0,176 s	—	0,201 s
1x (152 × 200 celdas)	0,182 s	0,182 s	0,205 s
2x (76 × 100 celdas)	0,180 s	0,196 s	0,194 s
4x (38 × 50 celdas)	0,182 s	0,200 s	0,198 s

Tabla 4.2: Tiempo de desprendimiento para distintas mallas y distintas formulaciones

4.4.4. Lecho de partículas uniformemente fluidizado

En el siguiente problema, se estudiará el efecto de las distintas formulaciones en un lecho de partículas uniformemente fluidizado en régimen burbujeante (Fig. 4.9). Aquí se ha dejado

de lado la *forma no-conservativa* ya que ha mostrado resultados altamente imprecisos en los problemas anteriormente vistos. Aquí se estudiarán los resultados para la *forma conservativa* y la *forma fase-intensiva* con los parámetros descritos en la Tabla 4.3.

Parámetro	Valor
Densidad de gas	1,4 kg/m ³
Viscosidad de gas	1,8 × 10 ⁻⁵ Pa s
Densidad de sólidos	2500 kg/m ³
Diámetro de partículas	350 μm
Coefficiente de restitución entre partículas	0.8
Ancho (W)	0,138 m
Alto (H)	1 m
Altura del lecho inicial (h _b)	0,2 m
Malla	14 × 100 cells
Paso de tiempo	1,0 × 10 ⁻⁴ s
Tiempo de simulación físico	30 s
Discretización temporal	2do orden implícito
Interpolación de divergencia	Diferencias centradas
Modelo de arrastre	Gidaspow
Condición de borde para la velocidad	Johnson-Jackson (ver Apéndice D)
Condición de borde para la energía granular	Johnson-Jackson (ver Apéndice D)
Velocidad de gas de entrada (U _{IN})	0,54 m/s
Presión exterior	0 Pa
Fracción de sólido inicial	0,58

Tabla 4.3: Parámetros generales para el problema de lecho fluidizado

Las Figs. 4.10, 4.11 y 4.12 muestran distribuciones de partículas y velocidades verticales de partículas promediadas en el tiempo. Pueden apreciarse ligeras diferencias en la concentración de partículas en la región superior del lecho. Sin embargo, las diferencias son mínimas en la zona media y la expansión del lecho se encuentran en concordancia en ambas formulaciones.

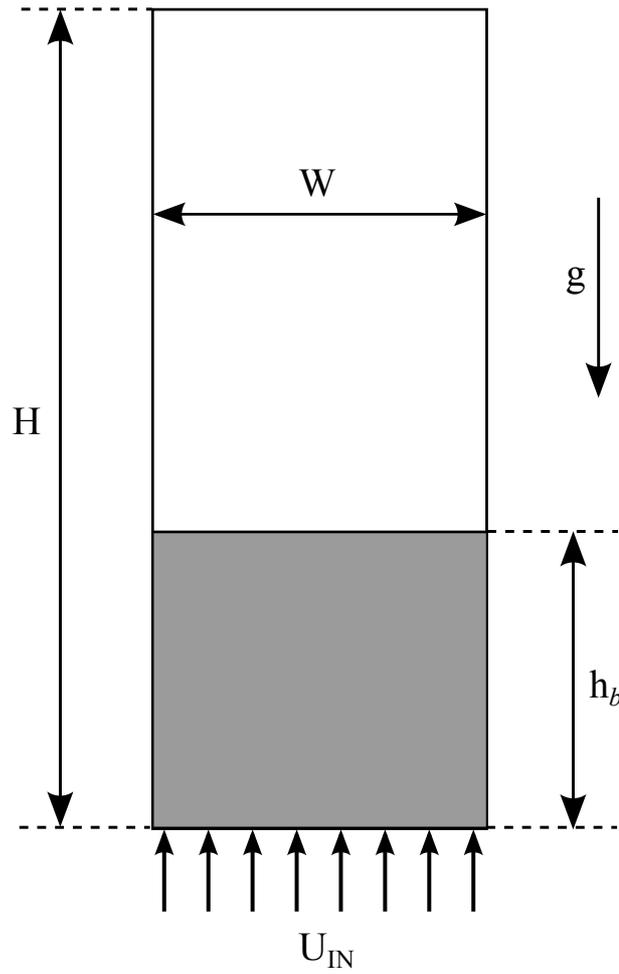


Figura 4.9: Esquema de lecho fluidizado burbujeante

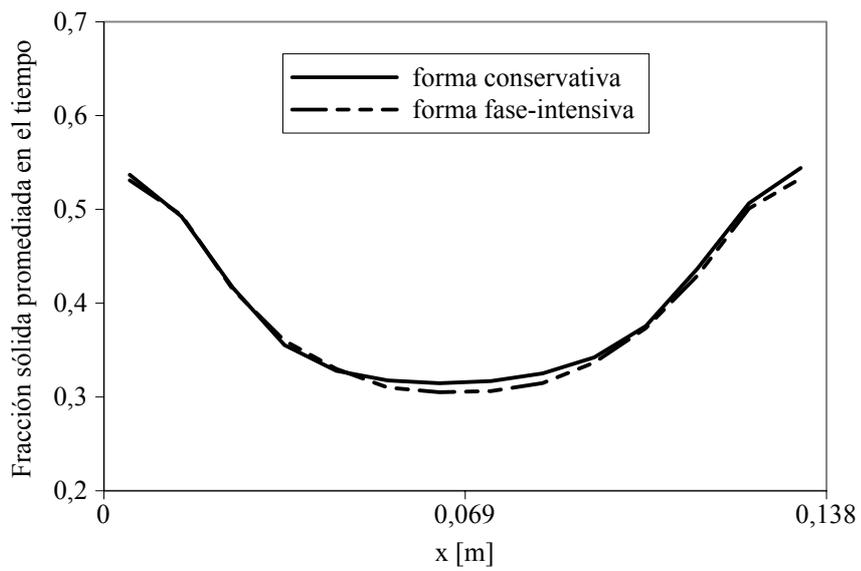


Figura 4.10: Fracción α media en $y = 0,16$ m para diferentes formulaciones

A diferencia de los casos vistos hasta aquí, en este problema, la formación de burbujas, crecimiento y coalescencia inducen ondas de choque en múltiples direcciones. Debido a esto, la práctica de promediado temporal tiende a mitigar las diferencias substanciales entre las predicciones de las diferentes formulaciones de los términos advectivos.

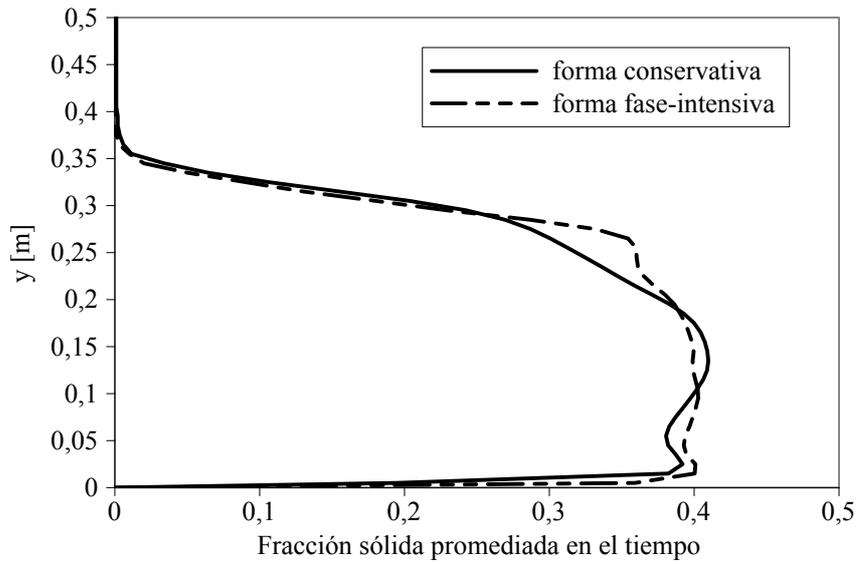


Figura 4.11: Velocidad vertical de partículas media en $y = 0,16$ m

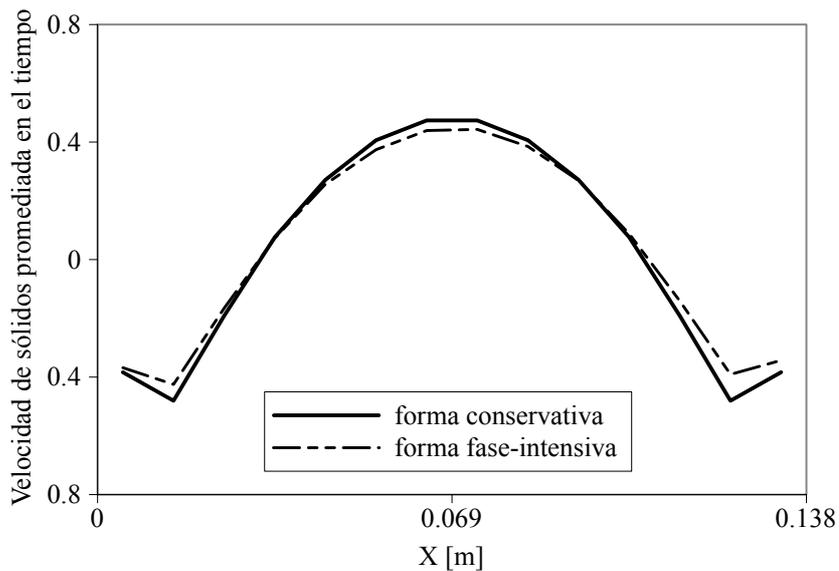


Figura 4.12: Fracción α media sobre el eje vertical para diferentes formulaciones

4.5. Análisis de los resultados

El estudio de las distintas formulaciones del término advectivo de las ecuaciones de momento ha puesto de manifiesto varios aspectos a tener en cuenta.

En el análisis unidimensional de problemas con soluciones analíticas, se han cuantificado las diferencias para los distintos esquemas de discretización. Aquí se ha observado que la *forma fase-intensiva* siempre predice una mayor velocidad del frente de onda de choque respecto a la *forma no-conservativa* y su diferencia con la predicción de la *forma conservativa* depende de las variaciones relativas de α y u . También se ha discutido acerca de las condiciones en las que se minimizan estas diferencias. Luego, este análisis ha sido extendido a problemas bidimensionales. En particular, en el problema de inestabilidad de Rayleigh-Taylor, se ha visto que la adopción de una *forma conservativa* resulta en un ahorro de los costos computacionales al permitir el uso de mallas gruesas con resultados de la misma precisión que con formulaciones no-conservativas en mallas significativamente más finas. Luego, en el problema de crecimiento de una burbuja en un lecho fluidizado, se ha visto que todas las formulaciones predicen formas de burbuja distintas, siendo la formulación conservativa la de mayor similitud respecto a los resultados experimentales en términos de tiempos de desprendimiento. Finalmente, en un problema de un lecho uniformemente fluidizado de partículas, se ha visto que el uso de formulaciones conservativas y no-conservativas dejan de tener relevancia sobre los resultados de variables promediadas en el tiempo, lo que es una práctica usual en este tipo de problemas. De estos análisis resulta:

- El uso de una *forma conservativa* resulta esencial para problemas transitorios con presencia de discontinuidades tipo ondas de choque (los cuales pueden encontrarse en múltiples problemas multifásicos en la realidad). La implementación de esta formulación debe hacerse conforme a un apropiado tratamiento de las ecuaciones ante las condiciones de desaparición de fase.
- El uso de una *forma no-conservativa* no es recomendada dado que no predice correctamente el campo de velocidades en gran parte de las aplicaciones en problemas multifásicos.
- El uso de la *forma fase-intensiva* predice campos de velocidades de baja precisión para

problemas que evolucionan en el tiempo y en presencia de discontinuidades tipo ondas de choque. Sin embargo, para el análisis de distribuciones promediadas en el tiempo, tiene un desempeño aceptable comparado con la formulación conservativa. Además, los problemas relacionados con la desaparición de fases pueden ser manipulados fácilmente mediante el uso de esta formulación.

“I would rather have questions that can't be answered than answers that can't be questioned.”

– Richard Feynman (1918-1988)

Capítulo 5

Estabilidad de algoritmos segregados a una fase

El modelo computacional de gas y partículas propuesto es resuelto por métodos segregados para el acople entre presión y las velocidades de cada fase. Los métodos segregados se basan en tratar parte de las ecuaciones a resolver de forma explícita, lo que puede generar problemas de estabilidad y convergencia del método iterativo. Para determinar bajo que condiciones se puede ver comprometida la estabilidad del modelo, se propone comenzar el estudio de problemas a una fase por medio de técnicas de descomposición de Fourier. En el siguiente capítulo, se extenderá la técnica propuesta a problemas más complejos con acoplamientos entre fases.

A continuación, se presenta el método de descomposición de Fourier (o von Neumann) [77] aplicado a varias variables, para luego determinar rangos de estabilidad en problemas unidimensionales. Posteriormente, se comparan los costos del método PISO en relación a otros métodos de la familia SIMPLE para niveles de amplificación dados y se extiende el análisis a problemas bidimensionales. Esto sienta las bases para determinar criterios de estabilidad para distintos métodos de acoplamiento segregados con distintos niveles de implícitud ¹. El uso de

¹Los principales resultados de este capítulo han sido publicados en el trabajo de Venier C.M., Pairetti C.I., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *On the stability analysis of the PISO algorithm*. Computers and Fluids vol. 147 p. 25-40. 2017. [107]

esta técnica para el análisis de problemas con más de un campo incógnita está inspirado en el trabajo de Miller [33] para métodos segregados estacionarios.

5.1. Análisis de estabilidad por el método de Fourier

Para analizar la estabilidad de los métodos de acoplamiento presión-velocidad segregados (e.g. SIMPLE y PISO), se parte del siguiente sistema correspondiente a la discretización de la ecuación de momento del continuo (Ec. (3.10)) en un dominio de FVM bidimensional en una malla uniforme y estructurada como se muestra en la Fig. 5.1.

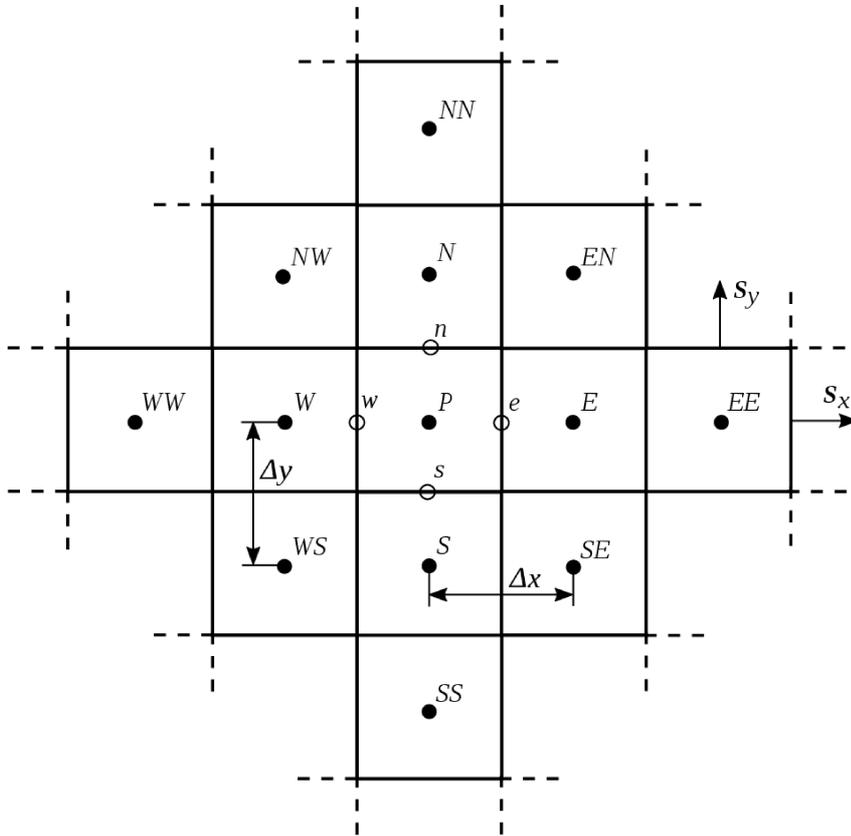


Figura 5.1: Molécula de celdas para una discretización uniforme 2D por FVM

$$(b_P + a_P)u_P^* + \sum_{NB} a_{NB}u_{NB}^* = b_P u_P^0 - V_P(\hat{\nabla}_x p)_P \quad (5.1)$$

$$(b_P + a_P)v_P^* + \sum_{NB} a_{NB}v_{NB}^* = b_P v_P^0 - V_P(\hat{\nabla}_y p)_P \quad (5.2)$$

Aquí puede notarse una clara similitud con la Ec. (3.22), con la diferencia de que en este caso no se consideran términos fuentes y la ecuación de momento se expresa mediante 2 ecuaciones escalares, una por cada componente de la velocidad \mathbf{u} : u y v . Se debe recordar que el coeficiente $b_P = \frac{V_P}{\Delta t}$ correspondiente a la discretización del término temporal y los coeficientes a_P y a_{NB} correspondientes a la discretización de los términos advectivos y difusivos. En particular, los subíndices en letras minúsculas se refieren a valores en caras, mientras que los subíndices con mayúsculas se refieren a valores en centros de celdas. Por otro lado, $\hat{\nabla}_x$ y $\hat{\nabla}_y$ son los operadores gradiente discretos en cada dirección Cartesiana. Por simplicidad del análisis, se considera un esquema temporal tipo *backward Euler* y un esquema *Upwind* para los términos de advección y así garantizar un comportamiento estable de la solución del sistema lineal de cada ecuación.

Basado en la discretización propuesta, la etapa predictor de momento puede expresarse como:

$$(b_P + a_P)u_P^* + a_W u_W^* + a_E u_E^* + a_S u_S^* + a_N u_N^* = b_P u_P^0 - \frac{S_x}{2}(p_E^0 - p_W^0) \quad (5.3)$$

$$(b_P + a_P)v_P^* + a_W v_W^* + a_E v_E^* + a_S v_S^* + a_N v_N^* = b_P v_P^0 - \frac{S_y}{2}(p_N^0 - p_S^0) \quad (5.4)$$

$$p_P^* = p_P^0 \quad (5.5)$$

El paso siguiente, común a los métodos segregados presentados, es la etapa correctora, compuesta por el ensamble y resolución de la ecuación de presión (Ecs. (3.20) y (3.24)) y la corrección explícita de la velocidad (Ecs. (3.21) y (3.25)). Para ello, cabe recordar que la conservación de la masa indica:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \implies \sum_{nb} \mathbf{u}_{nb}^{**} \cdot \mathbf{S}_{nb} = 0 \quad (5.6)$$

donde la divergencia se computa como la suma de flujos sobre las caras nb . Entonces, las correcciones de velocidad pueden expresarse como:

$$u_P^{**} = -\frac{1}{(b_P + a_P)}(a_W u_W^* + a_E u_E^* + a_S u_S^* + a_N u_N^*) + \frac{b_P}{(b_P + a_P)}u_P^0 - \frac{V_P}{(b_P + a_P)}(\hat{\nabla}_x p^{**})_P \quad (5.7)$$

$$v_P^{**} = -\frac{1}{(b_P + a_P)}(a_W v_W^* + a_E v_E^* + a_S v_S^* + a_N v_N^*) + \frac{b_P}{(b_P + a_P)}v_P^0 - \frac{V_P}{(b_P + a_P)}(\hat{\nabla}_y p^{**})_P \quad (5.8)$$

El lector puede notar que, para satisfacer exactamente la ecuación de momento discreta, u^{**} y v^{**} deberían ser empleados para los campos de velocidad en celdas vecinas. Este tratamiento es propio de los métodos segregados. En particular, el método SIMPLE busca mitigar este desfase mediante el uso de factores de sobre-relajación, mientras que el método PISO busca minimizarlas mediante el uso de múltiples pasos correctores [88].

Las Ecs. (5.7) y (5.8) pueden incorporarse en la Ec. (5.6) y obtener así una expresión para la ecuación de presión dada por:

$$\sum_{nb} \left[\frac{V_P}{(b_P + a_P)} \hat{\nabla} p^{**} \right]_{nb} \cdot \mathbf{S}_{nb} = \sum_{nb} \left[\tilde{\mathbf{H}}_P(\mathbf{u}_{NB}^*, \mathbf{u}_P^0) \right]_{nb} \cdot \mathbf{S}_{nb} \quad (5.9)$$

o bien:

$$\begin{aligned} \frac{V_P}{(b_P + a_P)} [(\hat{\nabla} p^{**})_e \cdot \mathbf{S}_e + (\hat{\nabla} p^{**})_w \cdot \mathbf{S}_w + (\hat{\nabla} p^{**})_n \cdot \mathbf{S}_n + (\hat{\nabla} p^{**})_s \cdot \mathbf{S}_s] = \\ \left[\tilde{\mathbf{H}}_P(\mathbf{u}_{NB}^*, \mathbf{u}_P^0) \right]_e \cdot \mathbf{S}_e + \left[\tilde{\mathbf{H}}_P(\mathbf{u}_{NB}^*, \mathbf{u}_P^0) \right]_w \cdot \mathbf{S}_w + \left[\tilde{\mathbf{H}}_P(\mathbf{u}_{NB}^*, \mathbf{u}_P^0) \right]_n \cdot \mathbf{S}_n + \left[\tilde{\mathbf{H}}_P(\mathbf{u}_{NB}^*, \mathbf{u}_P^0) \right]_s \cdot \mathbf{S}_s \end{aligned} \quad (5.10)$$

donde:

$$\tilde{\mathbf{H}}_P(\mathbf{u}_{NB}^*, \mathbf{u}_P^0) = - \sum_{NB} \frac{a_{NB}^u}{(b_P + a_P)} \mathbf{u}_{NB}^* + \frac{b_P}{(b_P + a_P)} \mathbf{u}_P^0 \quad (5.11)$$

Además, si se considera una malla uniforme y con flujos constantes, los coeficientes resultan:

$$\begin{aligned} a_P &= (a_P)_E = (a_P)_W = (a_P)_N = (a_P)_S \\ a_{NB} &= (a_{NB})_E = (a_{NB})_W = (a_{NB})_N = (a_{NB})_S \end{aligned} \quad (5.12)$$

Entonces, incluyendo la Ec. (5.11) en (5.10) y usando valores centrados en cara para el cálculo del gradiente de presión, se puede obtener la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} (S_x)^2 (p_E^{**} - 2p_P^{**} + p_W^{**}) + (S_y)^2 (p_N^{**} - 2p_P^{**} + p_S^{**}) = \\ \frac{S_x}{2} [(a_E - a_W)u_P^* - a_E u_{EE}^* + a_W u_{WW}^* - a_N u_{EN}^* - a_S u_{SE}^* + a_N u_{NW}^* + a_S u_{WS}^* + b_P (u_E^0 - u_W^0)] \\ \frac{S_y}{2} [(a_N - a_S)v_P^* - a_N v_{NN}^* + a_S v_{SS}^* - a_E v_{EN}^* + a_E v_{SE}^* - a_W v_{NW}^* + a_W v_{WS}^* + b_P (v_N^0 - v_S^0)] \end{aligned} \quad (5.13)$$

La resolución de la Ec. (5.13) no presenta problemas de inestabilidades tipo “checkerboard” debido a la forma de calcular el gradiente de presión de forma compacta. Esto está relacionado a la corrección de Rhie-Chow [91]. Un análisis más detallados se describe en el Apéndice B.

Una vez obtenida la presión, se corrigen explícitamente las componentes de la velocidad haciendo uso de las Ecs. (5.7) y (5.8):

$$u_P^{**} = -\frac{1}{(b_P + a_P)}(a_W u_W^* + a_E u_E^* + a_S u_S^* + a_N u_N^*) + \frac{b_P}{(b_P + a_P)} u_P^0 - \frac{S_x}{2(b_P + a_P)}(p_E^{**} - p_W^{**}) \quad (5.14)$$

$$v_P^{**} = -\frac{1}{(b_P + a_P)}(a_W v_W^* + a_E v_E^* + a_S v_S^* + a_N v_N^*) + \frac{b_P}{(b_P + a_P)} v_P^0 - \frac{S_y}{2(b_P + a_P)}(p_N^{**} - p_S^{**}) \quad (5.15)$$

El análisis de estabilidad de Fourier (también conocido como estabilidad de von Neumann) aplicado a métodos segregados busca determinar la amplificación del error entre iteraciones mediante una comparación de los coeficientes de la descomposición de Fourier de cada campo incógnita. En forma vectorial, se puede expresar:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_u \\ \varepsilon_v \\ \varepsilon_p \end{bmatrix}^k = \begin{bmatrix} u \\ v \\ p \end{bmatrix}^{n+1} - \begin{bmatrix} u \\ v \\ p \end{bmatrix}^k = \sum_{\theta=-\pi}^{\pi} \begin{bmatrix} \alpha_u \\ \alpha_v \\ \alpha_p \end{bmatrix}^k \exp \left[i \left(\theta_x \frac{x}{\Delta x} + \theta_y \frac{y}{\Delta y} \right) \right] \quad (5.16)$$

donde ε son los errores de los campos variable, α son denominados coeficientes de Fourier, k es el índice de iteración y n indica el paso de tiempo actual, siendo $n + 1$ la solución exacta del sistema algebraico. La frecuencia de la descomposición da un conjunto de valores discretos de θ , con $\theta_j = \frac{\pi}{N_j}$ y siendo N_j el numero de celdas en la dirección j . Para poder realizar la descomposición descripta, se debe contar con condiciones de borde cíclicas de todos los campos incógnita. Esta es una de las hipótesis del método, que difícilmente pueda cumplirse en problemas prácticos.

El factor de amplificación se define con la relación $\beta(\theta_x, \theta_y) = \frac{\alpha^{k+1}(\theta_x, \theta_y)}{\alpha^k(\theta_x, \theta_y)}$ y la condición $\max[\beta(\theta_x, \theta_y)] \leq 1$ debe satisfacerse para todas las frecuencias para garantizar estabilidad del esquema numérico. Esta es la condición de von Neumann [77] para problemas con múltiples variables.

Siguiendo las Ecs. (5.1), (5.2), (5.10), (5.14) y (5.15), correspondientes al paso predictor de momento y el paso corrector, y teniendo en cuenta que todas estas ecuaciones deben verificarse para u^{n+1} , v^{n+1} y p^{n+1} , se puede arribar a un conjunto de ecuaciones para los errores ε para

cada paso del método segregado. En particular, para el predictor de momento se tiene:

$$(b_P + a_P)(\varepsilon_u)_P^* + a_W(\varepsilon_u)_W^* + a_E(\varepsilon_u)_E^* + a_S(\varepsilon_u)_S^* + a_N(\varepsilon_u)_N^* = b_P(\varepsilon_u)_P^0 - \frac{S_x}{2} [(\varepsilon_p)_E^0 - (\varepsilon_p)_W^0] \quad (5.17)$$

$$(b_P + a_P)(\varepsilon_v)_P^* + a_W(\varepsilon_v)_W^* + a_E(\varepsilon_v)_E^* + a_S(\varepsilon_v)_S^* + a_N(\varepsilon_v)_N^* = b_P(\varepsilon_v)_P^0 - \frac{S_y}{2} [(\varepsilon_p)_N^0 - (\varepsilon_p)_S^0] \quad (5.18)$$

mientras que la ecuación de presión para el error es:

$$\begin{aligned} (S_x)^2 [(\varepsilon_p)_E^{**} - 2(\varepsilon_p)_P^{**} + (\varepsilon_p)_W^{**}] + (S_y)^2 [(\varepsilon_p)_N^{**} - 2(\varepsilon_p)_P^{**} + (\varepsilon_p)_S^{**}] = \\ \frac{S_x}{2} [(a_E - a_W)(\varepsilon_u)_P^* - a_E(\varepsilon_u)_{EE}^* + a_W(\varepsilon_u)_{WW}^* - a_N(\varepsilon_u)_{EN}^* - a_S(\varepsilon_u)_{SE}^* + a_N(\varepsilon_u)_{NW}^* + a_S(\varepsilon_u)_{WS}^*] \\ + \frac{S_y}{2} [(a_N - a_S)(\varepsilon_v)_P^* - a_N(\varepsilon_v)_{NN}^* + a_S(\varepsilon_v)_{SS}^* - a_E(\varepsilon_v)_{EN}^* + a_E(\varepsilon_v)_{SE}^* - a_W(\varepsilon_v)_{NW}^* + a_W(\varepsilon_v)_{WS}^*] \\ + \frac{S_x}{2} b_P [(\varepsilon_u)_E^0 - (\varepsilon_u)_W^0] + \frac{S_y}{2} b_P [(\varepsilon_v)_N^0 - (\varepsilon_v)_S^0] \end{aligned} \quad (5.19)$$

y la corrección explícita de la velocidad resulta:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_u)_P^{**} = - \frac{1}{(b_P + a_P)} (a_W(\varepsilon_u)_W^* + a_E(\varepsilon_u)_E^* + a_S(\varepsilon_u)_S^* + a_N(\varepsilon_u)_N^*) \\ + \frac{b_P}{(b_P + a_P)} (\varepsilon_u)_P^0 - \frac{S_x}{2(b_P + a_P)} [(\varepsilon_p)_E^{**} - (\varepsilon_p)_W^{**}] \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon_v)_P^{**} = - \frac{1}{(b_P + a_P)} (a_W(\varepsilon_v)_W^* + a_E(\varepsilon_v)_E^* + a_S(\varepsilon_v)_S^* + a_N(\varepsilon_v)_N^*) \\ + \frac{b_P}{(b_P + a_P)} (\varepsilon_v)_P^0 - \frac{S_y}{2(b_P + a_P)} [(\varepsilon_p)_N^{**} - (\varepsilon_p)_S^{**}] \end{aligned} \quad (5.21)$$

Ahora bien, reemplazando los campos error por medio de la Ec. (5.16) para un dado grupo de frecuencias (θ_x, θ_y) , las Ecs. (5.17) y (5.18) resultan:

$$\alpha_u^* = (P_u^{-1} b_P) \alpha_u^0 + [-P_u^{-1} i S_x \text{sen}(\theta_x)] \alpha_p^0 \quad (5.22)$$

$$\alpha_v^* = (P_u^{-1} b_P) \alpha_v^0 + [-P_u^{-1} i S_y \text{sen}(\theta_y)] \alpha_p^0 \quad (5.23)$$

siendo:

$$P_u = (a_P + b_P) + P'_u, \quad P'_u = a_E \exp(i\theta_x) + a_W \exp(-i\theta_x) + a_N \exp(i\theta_y) + a_S \exp(-i\theta_y), \quad (5.24)$$

En el paso predictor, la presión no sufre modificaciones. Es por esto que, para cada frecuencia, los coeficientes de Fourier no se ven alterados:

$$\alpha_p^* = \alpha_p^0 \quad (5.25)$$

Aplicando la misma metodología para la ecuación de presión, los coeficientes de Fourier son obtenidos aplicando la Ec. (5.16) en la Ec. (5.19), obteniendo así:

$$\begin{aligned} \alpha_p^{**} = & [-P_P^{-1} P'_u S_x i \text{sen}(\theta_x)] \alpha_u^* + [-P_P^{-1} P'_u S_y i \text{sen}(\theta_y)] \alpha_v^* \\ & + [P_P^{-1} b_P S_x i \text{sen}(\theta_x)] \alpha_u^0 + [P_P^{-1} b_P S_y i \text{sen}(\theta_y)] \alpha_v^0 \end{aligned} \quad (5.26)$$

donde:

$$P_P = 2(S_x)^2[\cos(\theta_x) - 1] + 2(S_y)^2[\cos(\theta_y) - 1] \quad (5.27)$$

Finalmente, los coeficientes de Fourier de la corrección explícita de la velocidad se obtienen de forma similar de las Ecs. (5.20) y (5.21):

$$\alpha_u^{**} = \left[-\frac{P'_u}{(b_P + a_P)} \right] \alpha_u^* + \left[\frac{b_P}{(b_P + a_P)} \right] \alpha_u^0 + \left[-\frac{S_x i}{(b_P + a_P)} \text{sen}(\theta_x) \right] \alpha_p^{**} \quad (5.28)$$

$$\alpha_v^{**} = \left[-\frac{P'_u}{(b_P + a_P)} \right] \alpha_v^* + \left[\frac{b_P}{(b_P + a_P)} \right] \alpha_v^0 + \left[-\frac{S_y i}{(b_P + a_P)} \text{sen}(\theta_y) \right] \alpha_p^{**} \quad (5.29)$$

Estas expresiones pueden reescribirse independientes de α_p^{**} aplicando la Ec. (5.26) sobre las Ecs. (5.28) y (5.29) para obtener:

$$\begin{aligned} \alpha_u^{**} = & \left\{ -\frac{P'_u}{(b_P + a_P)} [1 + (S_x)^2 P_P^{-1} \text{sen}(\theta_x)^2] \right\} \alpha_u^* \\ & + \left\{ -\frac{P'_u}{(b_P + a_P)} [S_x S_y P_P^{-1} \text{sen}(\theta_x) \text{sen}(\theta_y)] \right\} \alpha_v^* \\ & + \left\{ \frac{b_P}{(b_P + a_P)} [1 + (S_x)^2 P_P^{-1} \text{sen}(\theta_x)^2] \right\} \alpha_u^0 \\ & + \left\{ \frac{b_P}{(b_P + a_P)} [S_x S_y P_P^{-1} \text{sen}(\theta_x) \text{sen}(\theta_y)] \right\} \alpha_v^0 \end{aligned} \quad (5.30)$$

$$\begin{aligned} \alpha_v^{**} = & \left\{ -\frac{P'_u}{(b_P + a_P)} [1 + (S_y)^2 P_P^{-1} \text{sen}(\theta_y)^2] \right\} \alpha_v^* \\ & + \left\{ -\frac{P'_u}{(b_P + a_P)} [S_y S_x P_P^{-1} \text{sen}(\theta_y) \text{sen}(\theta_x)] \right\} \alpha_u^* \\ & + \left\{ \frac{b_P}{(b_P + a_P)} [1 + (S_y)^2 P_P^{-1} \text{sen}(\theta_y)^2] \right\} \alpha_v^0 \\ & + \left\{ \frac{b_P}{(b_P + a_P)} [S_y S_x P_P^{-1} \text{sen}(\theta_y) \text{sen}(\theta_x)] \right\} \alpha_u^0 \end{aligned} \quad (5.31)$$

Basandose en las relaciones entre coeficientes de Fourier, se puede obtener la forma matricial de la secuencia de amplificación. La amplificación para el paso predictor de momento puede expresarse como:

$$\begin{bmatrix} \alpha_u \\ \alpha_v \\ \alpha_p \end{bmatrix}^* = \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} \alpha_u \\ \alpha_v \\ \alpha_p \end{bmatrix}^0 \quad (5.32)$$

y para el paso corrector como:

$$\begin{bmatrix} \alpha_u \\ \alpha_v \\ \alpha_p \end{bmatrix}^{**} = \mathbf{A}_2 \begin{bmatrix} \alpha_u \\ \alpha_v \\ \alpha_p \end{bmatrix}^* + \mathbf{A}_3 \begin{bmatrix} \alpha_u \\ \alpha_v \\ \alpha_p \end{bmatrix}^0 \quad (5.33)$$

donde:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & c_1 \\ 0 & e_1 & f_1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} a_2 & b_2 & 0 \\ d_2 & e_2 & 0 \\ g_2 & h_2 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} a_3 & b_3 & 0 \\ d_3 & e_3 & 0 \\ g_3 & h_3 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.34)$$

y los coeficientes de las matrices se definen de acuerdo a las Ecs. (5.22), (5.23), (5.25), (5.26), (5.30) y (5.31) como:

$$\begin{aligned} a_2 &= -\frac{P'_u}{(b_P + a_P)} \left[1 + \frac{(S_x)^2 \text{sen}^2(\theta_x)}{P_P} \right] & a_3 &= -\frac{b_P}{P'_u} a_2 \\ a_1 = e_1 &= \frac{b_P}{P_u} & b_2 = d_2 &= -\frac{P'_u S_x S_y \text{sen}(\theta_x) \text{sen}(\theta_y)}{P_P (b_P + a_P)} & b_3 = d_3 &= -\frac{b_P}{P'_u} b_2 \\ c_1 &= -i \frac{S_x \text{sen}(\theta_x)}{P_u} & e_2 &= -\frac{P'_u}{(b_P + a_P)} \left[1 + \frac{(S_y)^2 \text{sen}^2(\theta_y)}{P_P} \right] & e_3 &= -\frac{b_P}{P'_u} e_2 \\ f_1 &= -i \frac{S_y \text{sen}(\theta_y)}{P_u} & g_2 &= -i \frac{P'_u S_x \text{sen}(\theta_x)}{P_P} & g_3 &= -\frac{b_P}{P'_u} g_2 \\ & & h_2 &= -i \frac{P'_u S_y \text{sen}(\theta_y)}{P_P} & h_3 &= -\frac{b_P}{P'_u} h_2 \end{aligned} \quad (5.35)$$

donde las matrices son:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} \frac{b_P}{P_u} & 0 & -i \frac{S_x \text{sen}(\theta_x)}{P_u} \\ 0 & \frac{b_P}{P_u} & -i \frac{S_y \text{sen}(\theta_y)}{P_u} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.36)$$

$$\mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} -\frac{P'_u [1 + (S_x)^2 \text{sen}^2(\theta_x) P_P^{-1}]}{(b_P + a_P)} & -\frac{P'_u S_x S_y \text{sen}(\theta_x) \text{sen}(\theta_y)}{P_P(b_P + a_P)} & 0 \\ -\frac{P'_u S_x S_y \text{sen}(\theta_x) \text{sen}(\theta_y)}{P_P(b_P + a_P)} & -\frac{P'_u [1 + (S_y)^2 \text{sen}^2(\theta_y) P_P^{-1}]}{(b_P + a_P)} & 0 \\ -i \frac{P'_u S_x \text{sen}(\theta_x)}{P_P} & -i \frac{P'_u S_y \text{sen}(\theta_y)}{P_P} & 0 \end{bmatrix} \quad (5.37)$$

$$\mathbf{A}_3 = -\frac{b_P}{P'_u} \mathbf{A}_2 \quad (5.38)$$

Finalmente, la matriz de amplificación para cada paso puede ser escrita en función de las expresiones previamente presentadas. Para el algoritmo PISO, la matriz luego de n_P pasos correctores puede ser computada por la siguiente regla:

$$\begin{bmatrix} \alpha_u \\ \alpha_v \\ \alpha_p \end{bmatrix}^{(n_P+1)*} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} \alpha_u \\ \alpha_v \\ \alpha_p \end{bmatrix}^0 \quad \mathbf{A}(\theta_x, \theta_y) = \left[(\mathbf{A}_2)^{n_P} \mathbf{A}_1 - \frac{b_P}{P'_u} \sum_{m_P=1}^{n_P} (\mathbf{A}_2)^{m_P} \right] \quad (5.39)$$

y el factor de amplificación esta dado por:

$$\beta(\theta_x, \theta_y) = \max_i \{ |\lambda_i(\theta_x, \theta_y)| \} \quad (5.40)$$

donde $\lambda_i(\theta_x, \theta_y)$ son los autovalores de la matriz $\mathbf{A}(\theta_x, \theta_y)$.

Resulta importante notar que los errores de alta frecuencia estan usualmente asociados a los llamados modos “checkerboard” (tablero de ajedrez). Por otro lado, los errores de baja frecuencia pueden considerarse como una medida de la precisión media de la solución [77, 108].

De cualquier modo, para asegurar la convergencia del método, la condición de estabilidad debe verificarse en todo el rango de frecuencias:

$$\max [\beta(\theta_x, \theta_y)] \leq 1, \quad \forall(\theta_x, \theta_y) \quad (5.41)$$

Puede destacarse que, si se cumple con tal condición, menores valores de amplificación β implican una mayor disminución de los errores por paso iterativo, mejorando así la tasa de convergencia del método.

5.2. Estabilidad del esquema PISO en 1D

A continuación, se analizará un caso de flujo unidimensional para determinar la influencia del número de Courant, del número de Reynolds de malla y de la cantidad de correcciones PISO sobre las propiedades de estabilidad y convergencia del algoritmo. Esto provee las bases sobre las que se estudiarán problemas bidimensionales.

Siguiendo los desarrollos planteados para obtener las amplificaciones de los errores para problemas bidimensionales, se obtienen las siguientes matrices de amplificación para problemas unidimensionales:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} a_2 & 0 \\ c_2 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}_3 = -\frac{b_P}{P'_u} \mathbf{A}_2 \quad (5.42)$$

$$a_1 = \frac{b_P}{P_u} \quad a_2 = -\frac{P'_u [1 + S_x P_P^{-1} \text{sen}^2(\theta_x)]}{(b_P + a_P)} \quad (5.43)$$

$$b_1 = -i \frac{S_x \text{sen}(\theta_x)}{P_u} \quad c_2 = -\frac{P'_u i \text{sen}(\theta_x)}{P_P}$$

donde:

$$P'_u = a_E \exp(i\theta) + a_W \exp(-i\theta) \quad P_u = P'_u + a_P \quad P_P = 2S_x [\cos(\theta) - 1] \quad (5.44)$$

El problema de Navier-Stokes discreto puede ser completamente caracterizado por el número de Courant $Co = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$ y el número de Reynolds de malla $Re = u \frac{\Delta x}{\nu}$. Sin embargo, debido a la naturaleza iterativa de los métodos segregados, existe al menos un parámetro

extra que debe considerarse para considerar el nivel de acoplamiento entre ecuaciones de conservación de masa y momento. En el caso del algoritmo PISO, este parámetro es el número de correcciones PISO, n_P .

El siguiente estudio tiene en cuenta el efecto aislado de cada parámetro sobre la estabilidad de una iteración temporal. Al final de esta sección, se presentará una comparación con algoritmos de la familia SIMPLE basada en estimaciones de los costos computacionales involucrados y el amortiguamiento de los errores de cada método.

5.2.1. Influencia del número de correctores PISO

El factor de amplificación para $Re = 1$ y $Co = 1$ para distintos valores de n_P se puede apreciar en la Fig. 5.2. Puede observarse que es necesario más de un paso corrector para asegurar la estabilidad del algoritmo. Esto está en concordancia con lo enunciado por Issa [31], que al menos 2 correctores PISO son necesarios para producir un campo de presiones libre de errores de conservación de masa. Además, puede observarse que más de 2 correcciones no producen una mejora significativa sobre el amortiguamiento de los errores.

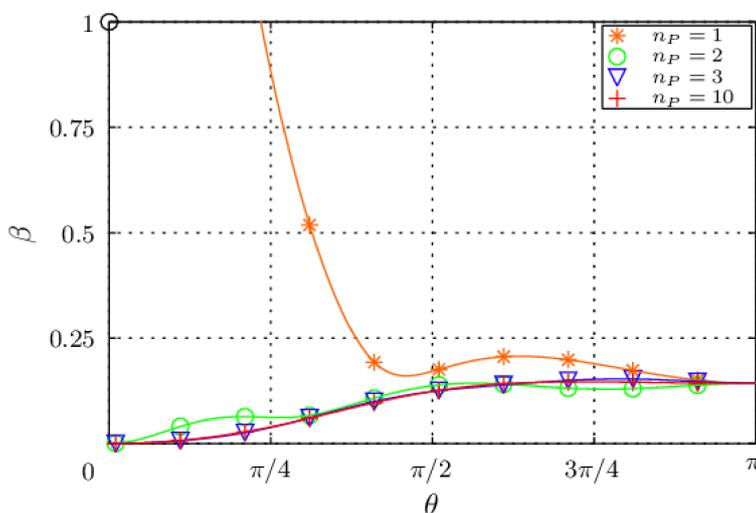


Figura 5.2: Factor de amplificación para $Co = 1$, $Re = 1$ y diferentes valores de n_P

Respecto a la precisión, Issa asegura que cada corrección reduce los errores temporales de cada campo y que no hay una ganancia significativa de emplear más de 2 correcciones PISO, dado que estas son suficientes para igualar el orden de error de la discretización temporal de

la ecuación de momento. De la misma forma, este análisis muestra que el autovalor afectado por los pasos correctores pierde dominancia luego de dos pasos correctores. Sin embargo, estas conclusiones son solo válidas en estas condiciones y no deben ser extendidas directamente a casos mas complejos. Mas adelante, se realizara el mismo análisis para casos mas generales en números de Reynolds de malla bajos y altos y en casos bidimensionales con diferentes refinamientos en cada dirección.

5.2.2. Influencia del número de Courant

La resolución iterativa de las ecuaciones de Navier-Stokes involucra al menos dos tipos de acoplamientos: el acoplamiento dado por el termino inercial no-lineal donde debe acoplarse el campo de velocidades con sí mismo, y el acoplamiento entre el campo de presión y velocidad. El primero puede ser atendido por medio de una linealización del término inercial seguido de iteraciones externas, y el segundo es resuelto mediante iteraciones internas, también llamadas correctores PISO. Para minimizar los errores de linealización del término advectivo (cuyo análisis escapa al presente estudio), deben considerarse valores pequeños a moderados del numero de Courant. Para rangos que excedan estos límites, un estudio de los factores de amplificación ha sido desarrollado por Merkle *et al.* [109], donde se muestra que el comportamiento de estabilidad del método PISO no se ve afectado.

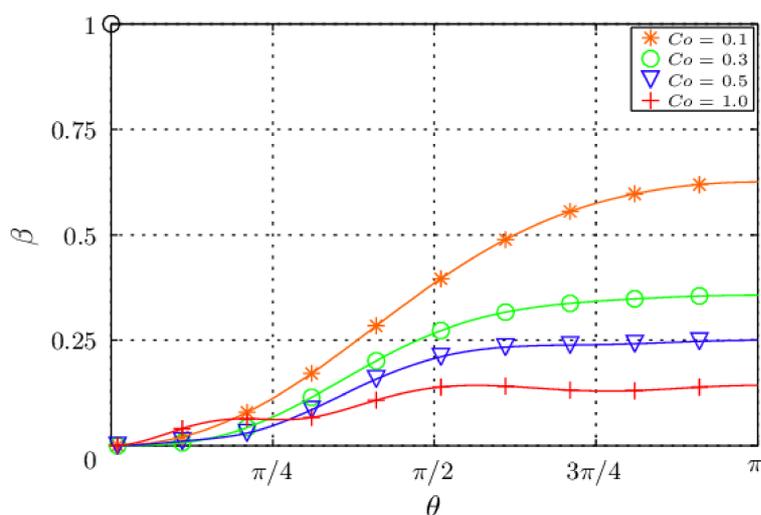


Figura 5.3: Factor de amplificación para $Re = 1$, $n_P = 2$ y diferentes números de Courant

La amplificación para distintos valores del número de Courant se muestra en la Fig. 5.3. Para cada caso, el número de Reynolds de malla se mantiene constante en $Re = 1$ y se adoptan 2 correcciones PISO. Puede observarse que, para un solo paso de tiempo, los números de Courant mayores presentan los factores de amplificación mas bajos. Esto no implica necesariamente una mayor eficiencia, dado que bajos valores del número de Courant requeriría mayores pasos de tiempo (n_T) para el mismo tiempo de simulación total.

También puede notarse que los errores de altas frecuencias se ven afectados por el número de Courant (ver Fig. 5.3) pero no así por el numero de correcciones PISO (ver Fig. 5.2). Esto sugiere que este factor de amplificación no depende del paso corrector. De hecho, reemplazando $\theta = \pi$ en las matrices de amplificación (Ecs. (5.42), (5.43) y (5.44)), la amplificación total resulta:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} P(n_P) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.45)$$

donde $P(n_P)$ es el único elemento no-nulo en $\theta = \pi$:

$$P(n_P) = \left(a_2^{n_P} a_1 - \frac{b_P}{a_P} \sum_{m_P=1}^{n_P} a_2^{m_P} \right) \quad (5.46)$$

Siguiendo el método inductivo, puede probarse que $P(n_P) = a_1$. Primero, usando las Ecs. (5.43) y (5.44), puede observarse que:

$$P(1) = a_2 \left(a_1 - \frac{b_P}{a_P} \right) = a_1 \quad (5.47)$$

también

$$\begin{aligned} P(k+1) &= \left(a_2^{k+1} a_1 - \frac{b_P}{a_P} \sum_{m_P=1}^{k+1} a_2^{m_P} \right) \\ &= a_2 \left(\underbrace{a_2^k a_1 - \frac{b_P}{a_P} \sum_{m_P=1}^k a_2^{m_P}}_{=P(k)} - \frac{b_P}{a_P} \right) = a_2 \left[P(k) - \frac{b_P}{a_P} \right] \end{aligned} \quad (5.48)$$

donde se verifica, siguiendo la Ec. (5.47) y la hipótesis que $P(k) = a_1$, que $P(k + 1) = a_1$.

Entonces, para cualquier número de pasos correctores, el factor de amplificación para $\theta = \pi$ es a_1 . Esto también implica que solo el predictor de momento afecta al error de amplificación a altas frecuencias. De hecho, al usar Upwind y diferencias centradas como esquemas de discretización para el término advectivo y difusivo respectivamente, el factor de amplificación resulta:

$$\beta(\theta = \pi) = a_1 = \frac{1}{1 + 2 Co \left(1 + \frac{2}{Re}\right)} \quad (5.49)$$

donde queda claro que la amplificación aumenta mientras el número de Courant decrece. Esta expresión es equivalente a la obtenida para un problema estandar de convección-difusión, como es esperado de la ecuación de conservación de momento. Para bajas frecuencias, este comportamiento es mas complejo y el autovalor dominante está formado por contribuciones tanto de velocidad como de presión.

5.2.3. Influencia del número de Reynolds de malla

A continuación, se analiza el factor de amplificación para diferentes números de Reynolds de malla para un problema con $Co = 1$ y para $n_P = 2$ y $n_P = 3$. En la Fig. 5.4 puede observarse que para $n_P = 2$ y $Re \ll 1$, los factores de amplificación más grandes son aquellos asociados a los errores de frecuencias bajas, mientras que para $Re \gg 1$, dominan los errores de altas frecuencias.

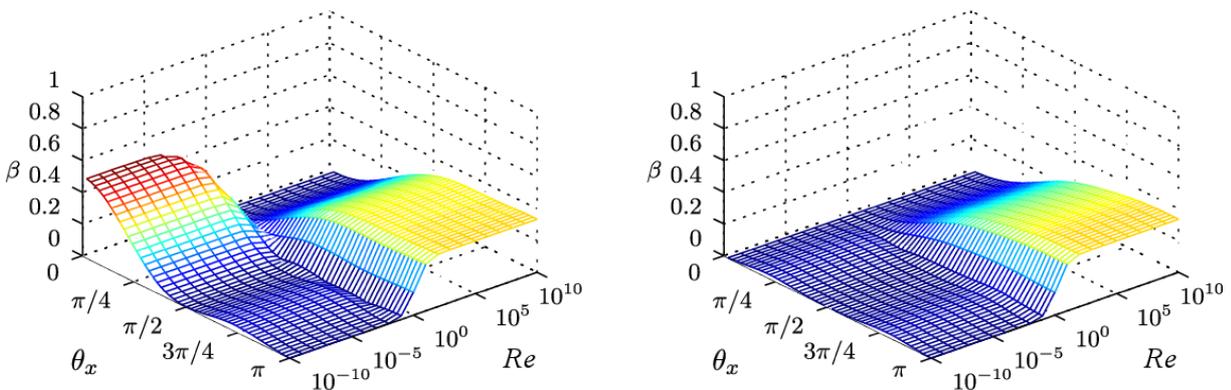


Figura 5.4: Factor de amplificación para diferentes valores de Reynolds de malla para $n_P = 2$ (izquierda) y $n_P = 3$ (derecha)

En problemas con bajo número de Reynolds de malla, las fuerzas inerciales son significativamente menores que las fuerzas viscosas. En estos casos, los campos solución de presión y velocidad se encuentran fuertemente vinculados a la interacción entre las fuerzas de presión y los efectos viscosos. Este vínculo puede reforzarse aumentando el número de pasos correctores. Esto indica que, para ciertas condiciones (*i.e.* bajos números de Reynolds de malla), más de 2 pasos correctores pueden ser necesarios para favorecer la amortiguación de los errores.

Por otro lado, los flujos con altos números de Reynolds de malla son mayormente dominados por los efectos inerciales. De esta forma, el acoplamiento presión-velocidad, como mecanismo de mitigación de los errores, tiene una influencia limitada. Para estas condiciones, el factor de amplificación resultante es determinado por la metodología de acoplamiento y resolución del término advectivo, el cual permanece inalterado ante múltiples pasos correctores.

5.2.4. Estabilidad en un problema estacionario

El algoritmo SIMPLE desarrollado por Patankar y Spalding [73] y sus numerosos derivados [81, 82, 83, 84, 86] son comúnmente utilizados para la resolución de problemas estacionarios. En contraste, el algoritmo PISO [31] fue concebido como un método para acoplamiento en problemas transitorios. Una de sus ventajas es que permite resolver este tipo de problemas con costos computacionales significativamente menores que las versiones transitorias de SIMPLE [32]. El siguiente estudio busca comparar la eficiencia del método PISO con métodos de la familia SIMPLE, para alcanzar una solución estacionaria. El objetivo es establecer las condiciones en las cuales un método puede resultar mas apropiado que otro basado en un análisis de amplificación del error. Para lograr esto, se utilizará la relación entre paso de tiempo y factor de sobre-relajación deducida por Issa *et al.* [32]. Aquí, ω es el factor de sobre-relajación para el paso predictor de momento. De esta forma, se puede expresar un número de Courant análogo para el método SIMPLE:

$$b_P = a_P \frac{1 - \omega}{\omega} \quad \implies \quad Co = \left(\frac{1}{\frac{2}{Re} + 1} \right) \left(\frac{\omega}{1 - \omega} \right) \quad (5.50)$$

donde ha sido adoptado un esquema tipo Upwind para los términos advectivos y diferencias

centradas para los términos difusivos, estableciendo una relación entre los coeficientes a_P y Re . Reemplazando el número de Courant en la definición dada por la Ec. (5.49), el factor de amplificación para altas frecuencias por el métodos de la familia SIMPLE puede expresarse como:

$$\beta(\theta = \pi) = \frac{1}{1 + 2 \left(\frac{\omega}{1 - \omega} \right)} \quad (5.51)$$

lo cual es solo válido si no se aplica sobre-relajación al campo de presiones.

La Fig. 5.5 muestra, para $Co = 1$ y $Re = 1$, una comparación entre la amplificación del método PISO (con 1 y 2 pasos correctores), y dos métodos de la familia SIMPLE: SIMPLEC y SIMPLER (siguiendo el trabajo de Liu *et al.* [93] con ω definido en función del Co y Re de acuerdo a la Ec. (5.50)). En general, el método PISO con 2 correcciones presenta las menores amplificaciones, seguido por el SIMPLER de un desempeño similar y SIMPLEC que presenta mayores factores de amplificación para cada frecuencia.

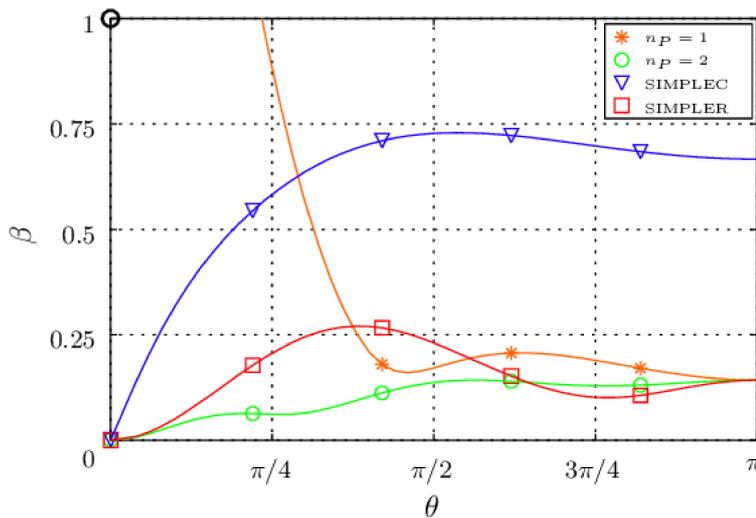


Figura 5.5: Factores de amplificación para PISO, SIMPLER y SIMPLEC

Vale mencionar que los errores en estados transitorios y estacionarios no son equivalentes. Es por ello que, para realizar una comparación adecuada, se debe al menos considerar una estimación de los costos computacionales involucrados. Para hacer esto, debe tenerse en cuenta que el costo total de simulación dependerá del costo de cada iteración y el número de iteraciones necesarias para alcanzar un determinado nivel de error.

Por ejemplo, la evolución del error para un algoritmo de la familia SIMPLE no depende del estado transitorio. Es por ello que el error luego de n_T iteraciones es:

$$\varepsilon_{S,n_T} = \beta_S^{n_T} \varepsilon_0 \quad (5.52)$$

mientras que para el algoritmo PISO, el error en un paso de tiempo estará dado por:

$$\varepsilon_{P,1} = \beta_P(u_1 - u_0) \quad (5.53)$$

donde u_k indica la solución exacta en $t_k = k \Delta t$. Luego, en 2 pasos de tiempo, el error resulta:

$$\varepsilon_{P,2} = \beta_P(u_2 - \hat{u}_1) \quad (5.54)$$

donde \hat{u}_k es la solución numérica en el tiempo t_k , siendo $\hat{u}_k = u_k - \varepsilon_k$. Entonces:

$$\varepsilon_{P,2} = \beta_P(u_2 - \hat{u}_1) = \beta_P(u_2 - u_1 + \varepsilon_1) = \beta_P(u_2 - u_1) + \beta_P^2(u_1 - u_0) \quad (5.55)$$

En general:

$$\varepsilon_{P,n_T} = \beta_P^{n_T}(u_1 - u_0) + \beta_P^{n_T-1}(u_2 - u_1) + \dots + \beta_P(u_{n_T} - u_{n_T-1}) \quad (5.56)$$

Aquí, n_T es usado indistintamente para representar el número de iteraciones (para SIMPLE) y el número de pasos de tiempo (para PISO). De este análisis puede observarse que el costo de una simulación con PISO dependerá de la evolución física desde la condición inicial hasta la solución final.

La Fig. 5.6 ilustra dos problemas físicos distintos: uno donde el estado transitorio es rápido (línea azul de trazo y punto) y uno donde el estado transitorio es lento (línea roja de trazo). La velocidad de la evolución del sistema hacia su estado estacionario puede ser cuantificada de forma relativa a la cantidad de pasos necesarias para alcanzarla: $n_{trans} = T_{trans}/\Delta t$. Por ejemplo, para el estado transitorio rápido, el flujo alcanza un estado estacionario en un solo paso temporal. Para este caso el lado derecho de la Ec. (5.56) se reduce solo a su primer término y el número de iteraciones PISO, requeridas para alcanzar una precisión determinada, puede ser computada de forma similar a SIMPLER con la Ec. (5.52).

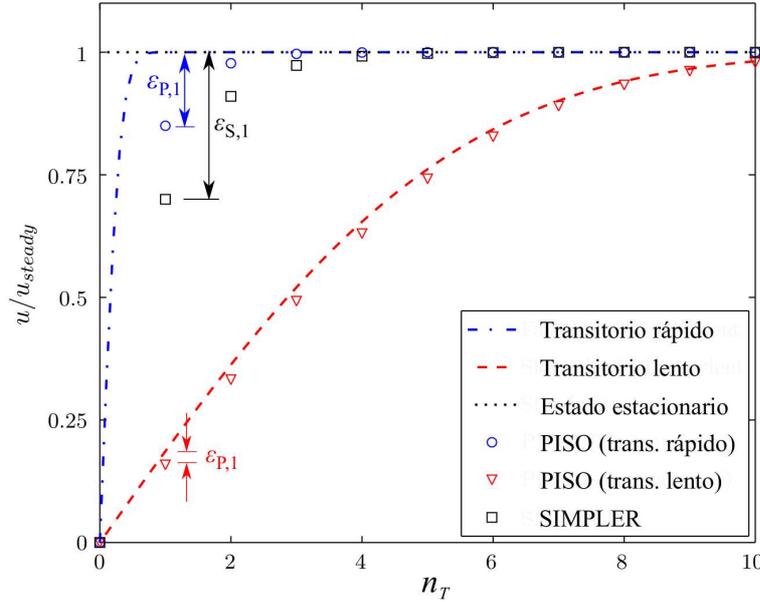


Figura 5.6: Convergencia de los algoritmos PISO y SIMPLE para solución del estado estacionario.

Una estimación del número de iteraciones necesarias para cada algoritmo puede realizarse considerando como tolerancia $\varepsilon_{n_T} = 10^{-3}$ y un factor de amplificación de 0,3 y 0,15 para SIMPLER y PISO respectivamente (de acuerdo a los valores observados en la Fig. 5.5). El número de iteraciones requerida por cada algoritmo es dada por:

$$n_{PISO} = \frac{\log(\varepsilon_n/\varepsilon_0)}{\log(\beta_{PISO})} \approx 4 \quad n_{SIMPLER} = \frac{\log(\varepsilon_n/\varepsilon_0)}{\log(\beta_{SIMPLER})} \approx 6 \quad (5.57)$$

Esto indica que, si la evolución transitoria ocurre en un solo paso temporal, SIMPLER va a necesitar de 1,5 veces la cantidad de iteraciones requeridas por PISO. Esto sugiere que, cuando n_{trans} es lo suficientemente pequeño, el algoritmo PISO puede ser una alternativa adecuada para obtener soluciones estacionarias en comparación con algoritmos de la familia SIMPLE.

Aquí han sido consideradas una serie de hipótesis para simplificar el análisis. Primero, el factor de amplificación por iteración ha sido considerado constante durante toda la simulación. Por otra parte, se supone que la magnitud del error se ve reducida en cada iteración con el mayor factor de amplificación posible dado por la Fig. 5.5. Además, se considera que el costo de resolver una iteración con SIMPLER y un paso de tiempo con PISO (con $n_P = 2$) son similares, dado que el número de condición de la matriz (lo cual es una medida del costo computacional

para resolver un sistema lineal [5]) de un problema de Poisson (ecuación de presión) es varios ordenes de magnitud mayor que el correspondiente a la matriz de momento.

5.3. Estabilidad del esquema PISO en 2D

Para estos problemas, la interacción entre variables se vuelve mas compleja dada la presencia de una componente extra de velocidad a ser acoplada con el campo de presiones. Mediante la introducción de parámetros adicionales (la relación de velocidades y relación de aspecto), se puede estudiar la influencia de la dirección del flujo respecto a la malla así como también el refinamiento relativo direccional sobre la estabilidad general del método.

En esta sección, se extenderá el análisis realizado en problemas unidimensionales a casos bidimensionales. En primer lugar, se estudiara un problema con un flujo orientado a 45 grados con respecto a una malla uniforme bidimensional. Luego, se exploraran dos situaciones particulares: variaciones de orientación de la malla respecto a la dirección del flujo (cuantificada a través de la relación de velocidades VR) y el refinamiento direccional relativo (cuantificado a través de la relación de aspecto AR).

5.3.1. Flujo diagonal en malla uniforme

El factor de amplificación (dado por la Ec. (5.40)) es calculado para un problema con $u = v$. A diferencia del caso unidimensional, aqui se obtienen 3 autovalores de la matriz de amplificación A . La Fig. 5.7 muestra el factor de amplificación para un problema estándar con $Re = 1$, $Co = 1$ y $n_P = 2$.

Puede observarse que, para altas frecuencias, el factor de amplificación es significativamente menor a 1, lo que coincide con el comportamiento observado para un problema unidimensional. Sin embargo, cuando ambas frecuencias tienden a cero, el factor de amplificación crece suavemente hasta 1. Este comportamiento es inherente a problemas bidimensionales. Para poder entenderlo, se comenzará considerando el factor de amplificación para $\theta_y = 0$.

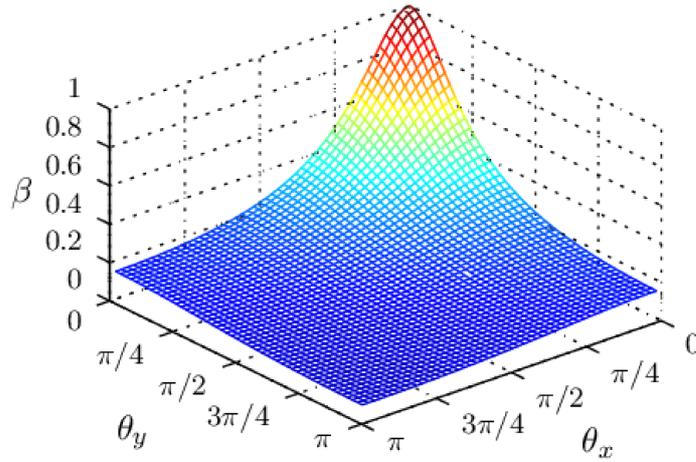


Figura 5.7: Factor de amplificación para un problema bidimensional para $Re = 1$, $Co = 1$ y $n_P = 2$

En este límite, la matriz de amplificación toma la forma:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} (a_2^2 a_1 + a_2 a_3 + a_3) & 0 & (a_2^2 c_1) \\ 0 & (e_2^2 e_1 + e_2 e_3 + e_3) & 0 \\ (g_2 a_2 a_1 + g_2 a_3 + g_3) & 0 & (g_2 a_2 c_1) \end{bmatrix} \quad (5.58)$$

donde uno de los autovalores está dado por:

$$\lambda_1 = |e_2^2 e_1 + e_2 e_3 + e_3| \quad (5.59)$$

y los otros 2 pueden ser obtenidos de la matriz reducida \mathbf{A}^* :

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} (a_2^2 a_1 + a_2 a_3 + a_3) & (a_2^2 c_1) \\ (g_2 a_2 a_1 + g_2 a_3 + g_3) & (g_2 a_2 c_1) \end{bmatrix} \quad (5.60)$$

Esta matriz es igual a la matriz de amplificación general del caso unidimensional y, por ende, sus autovalores serán iguales.

Para las condiciones actuales ($Re = 1$, $Co = 1$ y $n_P = 2$, en $\theta_y = 0$):

$$\lambda_1 > \lambda_{2,3}, \quad \forall \theta_x \quad (5.61)$$

Dos condiciones extremas pueden encontrarse al modificar el número de Reynolds de malla como fue presentado en la Fig. 5.8. Para números de Reynolds de malla altos, la Ec. (5.61) es verificada y los autovalores de \mathbf{A}^* son completamente superados por λ_1 . Por otro lado, para

bajos números de Reynolds de malla, los autovalores dominantes son $\lambda_{2,3}$ para todo el rango de frecuencias.

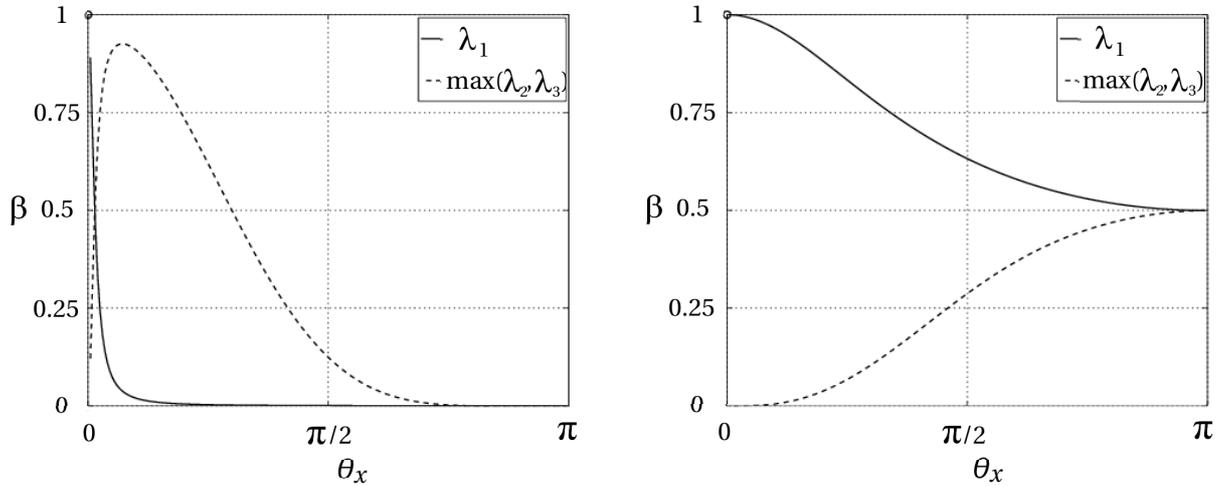


Figura 5.8: Factor de amplificación para números de Reynolds de malla altos y bajos: $Re = 10^{-3}$ (izquierda) y $Re = 10^3$ (derecha)

Este comportamiento diferenciado de la amplificación del error que se da a bajas frecuencias (como puede observarse en la Fig. 5.7) está relacionado a la necesidad de acoplar dos componentes de velocidades con el campo de presiones. Para casos unidimensionales, la presión y el campo de velocidades están vinculados en cada etapa del algoritmo PISO (predictor de momento y paso corrector). En contraste, para casos bidimensionales, el predictor de momento y la corrección explícita de velocidad del paso corrector vinculan a cada componente de velocidad con la presión pero no entre ellas. El único mecanismo del que dispone el algoritmo para acoplar las componentes de velocidad unas con otras es a través de la ecuación de presión. Esto significa que si, por alguna razón, una componente de velocidad se desacopla del campo de presiones, entonces también se desacoplará de la componente restante. Estos casos extremos son ilustrados para $\theta_x = 0$ or $\theta_y = 0$. De la forma de la matriz dada por la Ec. (5.58) se observa que ε_v^{**} no se ve influenciada por ε_u^0 y ε_p^0 y solo depende de ε_v^0 . Este comportamiento representa un desacople completo de esta componente en esas frecuencias particulares. Es por esto que, se espera que el error asociado con dicha componente no pueda ser amortiguado al reforzar el acoplamiento presión-velocidad por medio de aumentar el número de iteraciones PISO. Un comportamiento análogo ocurre para u si uno focaliza el análisis en $\theta_x = 0$. Aunque el análisis para frecuencias no-nulas no es tan directo, puede observarse que para frecuencias bajas en una dada dirección,

se presentan mayores niveles de desacoplamiento para dicha componente de velocidad.

El lector puede notar que, aparte de estas características, el comportamiento general de la amplificación del error bajo distintas condiciones mantienen las mismas propiedades que para problemas unidimensionales. Incluso, aunque el amortiguamiento general del error puede verse afectado, la condición de estabilidad aún se verifica para $n_P \geq 2$. Para ilustrar este hecho, la Fig. 5.9 muestra el comportamiento del factor de amplificación para tres números diferentes de Co y para bajos a altos números de Reynolds de malla Re . Como ha sido probado para casos unidimensionales, la estabilidad en problemas con $Re \gg 1$ esta dada por altas frecuencias que pueden verse reducidas modificando el Co . Por otro lado, bajos valores de Reynolds de malla tienen asociado errores de bajas frecuencias y la estabilidad del algoritmo no mejora al cambiar el paso de tiempo.

La Fig. 5.10 muestra que, para mayores números de correcciones PISO con $Re \ll 1$, el factor de amplificación a bajas frecuencias se ve significativamente reducido. Por otra parte, los autovalores dominantes para problemas de altos números de Reynolds de malla no se ven afectados al incrementar el numero de correcciones PISO.

Finalmente, PISO y SIMPLE son comparados en la Fig. 5.11 para $Re = 1$ y $n_P = 2$. Aquí se utilizan diferentes números de Courant para PISO, mientras que para SIMPLE, se ajusta ω_p para asegurar estabilidad. Además, el factor de sobre-relajación ω para SIMPLE se selecciona acorde a la Ec. (5.50) para cada situación.

5.3.2. Influencia de la orientación de la malla

En los casos bidimensionales presentados anteriormente, se han adoptado mallas con refinamiento uniforme en cada dirección (con $\Delta x = \Delta y$) y con un flujo orientado diagonalmente respecto a la malla ($u = v$). Ahora el análisis sera generalizado tomando en cuenta la orientación de malla y su efecto sobre la amplificación del error del algoritmo. Para ello, se consideraran dos casos extremos: uno donde la malla se encuentra diagonal al flujo (caso estudiado previamente) y otro donde la malla se encuentra alineada al flujo (ver Fig. 5.12). Para ambos casos, se considera una malla de refinamiento uniforme ($\Delta x = \Delta y$).

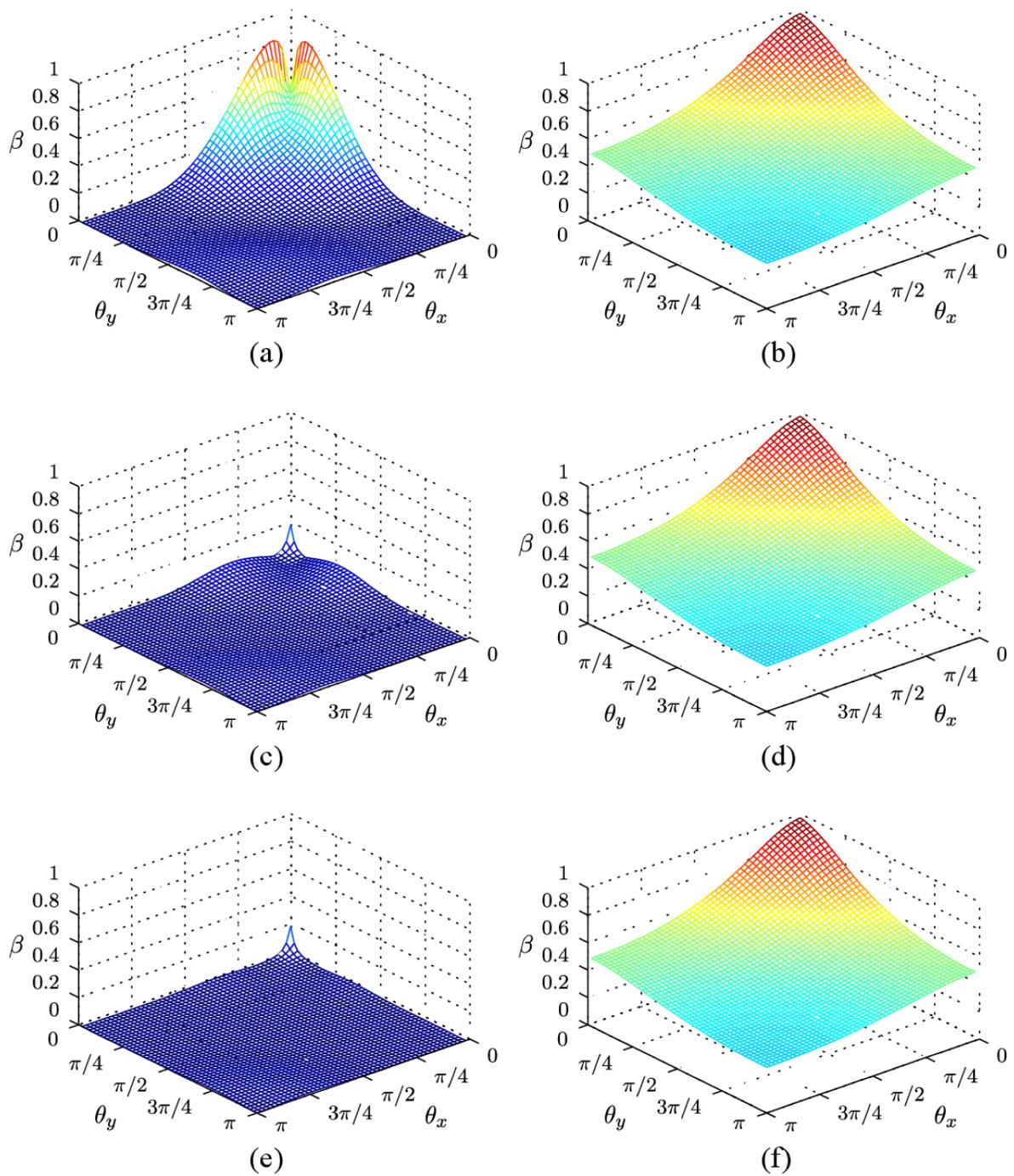


Figura 5.9: Factor de amplificación para $n_P = 2$: (a) $Re = 10^{-3}$ y $Co = 0,1$, (b) $Re = 10^3$ y $Co = 0,1$, (c) $Re = 10^{-3}$ y $Co = 0,5$, (d) $Re = 10^3$ y $Co = 0,5$, (e) $Re = 10^{-3}$ y $Co = 1$ y (f) $Re = 10^3$ y $Co = 1$

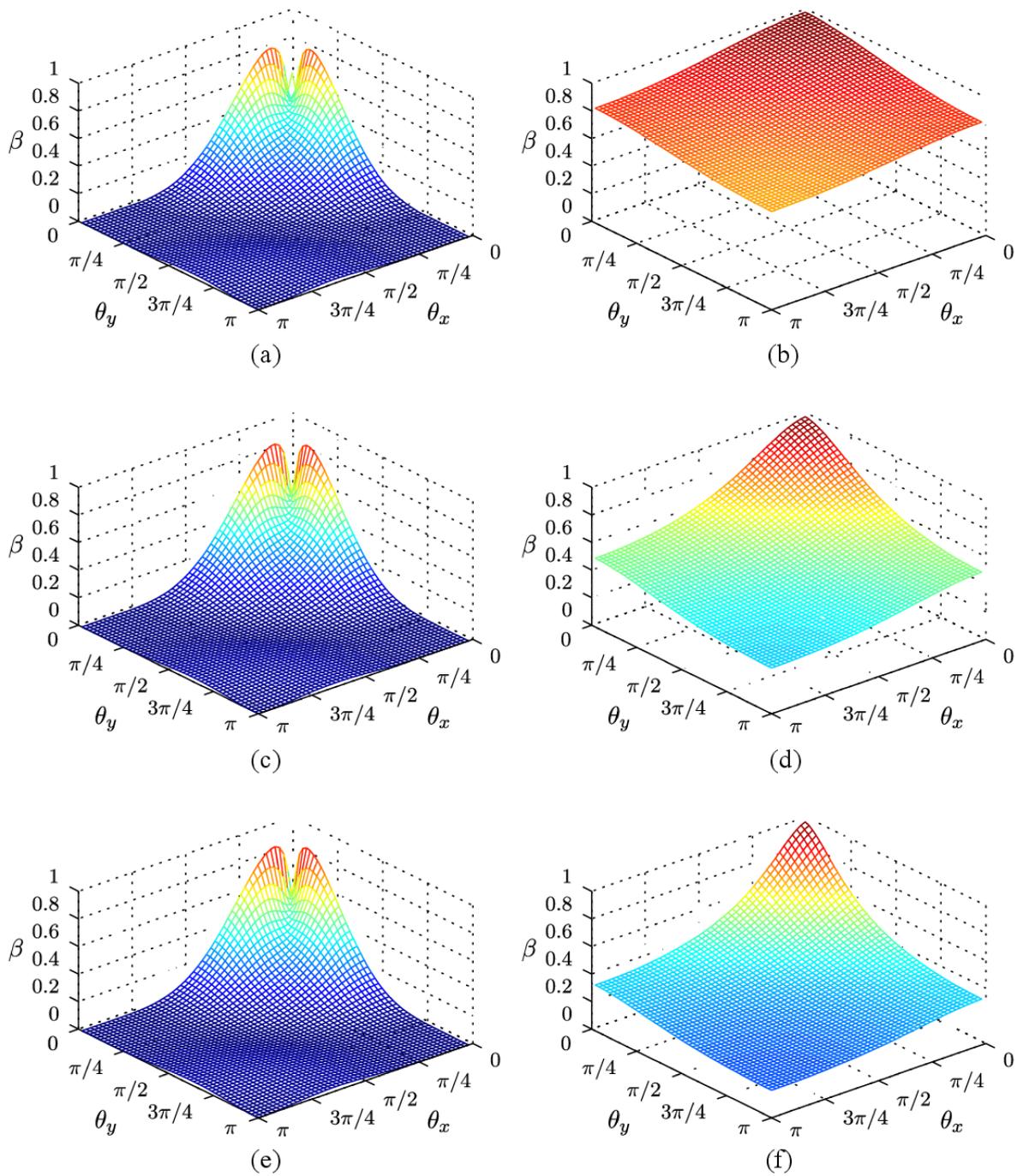


Figura 5.10: Factor de amplificación para $Co = 0,5$: (a) $Re = 10^{-3}$ y $n_P = 2$, (b) $Re = 10^3$ y $n_P = 2$, (c) $Re = 10^{-3}$ y $n_P = 3$, (d) $Re = 10^3$ y $n_P = 3$, (e) $Re = 10^{-3}$ y $n_P = 4$ y (f) $Re = 10^3$ y $n_P = 4$

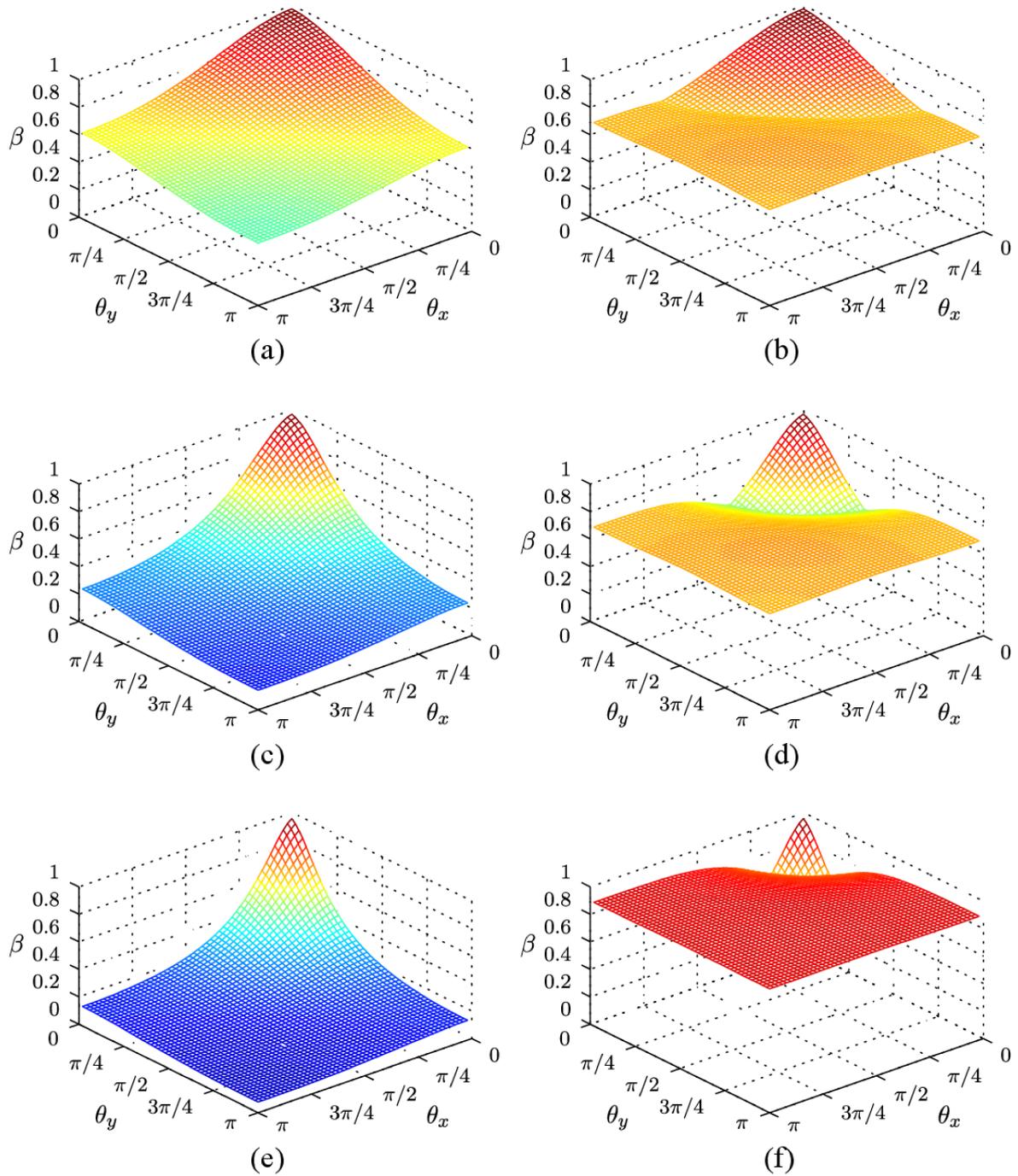


Figura 5.11: Factor de amplificación para $Re = 1$, $n_p = 2$ y: (a) PISO with $Co = 0,5$, (b) SIMPLE with $\omega = 0,33$, (c) PISO with $Co = 1$, (d) SIMPLE with $\omega = 0,75$, (e) PISO with $Co = 2$ y (f) SIMPLE with $\omega = 0,86$

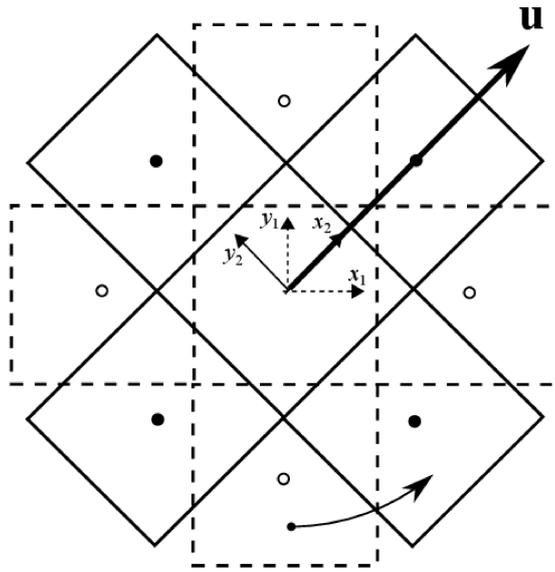


Figura 5.12: Diferentes orientaciones de malla con respecto al flujo: Un flujo diagonal a la malla (línea de trazo) y un flujo alineado con la malla (línea continua).

En problemas unidimensionales, la solución numérica está completamente definida por el número de Courant, el número de Reynolds de malla y el número de correcciones PISO. Pero, para problemas bidimensionales, estos parámetros pueden no ser suficientes. Por ejemplo, para tener en cuenta el efecto de tener diferentes componentes de velocidad en cada dirección Cartesiana, se introduce la relación de velocidades (VR):

$$\text{VR} = \frac{v}{u} \quad (5.62)$$

$$Co_y = v \frac{\Delta t}{\Delta y} = \underbrace{\frac{v}{u}}_{=\text{VR}} \underbrace{u \frac{\Delta t}{\Delta x}}_{=Co_x} \underbrace{\frac{\Delta x}{\Delta y}}_{=1} = \text{VR} Co_x \quad (5.63)$$

$$Re_y = v \frac{\Delta y}{\nu} = \underbrace{\frac{v}{u}}_{=\text{VR}} \underbrace{u \frac{\Delta x}{\nu}}_{=Re_x} \underbrace{\frac{\Delta y}{\Delta x}}_{=1} = \text{VR} Re_x \quad (5.64)$$

Vale la pena mencionar que, para el presente estudio, el sistema de referencia Cartesiano siempre se considera alineado con la malla (como se muestra en la Fig. 5.12).

El efecto de la orientación de malla (con respecto al flujo) sobre el factor de amplificación se explora considerando que $Co_x = 0,5$ y $n_P = 2$. En las secciones previas, se ha observado

un comportamiento estable para $VR = 1$. La Fig. 5.13 muestra el factor de amplificación para diferentes números de Reynolds de malla y para una malla en posición diagonal ($VR = 1$) y completamente alineada ($VR = 0$) al flujo. Puede observarse que el factor de amplificación para bajos números de Reynolds de malla no es afectado por la orientación de malla. Para altos números de Reynolds de malla, aunque la estabilidad no está comprometida, se observa que para $VR = 0$, no hay variaciones con respecto a θ_y (ver Fig. 5.13 (d)). Esto es esperado dado que $v = 0$ y los efectos viscosos son pequeños. Dicho esto, no se observan diferencias significantes en términos de la estabilidad general del algoritmo para ambas orientaciones de malla.

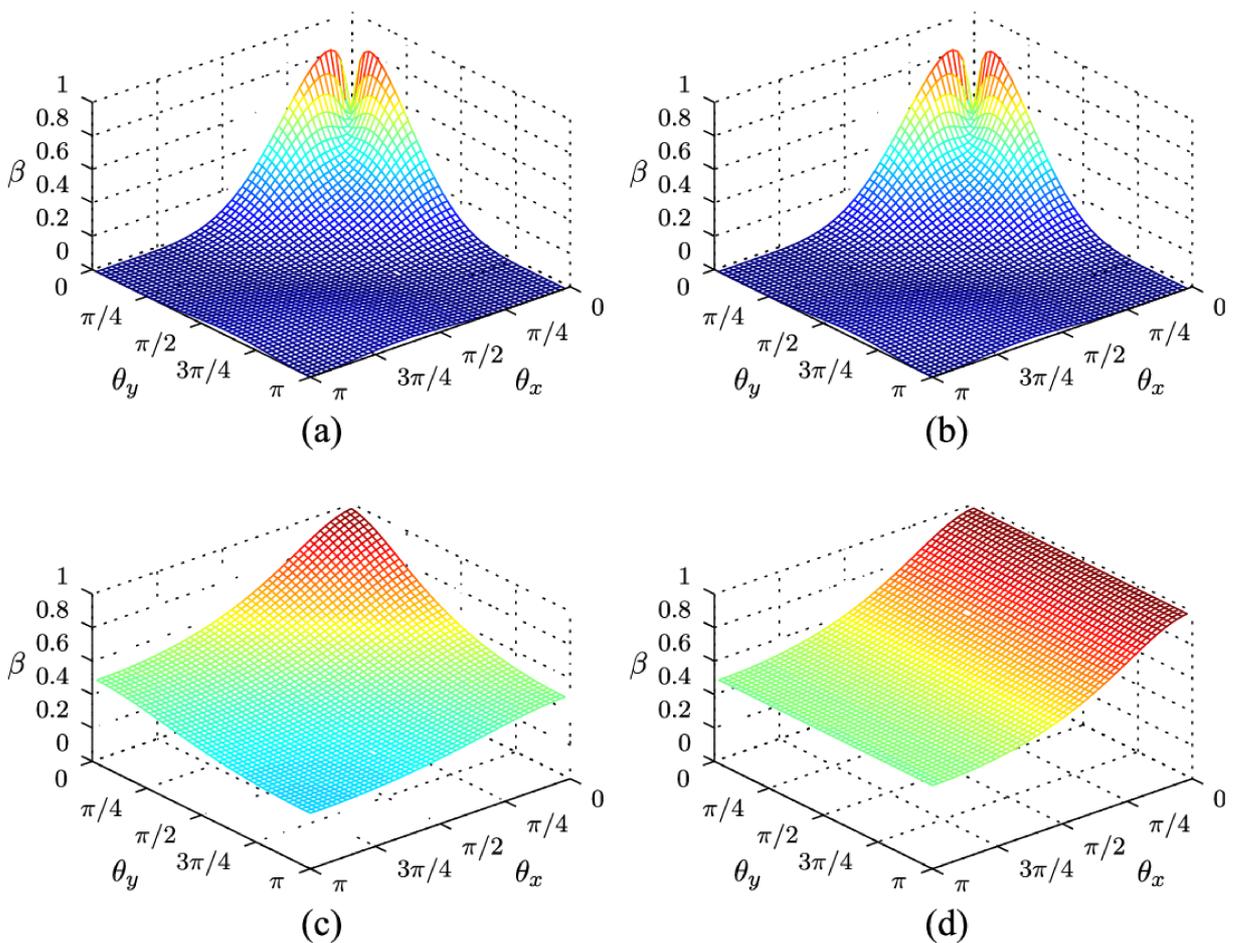


Figura 5.13: Factor de amplificación para $Co_x = 0,5$ y $n_P = 2$ con a) $Re_x = 10^{-3}$ y $VR = 1$, b) $Re_x = 10^{-3}$ y $VR = 0$, c) $Re_x = 10^3$ y $VR = 1$ y d) $Re_x = 10^3$ y $VR = 0$

5.3.3. Influencia de la relación de aspecto de la malla

El otro aspecto a ser considerado es el efecto de tener una malla con distintos refinamientos en cada dirección Cartesiana (ver Fig. 5.14). Esto es tenido en cuenta al introducir el coeficiente relación de aspecto (AR):

$$AR = \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad (5.65)$$

$$Co_y = v \frac{\Delta t}{\Delta y} = \underbrace{\frac{v}{u}}_{=VR} \underbrace{u \frac{\Delta t}{\Delta x}}_{=Co_x} \underbrace{\frac{\Delta x}{\Delta y}}_{=1/AR} = \frac{VR}{AR} Co_x \quad (5.66)$$

$$Re_y = v \frac{\Delta y}{\nu} = \underbrace{\frac{v}{u}}_{=VR} \underbrace{u \frac{\Delta x}{\nu}}_{=Re_x} \underbrace{\frac{\Delta y}{\Delta x}}_{=AR} = VR AR Re_x \quad (5.67)$$

El comportamiento de estabilidad del algoritmo será explorado considerando dos situaciones: una donde $\Delta x > \Delta y$ ($AR < 1$) y otro donde $\Delta y > \Delta x$ ($AR > 1$). Por simplicidad, se considerara un flujo alineado con la malla ($VR = 0$).

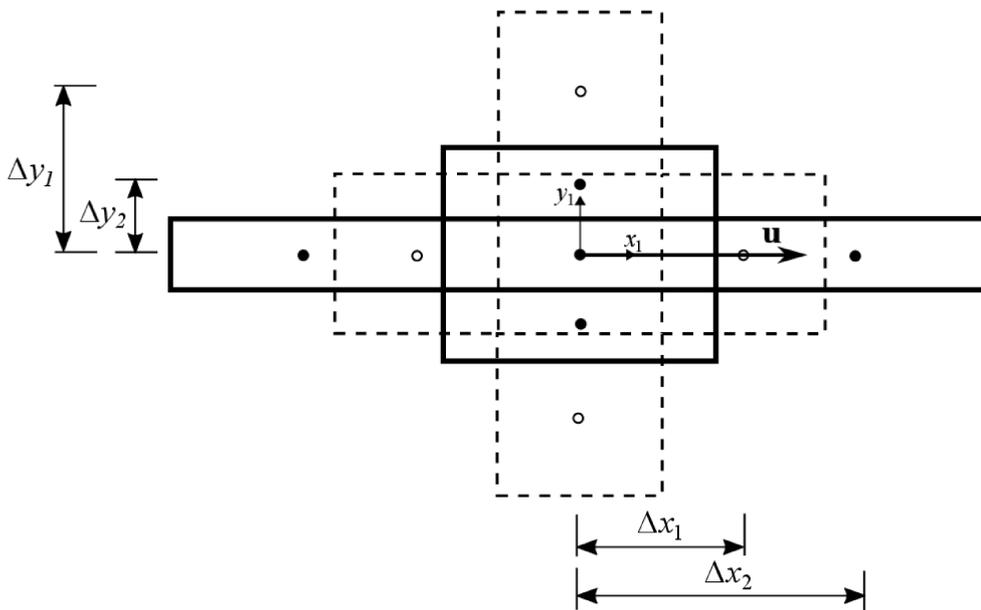


Figura 5.14: Diferentes relaciones de aspecto de malla: Una malla con refinamiento uniforme en cada dirección (línea de trazo) y una malla con diferente refinamiento en cada dirección (línea continua).

La Fig. 5.15 muestra que el factor de amplificación para $Co_x = 0,5$, $n_P = 2$, para altos y bajos números de Reynolds de malla y para $AR = 0,1$ y $AR = 10$. Se observa que, cuando el flujo es dominado por efectos inerciales (Fig. 5.15 (c) y (d)), no hay una influencia significativa de la dirección de refinamiento sobre el factor de amplificación. Por otro lado, cuando el flujo es dominado por efectos viscosos (Fig. 5.15 (a) y (b)), la estabilidad puede verse comprometida. Esto se observa para bajas frecuencias en la dirección de mayor refinamiento.

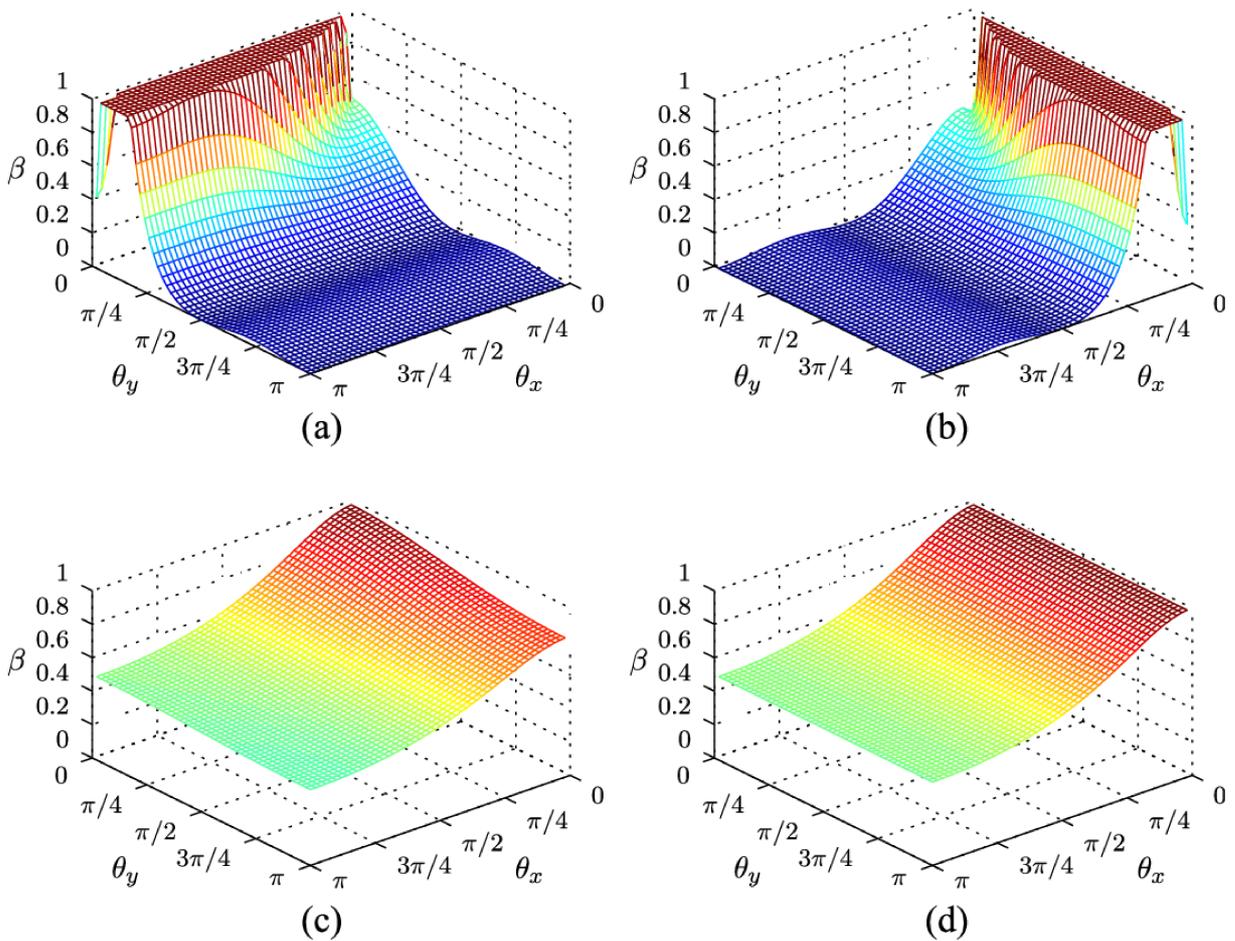


Figura 5.15: Factor de amplificación para $Co_x = 0,5$ y $n_P = 2$ con a) $Re_x = 10^{-3}$ y $AR = 0,1$, b) $Re_x = 10^{-3}$ y $AR = 10$, c) $Re_x = 10^3$ y $AR = 0,1$, y d) $Re_x = 10^3$ y $AR = 10$

Como es esperado del análisis previo, la estabilidad de flujos dominados por efectos viscosos puede ser mejorada incrementando el acople presión-velocidad a través de mas correctores (ver Fig. 5.16).

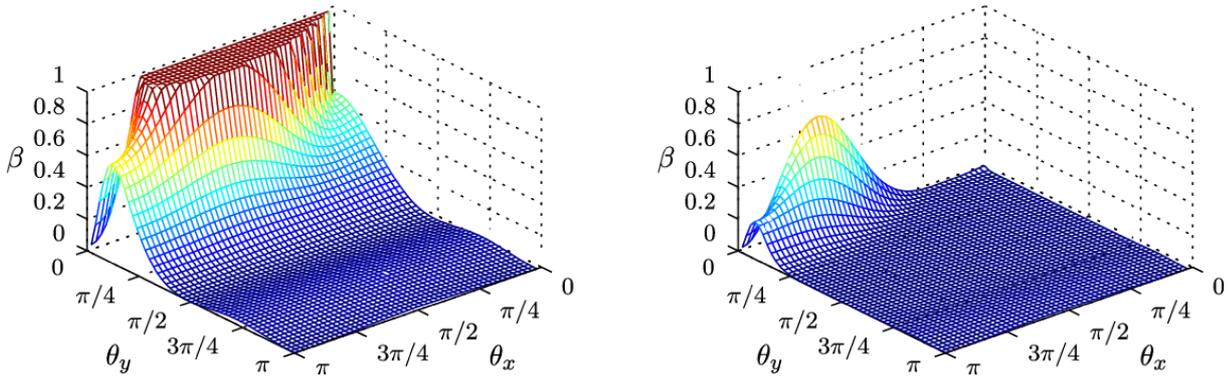


Figura 5.16: Factor de amplificación para $Co_x = 0,5$, $Re_x = 10^{-3}$ y $AR = 0,2$ con $n_P = 2$ (izquierda) y $n_P = 6$ (derecha)

Basado en los problemas de estabilidad detectados para refinamientos relativos a bajos números de Reynolds de malla, se estudiara detalladamente diferentes valores de AR (desde valores de malla uniforme con $AR = 1$ a mallas de alto nivel de estiramiento con $AR = 0,01$). La Fig. 5.17 muestra el factor de amplificación para $\theta_y = 0$ y valores moderados de Reynolds de malla en la dirección x ($Re_x = 1$). Puede observarse que una variación pequeña en AR , incluso para valores moderados de Re_x , pueden producir soluciones inestables. Sin embargo, un incremento en el numero de correctores PISO puede expandir el límite de estabilidad.

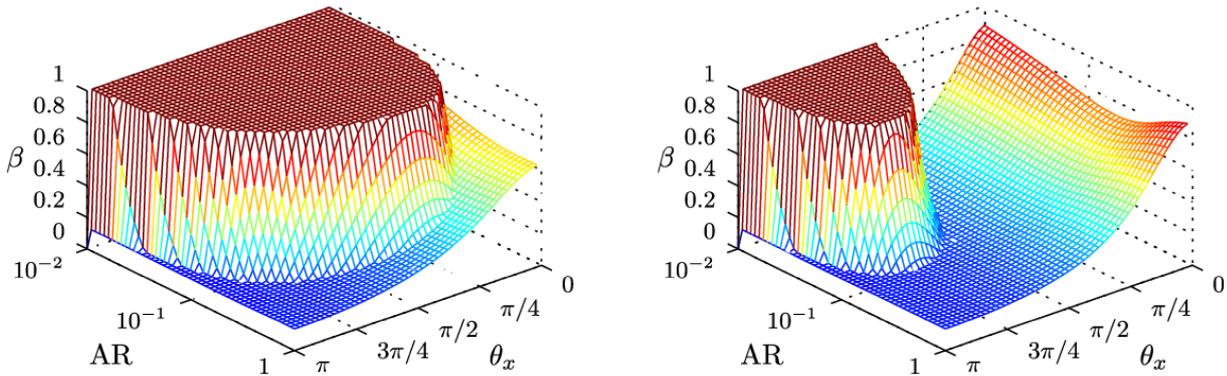


Figura 5.17: Amplification factors for $Re_x = 1$, $\theta_y = 0$ and for different values of AR and θ_x with $n_P = 2$ (left) and $n_P = 10$ (right)

La Fig. 5.18 muestra que el factor de amplificación para algunas frecuencias particulares ($\theta_x = \frac{\pi}{2}$ y $\theta_y = 0$) como función de AR y del numero de Reynolds de malla para una creciente cantidad de correctores PISO. Esto pone en evidencia el hecho que las inestabilidades debidas a valores de AR alejados de 1, están relacionadas a bajos valores de Re_x .

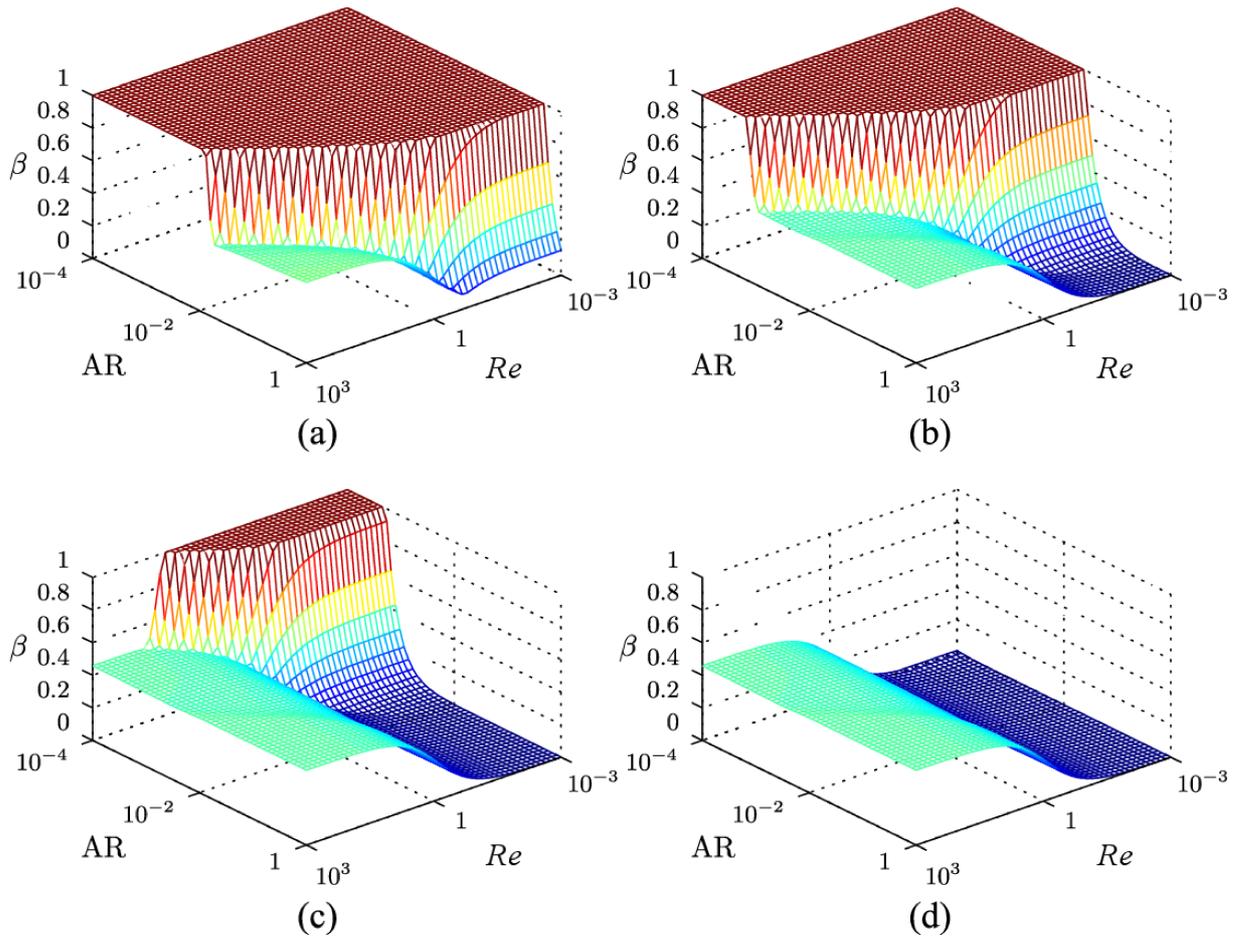


Figura 5.18: Factores de amplificación para $\theta_x = \pi/2$, $\theta_y = 0$ y para: (a) $n_P = 2$, (b) $n_P = 10$, (c) $n_P = 20$ y (d) $n_P = 30$

Estos resultados indican que, para mallas con una relación de aspecto alta y flujos dominados por efectos viscosos, el algoritmo puede entregar soluciones inestables. Un mecanismo para remediar este problema es incrementar el número de correctores PISO en concordancia con la variación de AR.

En el Apéndice C, se realiza un estudio comparativo de estabilidad con condiciones de borde tipo pared para un Flujo Couette. Si bien, este tipo de problemas no cumplen con las hipótesis del método (*i.e.* condiciones de borde periódicas), el objetivo de este análisis es justamente determinar la influencia de las condiciones de pared a la predicción de factores de amplificación del error en un problema de fluidos estándar, comparando con los resultados propios predichos mediante la descomposición de Fourier.

5.4. Análisis de los resultados

Se ha desarrollado una secuencia de amplificación del error para el algoritmo PISO por medio de técnicas de descomposición de Fourier. Luego de una detallada descripción de la metodología, se han estudiado diferentes condiciones numéricas para poder determinar cuales son los parámetros que pueden comprometer la estabilidad del algoritmo. En este sentido, se encontró que:

- Para altos números de Reynolds de malla, el algoritmo PISO no tiene mecanismo para amortiguar los errores de altas frecuencias, dado que estos están mayormente relacionados a los efectos inerciales del termino convectivo. Estos errores solo pueden mitigarse modificando el numero de Courant.
- Para bajos números de Reynolds de malla, los mayores factores de amplificación se dan a bajas frecuencias. Estos errores pueden disminuirse por medio del aumento de correctores PISO para reforzar el acoplamiento presión-velocidad
- Por medio de una estimación de los costos computacionales de PISO y SIMPLER basada en factores de amplificación de Fourier, se detecto que, cuando el estado transitorio del problema esta contenido en tan solo unos pocos pasos de tiempo, el algoritmo PISO puede competir contra otros algoritmos de la familia SIMPLE, originalmente concebidos para obtener soluciones estacionarias.
- Aún cuando la estabilidad no depende del alineamiento entre la malla y el flujo, valores altos (o bajos) de la relación de aspecto de la malla puede inducir comportamientos inestables. Esto se observa principalmente en flujos dominados por efectos viscosos, donde un aumento en los correctores PISO resulta ser un método efectivo para disminuir tales inestabilidades.

*“One never notices what has been done;
one can only see what remains to be
done.”*

– Marie Skłodowska Curie (1867-1934)

Capítulo 6

Estabilidad de algoritmos segregados a dos fases

La eficiencia de las técnicas de acoplamiento por arrastre presentadas en el Capítulo 3, han sido estudiadas mediante abordajes prácticos en la literatura [35, 94, 92]. En particular, Oliveira *et al.* [35] ha mostrado que para un problema de fluidización unidimensional de aire y agua, los residuos de la ecuación de momento con ambas técnicas de acoplamiento requieren el mismo número de iteraciones para converger a una tolerancia prescrita para condiciones de bajo acoplamiento entre fases (*i.e.* bajo coeficiente de arrastre). Sin embargo, para altos coeficientes de arrastre, el método PIM no logra convergencia para una dada tolerancia de residuos máximos. Karema *et al.* [92] han extendido este análisis a problemas de fluidización bidimensionales y proponen una estimación de la escala de tiempo característica de acoplamiento interfacial, por debajo de la cual los métodos de acoplamiento responden de forma similar. Ambos estudios han sido realizados bajo condiciones particulares de flujo, sacrificando la generalidad del análisis. En contraste, Miller *et al.* [94] han propuesto un estudio basado en técnicas de descomposición de Fourier, en el cual los resultados pueden expresarse en función de los parámetros físicos y numéricos para condiciones generales de flujo a dos fases. En particular, ellos han estudiado las tasas de convergencia del método IPSA [34], el cual resulta análogo al método SIMPLE para varias fases. Sin embargo, en la actualidad, muchos de los códigos computacionales para la resolución de flujos a dos fases hacen uso de varios pasos correctores

para asegurar una apropiada resolución de la conservación de la masa por cada iteración externa (e.g. OpenFOAM®). Esta es la esencia de los métodos PISO y PIMPLE. Este último es el algoritmo adoptado en el presente trabajo y la estabilidad del mismo será motivo de estudio de este capítulo.

En el Capítulo 5, se ha realizado un estudio extenso de la estabilidad del método PISO para el acoplamiento presión-velocidad a una fase ante diversas condiciones físicas y numéricas, sentando las bases del análisis mediante el método de Fourier. En el presente capítulo, se propone extender la metodología general de análisis de estabilidad por descomposición de Fourier a problemas unidimensionales a dos fases con el fin de comparar los factores de amplificación de los métodos acoplamiento por arrastre en el marco del algoritmo PIMPLE. En este contexto, se buscará determinar los parámetros físicos y numéricos que influyen en los rangos de estabilidad de los métodos de acoplamiento entre la presión y las velocidades de cada fase.

6.1. Motivación del problema

El problema de fluidización de la Sección 4.4.4 ha sido simulado con los métodos de acoplamiento PIM y PEA presentados en el Capítulo 3.

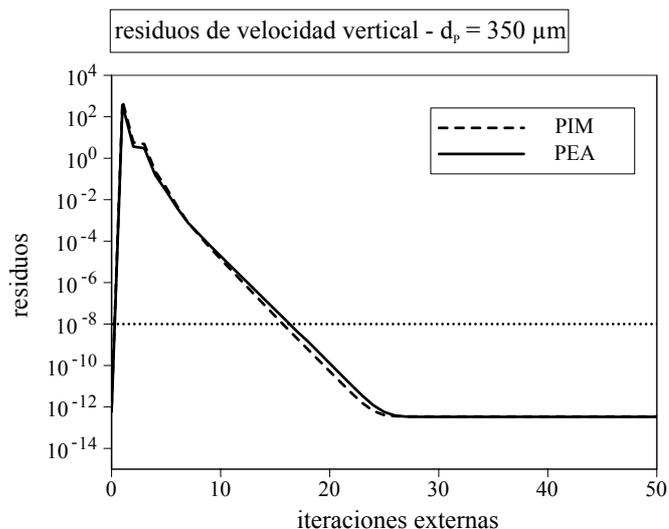


Figura 6.1: Tasa de convergencia del campo de velocidades de la fase gas para los métodos PIM y PEA y $d_p = 350 \mu\text{m}$

Para este problema, se ha considerado un valor de 10^{-8} como criterio de tolerancia para los residuos de la ecuación de momento para la fase de gas. Este valor es alcanzado en 20 iteraciones externas y su medición se realizó a 0,01s del comienzo de la fluidización. La evolución de los residuos se detallan en la Fig. 6.1, donde se puede observar que ambos métodos se comportan de manera similar.

En el caso en que se adopten partículas de menor tamaño, aun en el rango de las aplicaciones prácticas, el grado de acoplamiento entre fases se puede ver afectado. Esto se debe a que se ve modificado el coeficiente de arrastre K_{sg} . Karema *et al.* [92] han propuesto una medida del acoplamiento entre fases por medio de una escala de tiempo característica de las interacciones interfaciales. Por ejemplo, para el problema en cuestión, donde se ha adoptado el modelo de arrastre de Gidaspow, el tiempo característico (t_{sc}) se calcula como:

$$t_{sc} = \left[150 \frac{\mu_g}{\alpha_{mf} \rho_s d_p^2} + 1,75 \frac{\rho_g u_{mf}}{\rho_s d_p \alpha_{mf}} \right]^{-1} \quad (6.1)$$

el cual permite calcular un coeficiente adimensional de arrastre dado por:

$$\bar{C}_d = \frac{\rho_s u_{mf}}{t_{sc} g (\rho_s - \rho_g)} \quad (6.2)$$

siendo α_{mf} y u_{mf} la fracción de sólido y velocidad de gas en condiciones de mínima fluidización.

Para las condiciones del problema, estos valores resultan en:

$$t_{sc} = 0,041 \text{ s}, \quad \bar{C}_d = 1,66 \quad (6.3)$$

Aquí, el paso de tiempo utilizado para la simulación es menor al tiempo característico y el coeficiente de arrastre \bar{C}_d se encuentra por debajo de los valores para los cuales Oliveira *et al.* [35] predicen un decrecimiento de la convergencia del método PIM. En el caso de utilizar partículas de menor tamaño, la fuerza de arrastre toma valores más altos y la convergencia del PIM comienza a verse comprometida, como puede apreciarse en las Figs. 6.2 y 6.3.

Para estas condiciones, el tiempo característico y el coeficiente de arrastre resultan:

$$d_p = 35 \mu\text{m} \rightarrow t_{sc} = 4,4 \times 10^{-4} \text{ s}, \quad \bar{C}_d = 154,48 \quad (6.4)$$

$$d_p = 3,5 \mu\text{m} \rightarrow t_{sc} = 4,4 \times 10^{-6} \text{ s}, \quad \bar{C}_d = 15333,5 \quad (6.5)$$

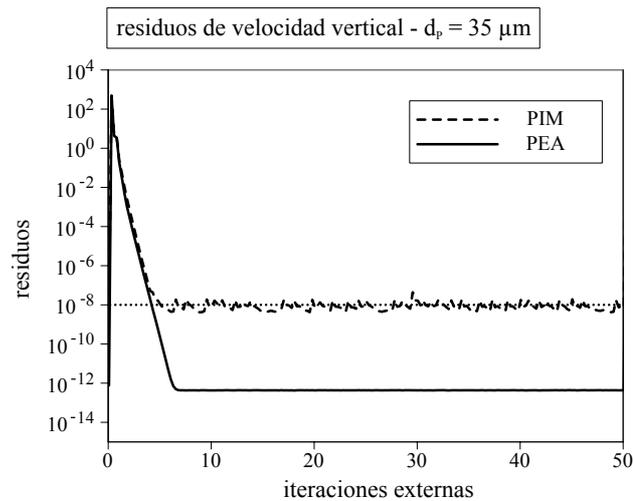


Figura 6.2: Tasa de convergencia del campo de velocidades de la fase gas para los métodos PIM y PEA y $d_p = 35 \mu\text{m}$

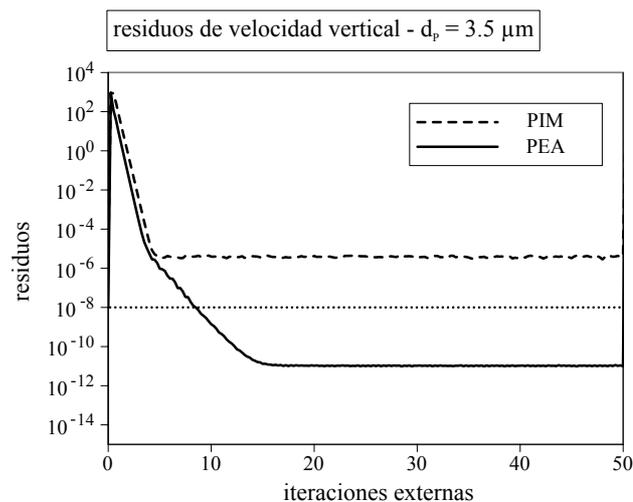


Figura 6.3: Tasa de convergencia del campo de velocidades de la fase gas para los métodos PIM y PEA y $d_p = 3,5 \mu\text{m}$

La primer alternativa corresponde a partículas del tipo Geldart A ($d_p = 35 \mu\text{m}$ y $\rho_s = 2500 \text{ kg/m}^3$), para las cuales el tiempo característico es apenas mayor al paso de tiempo adoptado en la simulación, pero el coeficiente de arrastre supera el valor límite de 10 [35], lo que explica los problemas de convergencia de la velocidad mediante PIM. Este comportamiento se ve enfatizado con el uso de polvos extremadamente finos ($d_p = 3,5 \mu\text{m}$), donde ambos parámetros (t_{sc} y \bar{C}_d) superan los límites teóricos. En estas condiciones, el método PEA requiere

más de 50 iteraciones externas para converger a precisión de máquina, mientras que PIM no converge a la tolerancia prescrita. Para lograr convergencia con estos tamaños de partículas, el uso de PIM requeriría el uso de pasos de tiempos sensiblemente menores. Esto representa un problema importante dado que, al utilizar mallas con cantidad de celdas del orden de $\sim 10^3-10^4$, el problema tiene una muy baja escalabilidad para el cómputo en paralelo. En este contexto, una reducción del paso de tiempo puede ser inviable.

En base a estas problemáticas, en este capítulo se propone estudiar los comportamientos de estabilidad y convergencia valiéndose de las herramientas provistas por el método de descomposición de Fourier vistos en el capítulo anterior.

6.2. Métodos de acoplamiento de velocidad entre fases por arrastre

Para el análisis de un problema a dos fases, se comenzará estudiando un modelo unidimensional simplificado en donde se pueda visualizar fácilmente los distintos grados de implícitud de las metodologías de acople entre fases por arrastre comúnmente adoptadas en la literatura. Se propone el siguiente modelo unidimensional discreto:

$$a_{1,P}u_{1,P} + \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB} = K_1(u_{2,P} - u_{1,P}) \quad (6.6)$$

$$a_{2,P}u_{2,P} + \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB} = K_2(u_{1,P} - u_{2,P}) \quad (6.7)$$

donde los subíndices 1 y 2 indican la fase en cuestión y K_i es el coeficiente de arrastre. A los fines del presente análisis, los coeficientes a_i y K_i se mantienen constante en cada iteración.

Estas ecuaciones de transporte se encuentran vinculadas a través del termino de arrastre. A diferencia del Modelo de Dos Fluidos, aquí, en principio, no se considerara el efecto de la presión ni de términos fuente y la fracción α_i se considera inmersa en los coeficientes a_i , los cuales se mantienen constantes.

Existen varias alternativas para arribar a una solución de este problema. Por un lado se pueden calcular los campos solución u_1 y u_2 de las Ecs. (6.6) y (6.7) de forma simultánea sin ningún proceso iterativo y, por ende, sin ningún grado de explícitud. Este tipo de metodologías cuentan con una elevada precisión pero su resolución puede resultar excesivamente costosa en

tiempos de cómputo. Otras alternativas consisten en plantear métodos segregados y resolver los sistemas matriciales de forma iterativa. Entre ellos, se estudiarán los siguientes:

1. Tratamiento Totalmente Explícito (FET)

$$a_{1,P}u_{1,P}^{**} + \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* = K_1(u_{2,P}^* - u_{1,P}^*) \quad (6.8)$$

$$a_{2,P}u_{2,P}^{**} + \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* = K_2(u_{1,P}^* - u_{2,P}^*) \quad (6.9)$$

2. Método Parcialmente Implícito (PIM)

$$a_{1,P}u_{1,P}^{**} + \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* = K_1(u_{2,P}^* - u_{1,P}^{**}) \quad (6.10)$$

$$a_{2,P}u_{2,P}^{**} + \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* = K_2(u_{1,P}^* - u_{2,P}^{**}) \quad (6.11)$$

3. Algoritmo de Eliminación Parcial (PEA)

$$a_{1,P}u_{1,P}^{**} + \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* = K_1(u_{2,P}^{**} - u_{1,P}^{**}) \quad (6.12)$$

$$a_{2,P}u_{2,P}^{**} + \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* = K_2(u_{1,P}^{**} - u_{2,P}^{**}) \quad (6.13)$$

Un método totalmente implícito involucra resolver un sistema para los campos finales u_1^{**} y u_2^{**} en cada uno de los términos de las Ecs. (6.6) y (6.7). Las Ecs. (6.8) y (6.9) pueden verse como la forma de resolución con mayor grado de explicitud de las presentadas. Por otro lado, utilizar velocidades de la fase i de forma implícita en el termino de arrastre de la ecuación de momento de la fase i , como se realiza en la Ecs. (6.10) y (6.11), es conocido como *Método Parcialmente Implícito* (PIM). Pocos años después del desarrollo del método SIMPLE para flujos a una fase de Patankar y Spalding [73], Spalding [34] propuso un método de acoplamiento con elevado grado de implicitud (y consecuente de mayor estabilidad) para su utilización en un método segregado análogo al SIMPLE: IPSA-PEA. En el marco del modelo simplificado propuesto, el *Algoritmo de Eliminación Parcial* (PEA) puede expresarse tal como se plantea en las Ecs. (6.12) y (6.13). Este método ha sido aplicado y estudiado por diversos autores a lo largo de los años [35, 92, 94, 102].

La analogía con las expresiones obtenidas en el Capítulo 3 para el modelo de gas y partículas puede verse más claramente desarrollando, en primer lugar para PIM, las Ecs. (6.10) y (6.11)

de manera que:

$$(a_{1,P} + K_1)u_{1,P}^{**} = - \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* + K_1u_{2,P}^* \quad (6.14)$$

$$(a_{2,P} + K_2)u_{2,P}^{**} = - \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* + K_2u_{1,P}^* \quad (6.15)$$

donde:

$$u_{1,P}^{**} = \frac{1}{(a_{1,P} + K_1)} \left(- \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* + K_1u_{2,P}^* \right) \quad (6.16)$$

$$u_{2,P}^{**} = \frac{1}{(a_{2,P} + K_2)} \left(- \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* + K_2u_{1,P}^* \right) \quad (6.17)$$

A pesar de las diferencias entre el modelo gas y partículas completo y el presente modelo simplificado (*i.e.* presencia de términos de presión y términos fuente), puede notarse la similitud entre las Ecs. (6.16) y (6.17) con las Ecs. (3.36), (3.37) y (3.38).

Por otra parte, para PEA, se puede operar sobre las Ecs. (6.12) y (6.13), de modo de obtener:

$$(a_{1,P} + K_1)u_{1,P}^{**} = - \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* + K_1u_{2,P}^{**} \quad (6.18)$$

$$(a_{2,P} + K_2)u_{2,P}^{**} = - \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* + K_2u_{1,P}^{**} \quad (6.19)$$

donde:

$$u_{1,P}^{**} = \frac{1}{(a_{1,P} + K_1)} \left(- \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* + K_1u_{2,P}^{**} \right) \quad (6.20)$$

$$u_{2,P}^{**} = \frac{1}{(a_{2,P} + K_2)} \left(- \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* + K_2u_{1,P}^{**} \right) \quad (6.21)$$

Luego, incluyendo la Ec. (6.21) en la Ec. (6.18) y la Ec. (6.20) en la Ec. (6.19) se obtiene:

$$u_{1,P}^{**} = \frac{1}{\left[a_{1,P} + K_1 - \frac{K_1K_2}{(a_{2,P} + K_2)} \right]} \left(- \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* - \frac{K_1}{(a_{2,P} + K_2)} \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* \right) \quad (6.22)$$

$$u_{2,P}^{**} = \frac{1}{\left[a_{2,P} + K_2 - \frac{K_2K_1}{(a_{1,P} + K_1)} \right]} \left(- \sum_{NB} a_{2,NB}u_{2,NB}^* - \frac{K_2}{(a_{1,P} + K_1)} \sum_{NB} a_{1,NB}u_{1,NB}^* \right) \quad (6.23)$$

Al igual que para PIM, aquí puede notarse una clara analogía de las Ecs. (6.22) y (6.23) con las Ecs. (3.50), (3.51) y (3.52).

Este desarrollo muestra que las formas extensas dadas por las Ecs. (6.22) y (6.23), como son comúnmente presentadas en la literatura [29, 92, 94], parten de las expresiones dadas por las Ecs. (6.12) y (6.13), dejando en evidencia el mayor grado de implicitud del método respecto a PIM.

En todos los métodos propuestos, puede notarse la separación de términos diagonales y no-diagonales del lado izquierdo de las ecuaciones propio de los métodos segregados de acople presión-velocidad. De hecho, esta forma de presentar las ecuaciones no es arbitraria. Esta forma se condice con la formulación de las ecuaciones de momento previo al ensamble de la ecuación de presión de los métodos segregados de la familia SIMPLE y PISO.

El modelo discreto descrito por las Ecs. (6.6) y (6.7) puede expresarse en forma matricial como:

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}_1 + \mathbf{H}_1)\mathbf{u}_1 &= \mathbf{K}_1\mathbf{u}_2 - \mathbf{K}_1\mathbf{u}_1 \\ (\mathbf{A}_2 + \mathbf{H}_2)\mathbf{u}_2 &= \mathbf{K}_2\mathbf{u}_1 - \mathbf{K}_2\mathbf{u}_2 \end{aligned} \quad (6.24)$$

donde \mathbf{A}_i , \mathbf{H}_i y \mathbf{K}_i son bloques de matrices y \mathbf{u}_i son los campos velocidad del sistema discreto.

En esta notacion, se puede expresar un metodo totalmente implicito como:

$$\mathbf{A}_T\mathbf{u}^{**} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 + \mathbf{H}_1 + \mathbf{K}_1 & -\mathbf{K}_1 \\ -\mathbf{K}_2 & \mathbf{A}_2 + \mathbf{H}_2 + \mathbf{K}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1^{**} \\ \mathbf{u}_2^{**} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (6.25)$$

Ahora bien, los métodos segregados de la familia SIMPLE y PISO consisten en plantear el operador \mathbf{H} basado en valores de \mathbf{u} almacenados previamente al momento de ensamblar la ecuación de presión. Así, el sistema resulta:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 + \mathbf{K}_1 & -\mathbf{K}_1 \\ -\mathbf{K}_2 & \mathbf{A}_2 + \mathbf{K}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1^{**} \\ \mathbf{u}_2^{**} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{H}_1 & 0 \\ 0 & -\mathbf{H}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1^* \\ \mathbf{u}_2^* \end{pmatrix} \quad (6.26)$$

donde, para un problema unidimensional, se tiene:

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} a_{i,11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{i,22} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & a_{i,33} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & a_{i,NN} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{H}_i = \begin{pmatrix} 0 & a_{i,12} & 0 & \dots & 0 \\ a_{i,21} & 0 & a_{i,23} & \dots & \dots \\ 0 & a_{i,32} & 0 & a_{i,34} \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & a_{i,NN-1} & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{K}_i = K_i\mathbf{I} \quad (6.27)$$

Siguiendo esta notación, se puede reescribir los distintos métodos de acoplamiento presentados, teniendo en cuenta que todos ellos cuentan con un grado de explicitud. Esto implica que siempre existirá una matriz $\mathbf{A}_E \neq \mathbf{0}$, tal que el sistema en cuestión pueda expresarse como:

$$\mathbf{A}_I \mathbf{u}^{**} + \mathbf{A}_E \mathbf{u}^* = \mathbf{0} \implies \mathbf{u}^{**} = (\mathbf{A}_I)^{-1} (-\mathbf{A}_E) \mathbf{u}^* \quad (6.28)$$

Entonces, las matrices \mathbf{A}_I y \mathbf{A}_E para cada método resultan:

$$\mathbf{A}_I^{FET} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{A}_E^{FET} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_1 + \mathbf{K}_1 & -\mathbf{K}_1 \\ -\mathbf{K}_2 & \mathbf{H}_2 + \mathbf{K}_2 \end{pmatrix} \quad (6.29)$$

$$\mathbf{A}_I^{PIM} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 + \mathbf{K}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 + \mathbf{K}_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{A}_E^{PIM} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_1 & -\mathbf{K}_1 \\ -\mathbf{K}_2 & \mathbf{H}_2 \end{pmatrix} \quad (6.30)$$

$$\mathbf{A}_I^{PEA} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 + \mathbf{K}_1 & -\mathbf{K}_1 \\ -\mathbf{K}_2 & \mathbf{A}_2 + \mathbf{K}_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{A}_E^{PEA} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_2 \end{pmatrix} \quad (6.31)$$

Como puede apreciarse en las matrices dadas por las expresiones (6.29), (6.30) y (6.31), el bloque \mathbf{A}_i siempre forma parte de \mathbf{A}_I (es decir, es tratado de forma implícita), mientras que el bloque \mathbf{H}_i siempre forma parte de \mathbf{A}_E (es decir, es tratado de forma explícita). Esto está relacionado al método segregado de acoplamiento presión-velocidad el cual, en este sentido, no se ve modificado por el método de acoplamiento entre fases. Esto constituye un impedimento natural a la estabilidad, dado que de esta manera la convergencia en la resolución del sistema completo $p-u_1-u_2$ estará limitada por la propia tasa de convergencia del método de acoplamiento presión-velocidad.

Al analizar la Ec. (6.28) se puede apreciar que el método tendrá mayor estabilidad en la medida en que se pueda distribuir mayor cantidad de contribuciones de \mathbf{A} en \mathbf{A}_I . En este sentido, es esperable que PEA tenga el mejor comportamiento en términos de estabilidad y tasa de convergencia. A continuación, se buscará corroborar este comportamiento haciendo uso del método de descomposición de Fourier.

Aplicando el método de Fourier sobre las Ecs. (6.8) a (6.13), se pueden plantear los coeficientes de amplificación de las matrices respectivas, de forma análoga al método para una fase:

$$\begin{bmatrix} \gamma_{u,1} \\ \gamma_{u,2} \end{bmatrix}^{**} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} \gamma_{u,1} \\ \gamma_{u,2} \end{bmatrix}^* \quad (6.32)$$

$$\beta(\theta) = \max_i \{|\lambda_i(\theta)|\} \quad (6.33)$$

siendo $\gamma_{u,i}$ los coeficientes de Fourier y λ_i los autovalores de la matriz \mathbf{A} .

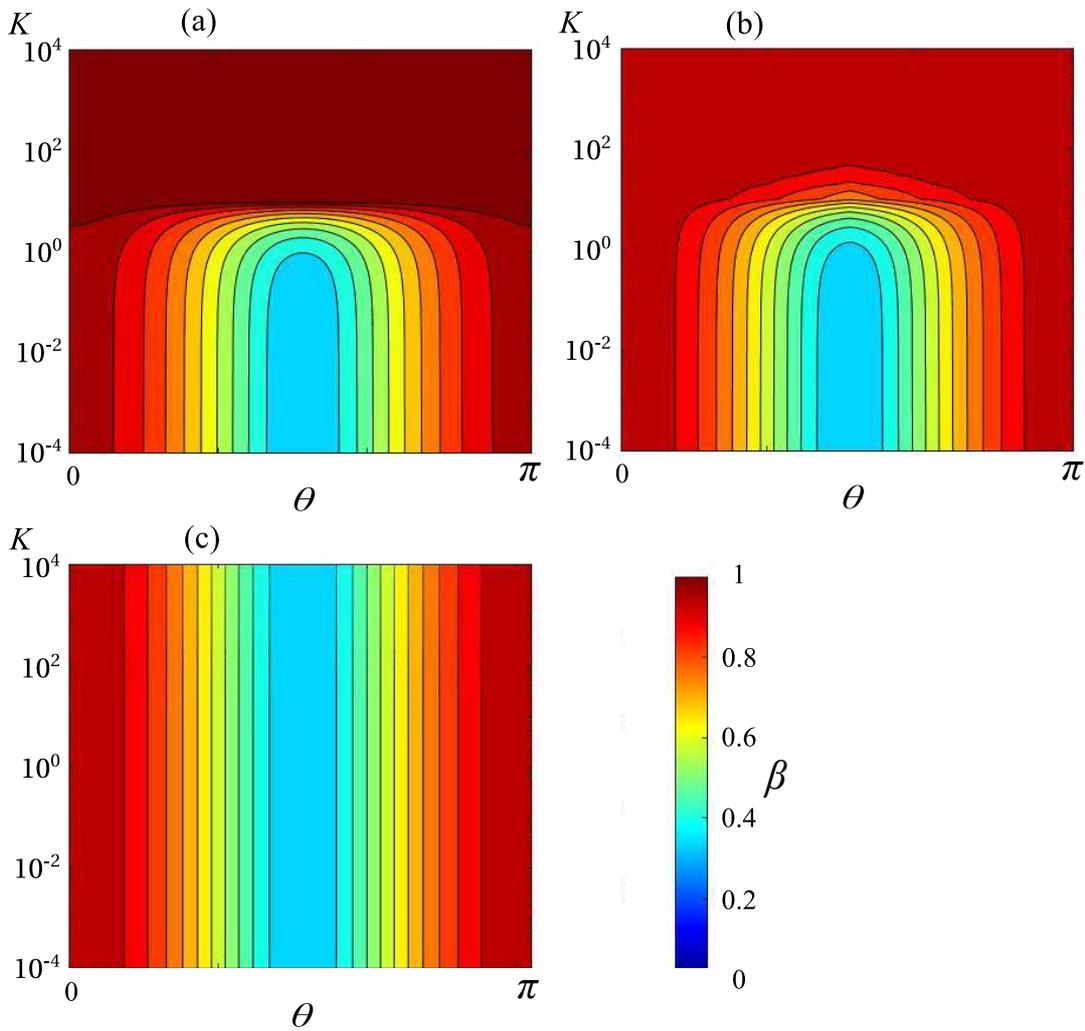


Figura 6.4: Factor de amplificación para métodos de acople por arrastre a dos fases en el modelo simplificado: (a) FET, (b) PIM y (c) PEA

En la Fig. 6.4 se presentan los factores de amplificación β para distintas frecuencias y distintos valores del coeficiente de arrastre K (cuyo valor adoptado es común para ambas fases). En la gráfica se ven los resultados para cada método de acoplamiento y para $Co = 1$ y $Re = 1$.

Aquí puede apreciarse que el factor de amplificación para el método FET tiene amplios

rangos de inestabilidad ($\beta \geq 1$) para valores de arrastre por encima de 10. Esto vuelve al método muy poco recomendable para la resolución de flujos a dos fases. Por otro lado, el método PIM es estable para todos los rangos de frecuencias con valores de amplificación que alcanzan la unidad para valores de arrastre elevados. En contraste, los factores de amplificación del método PEA resultan totalmente independientes del coeficiente de arrastre.

A continuación, el estudio será extendido por el método de descomposición de Fourier al acople entre la presión y las velocidades de cada fase solo para los métodos PIMPLE-PIM y PIMPLE-PEA.

6.3. Estabilidad del método PIMPLE

Ya se ha analizado la estabilidad de los métodos de acoplamiento a una fase $p - u$ y se han estudiado formas de acoplamiento por arrastre a dos fases entre los campos $u_1 - u_2$ sobre un modelo simplificado. En esta sección, se analizará el acoplamiento de los tres campos ($p - u_1 - u_2$) por el método PIMPLE para el acoplamiento con la presión y los métodos PIM y PEA para el acoplamiento entre fases. Los mismos son denominados PIMPLE-PIM o PIMPLE-PEA respectivamente.

Se estudiará el siguiente sistema unidimensional simplificado:

$$\frac{\partial}{\partial x}[\alpha u_1 + (1 - \alpha)u_2] = 0 \quad (6.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha u_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha u_1 u_1) = -\frac{\alpha}{\rho_1} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \nu_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} \right) + K_1(u_2 - u_1) \quad (6.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[(1 - \alpha)u_2] + \frac{\partial}{\partial x}[(1 - \alpha)u_2 u_2] = -\frac{(1 - \alpha)}{\rho_2} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - \alpha) \nu_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} \right] + K_2(u_1 - u_2) \quad (6.36)$$

Este sistema de ecuaciones puede asimilarse como una parte del modelo completo de gas y partículas descrito en el Capítulo 3, en donde se omiten los efectos reológicos de la fase granular y la fracción α es considerada constante.

Al utilizar un valor de α constante, se está analizando el proceso de amplificación de los errores por cada iteración externa una vez resuelta la ecuación de continuidad de la fase sólida. Esto equivale a analizar la estabilidad del proceso dado por los pasos 2.2 a 2.7.5 del algoritmo descrito en la Sección 3.3.5. En la práctica se ha observado que en estas etapas se concentra el

mayor consumo de tiempo computacional por iteración para una dada tolerancia de residuos de la ecuación de momento.

Para la resolución mediante el método de Fourier, se propone un modelo simplificado del coeficiente de arrastre dada por $K_1 = K_2 = C_f \alpha (1 - \alpha)$ [35]. Así, pueden obtenerse los siguientes stencils discretos para el sistema propuesto:

$$\alpha_e u_{1,e}^{**} + (1 - \alpha_e) u_{2,e}^{**} - \alpha_w u_{1,2}^{**} + (1 - \alpha_w) u_{2,w}^{**} = 0 \quad (6.37)$$

$$\bar{a}_{1,P} u_{1,P}^* + a_{1,E} u_{1,E}^* + a_{1,W} u_{1,W}^* = b_p u_{1,P}^0 + (1 - \alpha) C_f u_{2,P}^0 - \frac{S}{2\rho_1} (p_E^0 - p_W^0) \quad (6.38)$$

$$\bar{a}_{2,P} u_{2,P}^* + a_{2,E} u_{2,E}^* + a_{2,W} u_{2,W}^* = b_p u_{2,P}^0 + \alpha C_f u_{1,P}^0 - \frac{S}{2\rho_2} (p_E^0 - p_W^0) \quad (6.39)$$

donde $\bar{a}_{1,P} = b_p + a_{1,P} + C_f(1 - \alpha)$ y $\bar{a}_{2,P} = b_p + a_{2,P} + C_f \alpha$

Las Ecs. (6.38) y (6.39) son los predictores de momento de cada fase. Mediante descomposición de Fourier, los coeficientes de Fourier para el predictor de momento resultan:

$$\gamma_{u,1}^* = \left(\frac{b_P}{P_1} \right) \gamma_{u,1}^0 + \left[\frac{(1 - \alpha) C_f}{P_1} \right] \gamma_{u,2}^0 + \left[-\frac{iS}{P_1 \rho_1} \text{sen}(\theta) \right] \gamma_p^0 \quad (6.40)$$

$$\gamma_{u,2}^* = \left(\frac{b_P}{P_2} \right) \gamma_{u,2}^0 + \left(\frac{\alpha C_f}{P_2} \right) \gamma_{u,1}^0 + \left[-\frac{iS}{P_2 \rho_2} \text{sen}(\theta) \right] \gamma_p^0 \quad (6.41)$$

Esta etapa es común a cualquiera de los métodos de acoplamiento entre fase. La diferencia se encuentra al momento de plantear campos de velocidades que verifiquen la conservación de la masa (Ec. (6.37)) a partir de las respectivas ecuaciones de momento. Una forma general de plantear esto en forma de stencils es:

$$\bar{a}_{1,P} u_{1,P}^{**} + a_{1,E} u_{1,E}^* + a_{1,W} u_{1,W}^* = b_p u_{1,P}^0 + (1 - \alpha) C_f u_{2,P}^m - \frac{1}{\rho_1} (\hat{\nabla} p^{**})_p \quad (6.42)$$

$$\bar{a}_{2,P} u_{2,P}^{**} + a_{2,E} u_{2,E}^* + a_{2,W} u_{2,W}^* = b_p u_{2,P}^0 + \alpha C_f u_{1,P}^m - \frac{1}{\rho_2} (\hat{\nabla} p^{**})_p \quad (6.43)$$

Mediante esta nomenclatura, los métodos de acoplamiento se pueden distinguir por el grado de implicitud con que es tratado el término de arrastre: PIM ($m \equiv *$) y PEA ($m \equiv **$).

6.3.1. Método de Fourier para el Método Implícito por Fase (PIM)

Para PIM, se plantea una velocidad que buscará verificar la conservación de masa haciendo uso de las Ecs. (6.42) y (6.43) con $m \equiv *$. Para este caso, la corrección de velocidades resulta:

$$u_{1,P}^{**} = -\frac{a_{1,E}}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,E}^* - \frac{a_{1,W}}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,W}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,P}^0 + \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}}u_{2,P}^* - \frac{1}{\rho_1\bar{a}_{1,P}}(\hat{\nabla}p^{**})_P \quad (6.44)$$

$$u_{2,P}^{**} = -\frac{a_{2,E}}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,E}^* - \frac{a_{2,W}}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,W}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,P}^0 + \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}}u_{1,P}^* - \frac{1}{\rho_2\bar{a}_{2,P}}(\hat{\nabla}p^{**})_P \quad (6.45)$$

De estos stencils, se puede plantear la ecuación de presión haciendo uso de la Ec. (6.37) como:

$$\begin{aligned} D_p^{PIM}(p_E^{**} - 2p_P^{**} + p_W^{**}) = & -\frac{\alpha}{2\bar{a}_{1,P}S}[a_{1,E}u_{1,EE}^* - (a_{1,E} - a_{1,W})u_{1,P}^* - a_{1,W}u_{1,WW}^*] \\ & -\frac{(1-\alpha)}{2\bar{a}_{2,P}S}[a_{2,E}u_{2,EE}^* - (a_{2,E} - a_{2,W})u_{2,P}^* - a_{2,W}u_{2,WW}^*] \\ & +\frac{\alpha b_P}{2\bar{a}_{1,P}S}(u_{1,E}^0 - u_{1,W}^0) + \frac{(1-\alpha)b_P}{2\bar{a}_{2,P}S}(u_{2,E}^0 - u_{2,W}^0) \\ & +\frac{\alpha(1-\alpha)C_f}{2\bar{a}_{2,P}S}(u_{1,E}^* - u_{1,W}^*) + \frac{\alpha(1-\alpha)C_f}{2\bar{a}_{1,P}S}(u_{2,E}^* - u_{2,W}^*) \end{aligned} \quad (6.46)$$

siendo $D_p^{PIM} = \left[\frac{\alpha}{\rho_1\bar{a}_{1,P}} + \frac{(1-\alpha)}{\rho_2\bar{a}_{2,P}} \right]$

Mediante la descomposición de Fourier, se puede obtener los siguientes coeficientes para la etapa correctora:

$$\begin{aligned} \gamma_p^{**} = & \left\{ -\left(\frac{\alpha \text{isen}(\theta)}{SD_p^{PIM}P_p} \right) \left[\frac{P'_1}{\bar{a}_{1,P}} - \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{2,P}} \right] \right\} \gamma_{u,1}^* \\ & + \left\{ -\left(\frac{(1-\alpha) \text{isen}(\theta)}{SD_p^{PIM}P_p} \right) \left[\frac{P'_2}{\bar{a}_{2,P}} - \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{1,P}} \right] \right\} \gamma_{u,2}^* \\ & + \left(\frac{\alpha b_p \text{isen}(\theta)}{\bar{a}_{1,P}SD_p^{PIM}P_p} \right) \gamma_{u,1}^0 \\ & + \left(\frac{(1-\alpha) b_p \text{isen}(\theta)}{\bar{a}_{2,P}SD_p^{PIM}P_p} \right) \gamma_{u,2}^0 \end{aligned} \quad (6.47)$$

Mientras que las velocidades del paso corrector resultan:

$$\gamma_{u,1}^{**} = -\frac{P'_1}{\bar{a}_{1,P}}\gamma_{u,1}^* + \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}}\gamma_{u,2}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{1,P}}\gamma_{u,1}^0 - \frac{iS \text{sen}(\theta)}{\rho_1\bar{a}_{1,P}}\gamma_p^{**} \quad (6.48)$$

$$\gamma_{u,2}^{**} = -\frac{P'_2}{\bar{a}_{2,P}}\gamma_{u,2}^* + \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}}\gamma_{u,1}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{2,P}}\gamma_{u,2}^0 - \frac{iS \text{sen}(\theta)}{\rho_2\bar{a}_{2,P}}\gamma_p^{**} \quad (6.49)$$

donde $P'_i = P_i - \bar{a}_{i,P}$

6.3.2. Método de Fourier para el Algoritmo de Eliminación Parcial (PEA)

Para PEA, se plantea una velocidad que verifique la conservación de masa haciendo uso de las Ecs. (6.42) y (6.43) con $m \equiv **$. Para este caso, la corrección de velocidades resulta:

$$u_{1,P}^{**} = -\frac{a_{1,E}}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,E}^* - \frac{a_{1,W}}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,W}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,P}^0 + \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}}u_{2,P}^{**} - \frac{1}{\rho_1\bar{a}_{1,P}}(\hat{\nabla}p^{**})_p \quad (6.50)$$

$$u_{2,P}^{**} = -\frac{a_{2,E}}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,E}^* - \frac{a_{2,W}}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,W}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,P}^0 + \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}}u_{1,P}^{**} - \frac{1}{\rho_2\bar{a}_{2,P}}(\hat{\nabla}p^{**})_p \quad (6.51)$$

Este método consta de un paso extra para aislar las velocidades del paso corrector que consiste en realizar una sustitución de los valores $u_{i,P}^{**}$ de una fase en la ecuación de la fase complementaria. De esta forma, resulta:

$$\begin{aligned} u_{1,P}^{**} = & -\frac{a_{1,E}}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,E}^* - \frac{a_{1,W}}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,W}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,P}^0 \\ & - \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}}\frac{a_{2,E}}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,E}^* - \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}}\frac{a_{2,W}}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,W}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,P}^0 \\ & - \left[\frac{(1-\alpha)C_f}{\rho_2\bar{a}_{1,P}\bar{a}_{2,P}} + \frac{1}{\rho_1\bar{a}_{1,P}} \right] (\hat{\nabla}p^{**})_p \end{aligned} \quad (6.52)$$

$$\begin{aligned} u_{2,P}^{**} = & -\frac{a_{2,E}}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,E}^* - \frac{a_{2,W}}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,W}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{2,P}}u_{2,P}^0 \\ & - \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}}\frac{a_{1,E}}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,E}^* - \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}}\frac{a_{1,W}}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,W}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{1,P}}u_{1,P}^0 \\ & - \left[\frac{\alpha C_f}{\rho_1\bar{a}_{2,P}\bar{a}_{1,P}} + \frac{1}{\rho_2\bar{a}_{2,P}} \right] (\hat{\nabla}p^{**})_p \end{aligned} \quad (6.53)$$

De estos stencils, se puede plantear la ecuación de presión haciendo uso de la Ec. (6.37) y así obtener:

$$\begin{aligned} D_p^{PEA}(p_E^{**} - 2p_P^{**} + p_W^{**}) = & \frac{\alpha}{2S} \left[\frac{1}{\bar{a}_{1,P}} + \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}\bar{a}_{2,P}} \right] [-a_{1,E}u_{1,EE}^* + (a_{1,E} - a_{1,W})u_{1,P}^* + a_{1,W}u_{1,WW}^* + b_p(u_{1,E}^0 - u_{1,W}^0)] \\ & + \frac{(1-\alpha)}{2S} \left[\frac{1}{\bar{a}_{2,P}} + \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}\bar{a}_{1,P}} \right] [-a_{2,E}u_{2,EE}^* + (a_{2,E} - a_{2,W})u_{2,P}^* + a_{2,W}u_{2,WW}^* + b_p(u_{2,E}^0 - u_{2,W}^0)] \end{aligned} \quad (6.54)$$

$$\text{siendo } D_p^{PEA} = \left[\frac{\alpha}{\rho_1\bar{a}_{1,P}} + \frac{(1-\alpha)}{\rho_2\bar{a}_{2,P}} \right]$$

Mediante la descomposición de Fourier, se puede obtener los siguientes coeficientes para la etapa correctora:

$$\begin{aligned}
\gamma_p^{**} = & \left\{ - \left(\frac{\alpha i P'_1 \text{sen}(\theta)}{SD_p^{PEA} P_p} \right) \left[\frac{1}{\bar{a}_{1,P}} - \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}\bar{a}_{2,P}} \right] \right\} \gamma_{u,1}^* \\
& + \left\{ - \left(\frac{(1-\alpha) i P'_2 \text{sen}(\theta)}{SD_p^{PEA} P_p} \right) \left[\frac{1}{\bar{a}_{2,P}} - \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}\bar{a}_{1,P}} \right] \right\} \gamma_{u,2}^* \\
& + \left\{ \left(\frac{\alpha b_p i \text{sen}(\theta)}{SD_p^{PEA} P_p} \right) \left[\frac{1}{\bar{a}_{1,P}} - \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}\bar{a}_{2,P}} \right] \right\} \gamma_{u,1}^0 \\
& + \left\{ \left(\frac{(1-\alpha) b_p i \text{sen}(\theta)}{SD_p^{PEA} P_p} \right) \left[\frac{1}{\bar{a}_{2,P}} - \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}\bar{a}_{1,P}} \right] \right\} \gamma_{u,2}^0
\end{aligned} \tag{6.55}$$

Mientras que las velocidades del paso corrector resultan:

$$\begin{aligned}
\gamma_{u,1}^{**} = & - \frac{P'_1}{\bar{a}_{1,P}} \gamma_{u,1}^* - \frac{(1-\alpha)C_f}{\bar{a}_{1,P}} \frac{P'_2}{\bar{a}_{2,P}} \gamma_{u,2}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{1,P}} \gamma_{u,1}^0 + \frac{\alpha b_p C_f}{\bar{a}_{1,P}\bar{a}_{2,P}} \gamma_{u,2}^0 \\
& - \left[\frac{(1-\alpha)C_f}{\rho_2 \bar{a}_{1,P}\bar{a}_{2,P}} + \frac{1}{\rho_1 \bar{a}_{1,P}} \right] [iS \text{sen}(\theta)] \gamma_p^{**}
\end{aligned} \tag{6.56}$$

$$\tag{6.57}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_{u,2}^{**} = & - \frac{P'_2}{\bar{a}_{2,P}} \gamma_{u,2}^* - \frac{\alpha C_f}{\bar{a}_{2,P}} \frac{P'_1}{\bar{a}_{1,P}} \gamma_{u,1}^* + \frac{b_p}{\bar{a}_{2,P}} \gamma_{u,2}^0 + \frac{\alpha b_p C_f}{\bar{a}_{2,P}\bar{a}_{1,P}} \gamma_{u,1}^0 \\
& - \left[\frac{\alpha C_f}{\rho_1 \bar{a}_{2,P}\bar{a}_{1,P}} + \frac{1}{\rho_2 \bar{a}_{2,P}} \right] [iS \text{sen}(\theta)] \gamma_p^{**}
\end{aligned} \tag{6.58}$$

La metodología para determinar la matriz final de amplificación es similar a la desarrollada para problemas a una fase. En este caso, se cumple que la amplificación de las variables involucradas para el método PIMPLE resultan:

$$\begin{bmatrix} \gamma_{u,1} \\ \gamma_{u,2} \\ \gamma_p \end{bmatrix}^{(n_P+1)*} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} \gamma_{u,1} \\ \gamma_{u,2} \\ \gamma_p \end{bmatrix}^0 \tag{6.59}$$

donde n_P son el número de iteraciones del paso corrector y \mathbf{A} es calculada con la misma secuencia que en el método PISO.

De igual manera, se pueden obtener los factores de amplificación para la matriz de amplificación correspondiente al método IPSA [34]. Este método resulta análogo al método SIMPLE en el sentido de que utiliza factores de sobre-relajación en lugar de iteraciones del paso corrector.

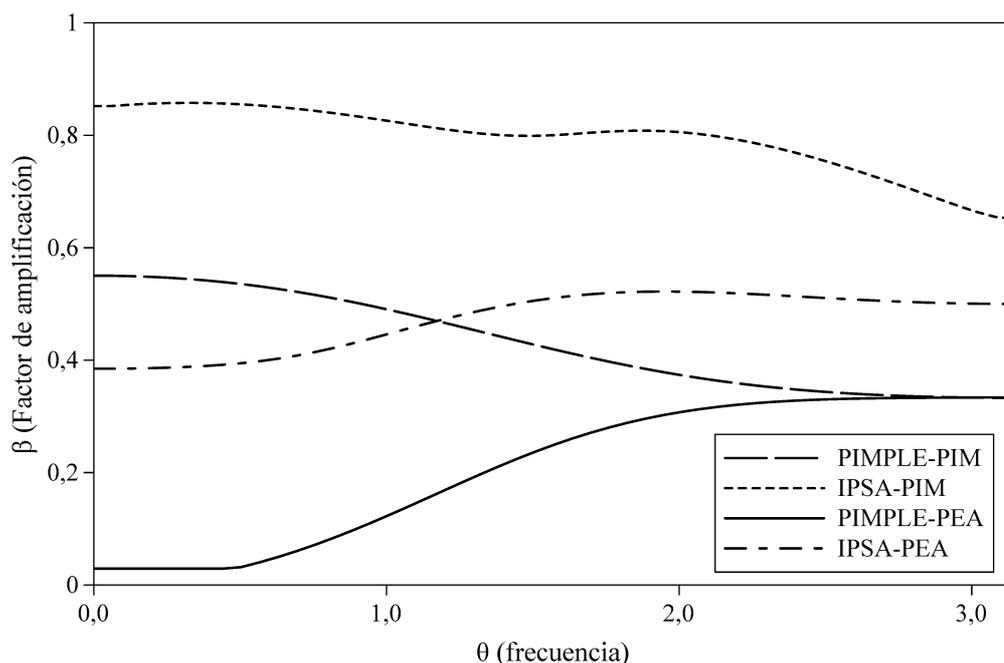


Figura 6.5: Amplificación $p - u_1 - u_2$ por los métodos IPISA (con $\omega = 0,7$ y $\omega_p = 0,3$) y PIMPLE ($n_P = 2$) y PIM y PEA entre velocidades: $\alpha = 0,1$, $C_f = 1000$, $\rho_1/\rho_2 = 1000$

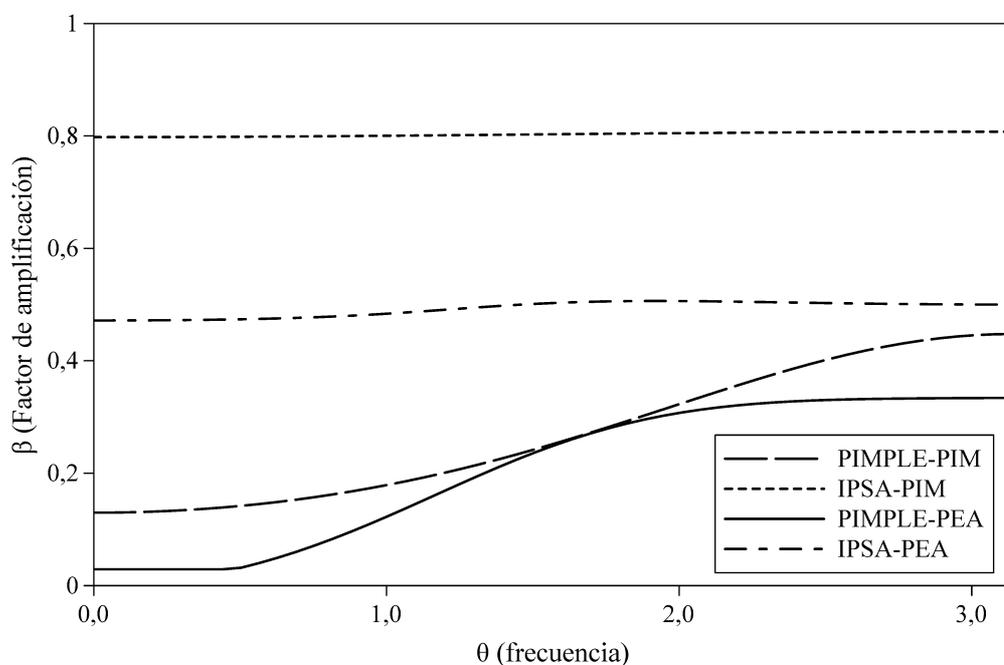


Figura 6.6: Amplificación $p - u_1 - u_2$ por los métodos IPISA (con $\omega = 0,7$ y $\omega_p = 0,3$) y PIMPLE ($n_P = 2$) y PIM y PEA entre velocidades: $\alpha = 0,5$, $C_f = 1000$, $\rho_1/\rho_2 = 1000$

En la Fig. 6.5 se pueden apreciar los factores de amplificación para una relación de densidades $\rho_1/\rho_2 = 1000$ (lo cual podría corresponder a una fase gas y otra fase líquida o sólida) y un valor de $C_f = 1000$. Aquí, el método IPSA-PIM, con factores de sobre-relajación de $\omega = 0,7$ y $\omega_p = 0,3$, presenta factores de amplificación altos en todo el rango de frecuencias, mientras que el método PIMPLE-PEA presenta los menores factores de amplificación de los métodos estudiados. Por otro lado, en la Fig. 6.6, se presentan resultados para fracciones de la fase densa altas. Este podría ser el caso de condiciones cercanas al empaquetamiento en flujos de gas y partículas. Aquí nuevamente, los mejores resultados se presentan para el método PIMPLE-PEA, mientras que IPSA-PIM presenta factores de amplificación altos en todos los rangos de frecuencias. Las Figs. 6.7 y 6.8 presentan los factores de amplificación para distintas frecuencias y coeficientes de arrastre C_f por el método PIMPLE-PIM y PIMPLE-PEA respectivamente. Aquí puede apreciarse que la estabilidad del método PIMPLE-PIM esta fuertemente relacionada al valor del coeficiente de arrastre, obteniendo valores de β por encima de 1 para algunas frecuencias y para valores elevados de arrastre. Por otro lado, el método PIMPLE-PEA, los factores de amplificación alcanzan, por encima de determinados valores de arrastre, un valor constante que ya no se ve afectado por el aumento de dicho coeficiente.

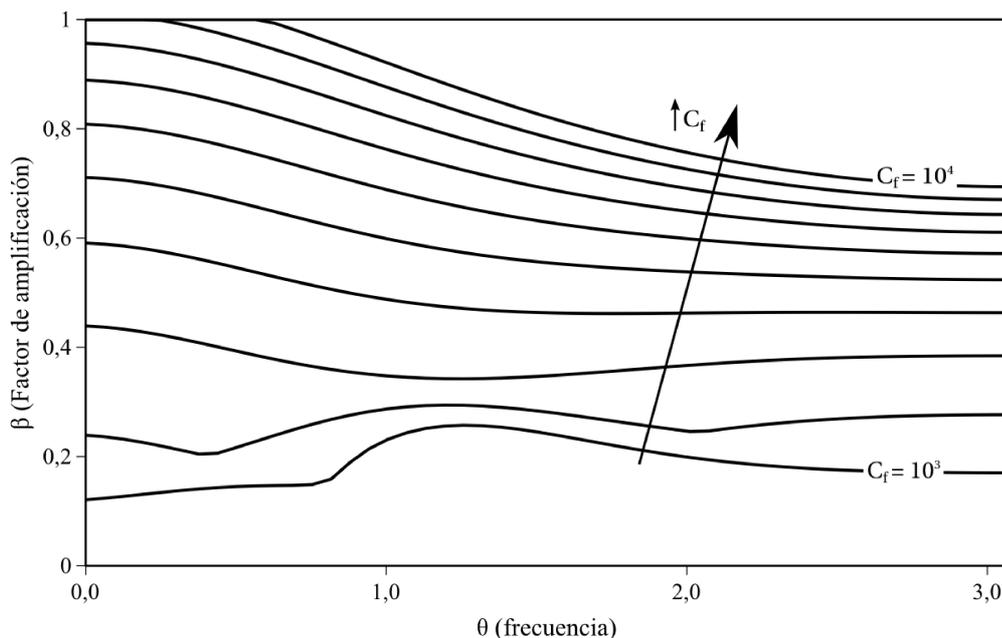


Figura 6.7: Amplificación para acople $p - u_1 - u_2$ por el método PIMPLE-PIM con diferentes coeficientes de arrastre C_f : $\alpha = 0,1$, $\rho_1/\rho_2 = 1000$

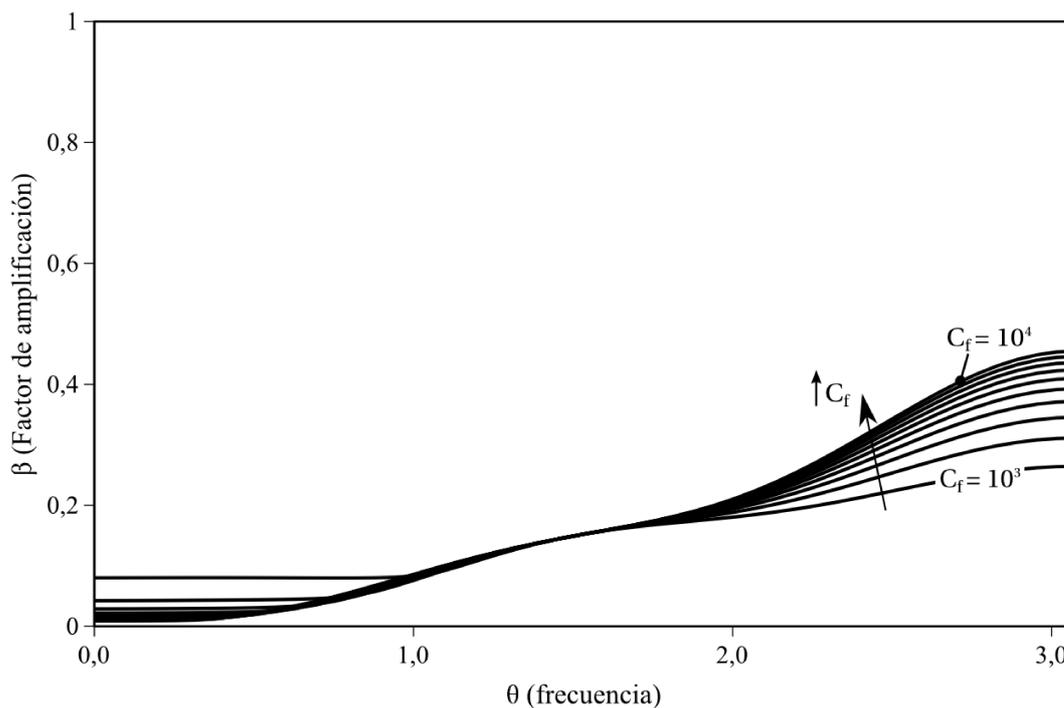


Figura 6.8: Amplificación para acople $p - u_1 - u_2$ por el método PIMPLE-PEA con diferentes coeficientes de arrastre C_f : $\alpha = 0,1$, $\rho_1/\rho_2 = 1000$

6.4. Análisis de los resultados

El análisis de estabilidad por el método de Fourier aplicado a dos fases permite concluir que:

- El método de acoplamiento PEA para un problema de acoplamiento entre dos ecuaciones de momento exclusivamente por arrastre, resulta independiente del coeficiente de arrastre. Para una sola iteración, este presenta los valores de amplificación más bajos para frecuencias intermedias, mientras que los otros métodos carecen de convergencia ($\beta = 1$) para valores de arrastre altos en todo el rango de frecuencias.
- Cuando el problema incluye acoplamientos por arrastre y por presión, el métodos PIMPLE con dos pasos correctores resulta ampliamente superior al métodos IPSA con factores de sobre-relajación $\omega = 0,7$ y $\omega_p = 0,3$, tanto en concentraciones altas como bajas de la fase densa.

- En todos los casos estudiados, la mejor alternativa es el uso en conjunto de los métodos PIMPLE-PEA para el acoplamiento $p-u_1-u_2$. Las diferencias con las otras técnicas se ven acentuadas para valores de coeficiente de arrastre elevados lo cual se condice con lo observado en la literatura y en la práctica.

“There are two possible outcomes: If the result confirms the hypothesis, then you’ve made a measurement. If the result is contrary to the hypothesis, then you’ve made a discovery. .”

– Enrico Fermi (1901-1954)

Capítulo 7

Aplicaciones del modelo computacional

Los materiales granulares tienen diversas aplicaciones industriales, muchas de las cuales requieren de regímenes agitados para favorecer el contacto entre las fases y así incrementar la transferencia de masa y energía entre las mismas. Los sistemas de lechos fluidizados tienen estas características. En general, los lechos fluidizados consisten de un gran contenedor en el cual las partículas son fluidizadas mediante el ingreso de un flujo de gas a gran velocidad por la zona inferior. Entre las principales aplicaciones de los sistemas de lechos fluidizados se destacan los procesos de crackeo catalítico, secado de granos, polimerización de etanol, gasificación de carbón y biomasa, entre otros. Dado el amplio uso de estos sistemas a nivel industrial, un correcto entendimiento del comportamiento hidrodinámico de los mismos resulta crucial para lograr un diseño adecuado.

Los sistemas de lechos fluidizados pueden diferenciarse por los distintos regímenes de fluidización alcanzables [110]. Estos están fundamentalmente regidos por la velocidad de ingreso del gas, por el tamaño de las partículas, por el material sólido y por las dimensiones del contenedor (Fig. 7.1). En lo que respecta al material particulado, los mismos pueden ser catalogados de acuerdo a los tamaños de partículas y a su densidad relativa al medio fluido. Este tipo de clasificación se conoce como clasificación de Geldart [111] y se puede apreciar

gráficamente en la Fig. 7.2.

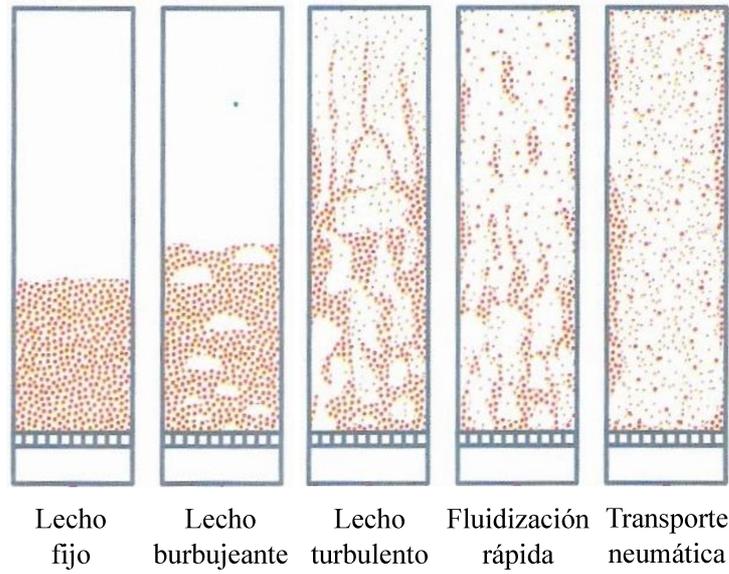


Figura 7.1: Regímenes de fluidización en lechos fluidizados

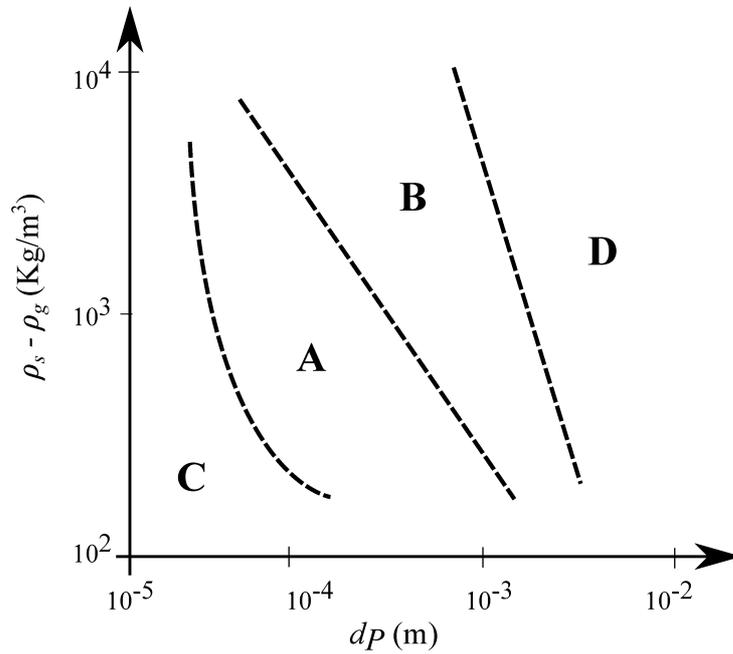


Figura 7.2: Mapa de clasificación Geldart

A nivel experimental, comúnmente se utilizan configuraciones de lechos pseudo-2D para favorecer la observación directa de los fenómenos de generación de burbujas y la dinámica de las partículas. Estas configuraciones son similares a los lechos tradicionales pero con un

contenedor prismático de pequeño espesor con una pared frontal comúnmente de acrílico para permitir la visualización de los patrones de flujo granular. En este tipo de aplicaciones, las técnicas de Fluidodinámica Computacional (CFD) han probado ser una alternativa económica para la predicción de los perfiles de velocidad y concentraciones de partículas [112, 113, 114, 115, 116, 108].

Con el propósito de explorar el desempeño de los modelos físicos comúnmente utilizados en la literatura para los coeficientes de arrastre, condiciones de pared y parámetros reológicos de la fase granular, en este capítulo se propone utilizar el modelo computacional desarrollado para estudiar sistemas de lecho fluidizados pseudo-2D en regímenes burbujeantes, contrastando los resultados de la simulación contra los propios experimentales de la literatura. Para ello, se comenzará analizando un problema de sedimentación unidimensional sencillo para verificar el desempeño de la herramienta y luego se estudiarán dos casos de fluidización aplicados: el crecimiento de una burbuja de aire en un lecho de partículas y una fluidización uniforme en régimen burbujeante.¹

7.1. Sedimentación de partículas unidimensional

Este problema consiste en un tubo vertical con una concentración inicial de partículas uniforme, las cuales, por efecto de la gravedad, comienzan a sedimentar sobre el fondo del tubo (Fig. 7.3). El mismo tiene un altura de 0,3 m con una concentración de sólidos inicial de 0,3. La densidad del gas es de $1,2 \text{ kg/m}^3$ con una viscosidad dinámica de $1,8 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$, mientras que la fase sólida está constituida por partículas de 0,4 mm de diámetro, una densidad de 2000 kg/m^3 y un coeficiente de restitución de 0,6. Se utiliza el modelo de arrastre de Gidaspow y se resuelve el balance de energía granular junto al Modelo II para los efectos friccionales a altas concentraciones de partículas.

El dominio es discretizado utilizando 30 celdas uniformes a lo largo del tubo y un paso de tiempo de $1 \times 10^{-4} \text{ s}$. Para el avance temporal se utiliza un esquema de segundo orden, mientras que para la interpolación espacial a caras se utiliza un esquema Upwind de segundo orden. El

¹Los principales resultados de este capítulo han sido publicados en el trabajo de Venier C.M., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *Assessment of gas-particle flow models for pseudo-2D fluidized bed applications*. Chemical Engineering Communications. *En prensa* [117]

criterio de convergencia adoptado es que los residuos de momento y continuidad se reduzcan por debajo de 1×10^{-4} y 1×10^{-7} respectivamente. Esto se logra con 20 iteraciones externas y 3 pasos correctores del algoritmo PIMPLE. Para este caso, no se detectan tasas de convergencia claramente distintas entre ambos métodos de acoplamiento (PIM y PEA) y se adopta la *forma conservativa* de las ecuaciones de momento debido a las ondas de choque que surgen durante la evolución transitoria.

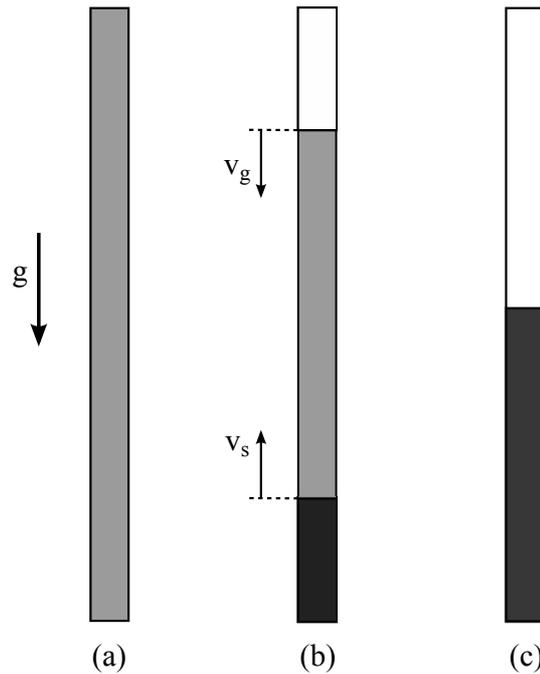


Figura 7.3: (a) Mezcla uniforme de gas y partículas, (b) Estado transitorio de sedimentación con una zona de gas puro en la parte superior y una zona de sólidos empaquetados en la zona inferior, (c) Estado final de sedimentación con ambas fases completamente segregadas.

En la Fig. 7.4 se presentan los resultados para tres etapas de la sedimentación, comparado los mismos contra los propios de la simulación realizada por Passalacqua *et al.* [29]. Aquí se aprecia un alto nivel de concordancia y una segregación completa de las fases en $t = 0,25$ s.

La distribución de partículas en el estado sedimentado está relacionado con los modelos friccionales adoptados. En este caso, se ha utilizado el Modelo II (Ecs. (2.155) y (2.150)) con $\alpha_{s,\min} = 0,61$. Esto produce una distribución de partículas prácticamente constante en la zona inferior del tubo. En cambio, si se utilizara el Modelo I con $\alpha_{s,\min} = 0,5$, la distribución de sólidos hubiera tenido una variación suave en la zona inferior del tubo. Este comportamiento puede ser predicho considerando un balance de fuerzas aproximado en el estado sedimentado

dado por:

$$\frac{\partial(p_s^f)}{\partial y} = \frac{\partial(p_s^f)}{\partial \alpha_s} \frac{\partial \alpha_s}{\partial y} \simeq \rho_s \alpha_s g \quad (7.1)$$

Aquí se han despreciado las fuerzas dadas por la contribución cinético-colisional de presión de sólido y la presión del fluido.

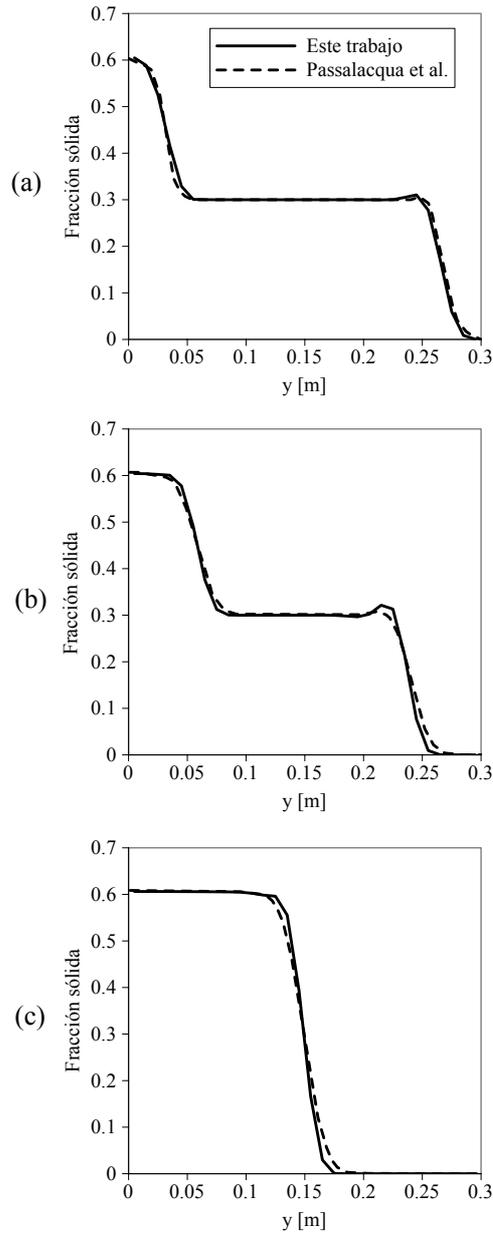


Figura 7.4: Distribución de sólidos a lo largo del tubo para (a) $t = 0,1$ s, (b) $t = 0,15$ s y (c) $t = 0,3$ s,

Los resultados de resolver esta expresión en comparación con los resultados de la simulación se presentan en la Fig. 7.5.

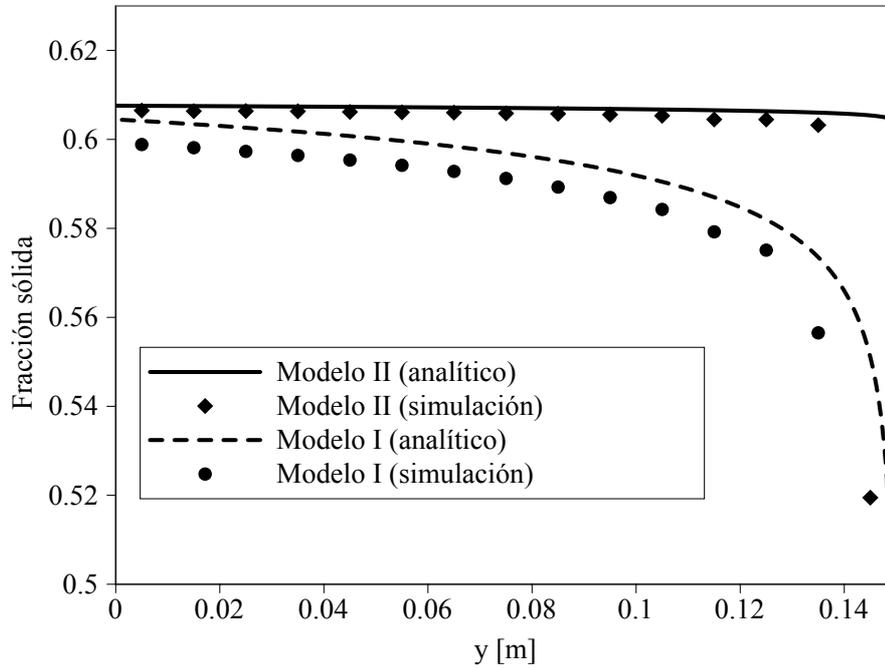


Figura 7.5: Predicción numérica y analítica de los perfiles de fracción de volumen mediante el uso de distintos modelos friccionales.

7.2. Crecimiento de una burbuja en un lecho de partículas

Este problema está basado en el experimento realizado por Kuipers *et al.* [106]. El mismo está esquematizado en la Fig. 7.6 y la Fig. 7.7 muestra una secuencia de simulación del crecimiento de una burbuja. Los modelos y parámetros numéricos se presentan en la Tabla 7.1. Aquí se busca explorar como afectan los modelos KTGF-FT que rigen los parámetros reológicos de la fase granular sobre la forma de la burbuja y el tiempo de desprendimiento del jet inferior.

En particular, el coeficiente de arrastre es calculado mediante el modelo de Gidaspow. Para verificar que el uso de este modelo resulta adecuado, una práctica usual consiste en estimar la velocidad mínima de fluidización a partir de un balance aproximado de fuerzas para las condiciones del problema, dado por:

$$(\rho_s - \rho_g)\alpha_s^{mf}\alpha_g^{mf}g = K_{sg}u^{mf} \quad (7.2)$$

donde el supraíndice mf indica el valor inicial del campo previo a la fluidización.

Entonces, reemplazando la Ec. (2.73) en la Ec. (7.2), se obtiene una velocidad mínima de fluidización de $u^{mf} \approx 0,22\text{m/s}$, la cual es un 12% mayor que la velocidad reportada experimentalmente por Kuipers *et al.* ($u_{exp}^{mf} \approx 0,25\text{m/s}$). Estas diferencias son consideradas aceptables para los propósitos del presente análisis.

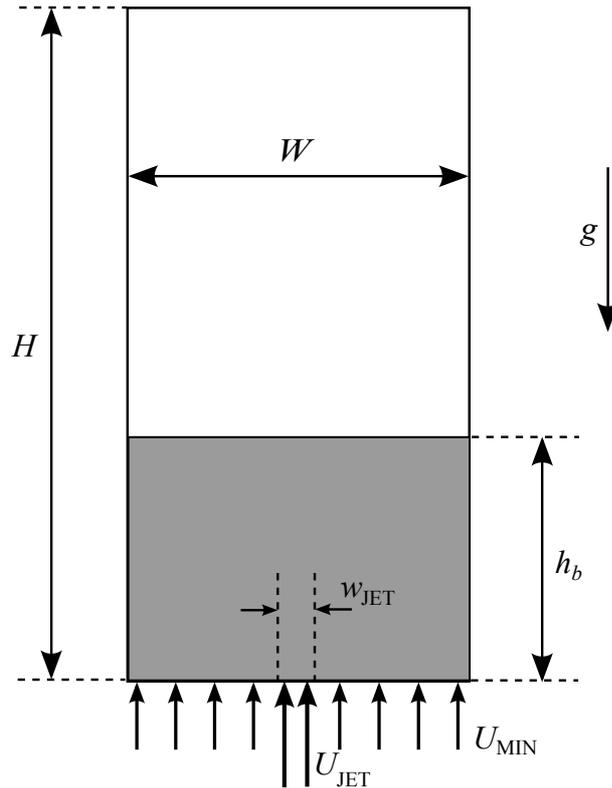


Figura 7.6: Esquema de crecimiento de una burbuja en un lecho fluidizado

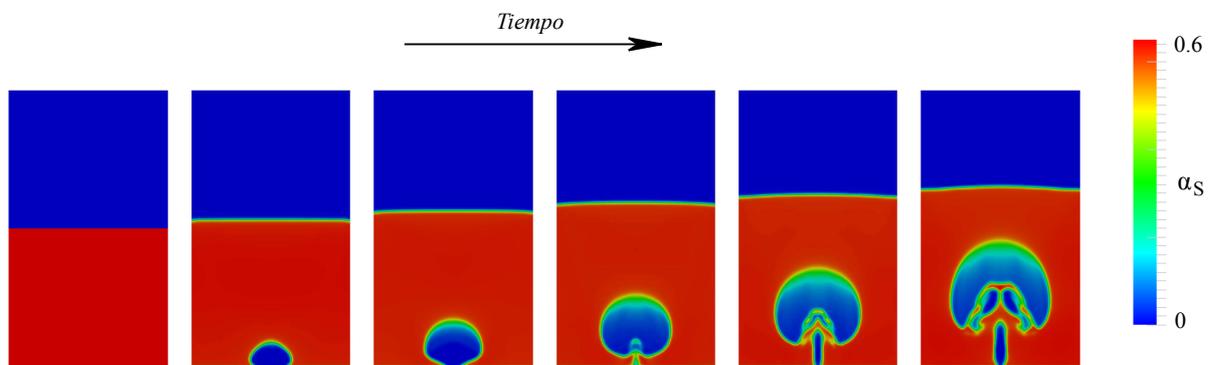


Figura 7.7: Secuencia de crecimiento de la burbuja

Descripción	Valor
Densidad del gas	1,225 kg/m ³
Viscosidad del gas	2,192 × 10 ⁻⁵ Pa s
Densidad de sólidos	2660 kg/m ³
Diámetro de partículas	500 μm
Coefficiente de restitución	0,95
Ancho total (W)	0,57 m
Altura total (H)	1 m
Nivel inicial del lecho (h_b)	0,5 m
Ancho de entrada del jet (w_{JET})	0,015 m
Fracción de sólidos inicial	0,598
Paso de tiempo	1,0 × 10 ⁻⁵ s
Discretización temporal	2do orden
Esquema de interpolación del término convectivo	Diferencias centradas
Número de pasos correctores	5
Número de iteraciones externas	10
Modelo de arrastre	Gidaspow
Velocidad de fluidización (U_{IN})	0,25 m/s
Velocidad de entrada del jet (U_{JET})	10 m/s
Presión a la salida	0 Pa

Tabla 7.1: Parámetros numéricos correspondientes al experimento de Kuipers *et al.*

La Fig. 7.8 muestra una comparación entre los resultados experimentales y de simulación computacional en términos de líneas de contorno de las fracciones de volumen solidas promediadas en el tiempo luego de 40 segundo de tiempo físico. Hay una clara similitud en la distribución de partículas con leves diferencias cerca de la pared. En este aspecto, el desempeño del modelo computacional se considera satisfactorio para predecir la distribución media de partículas.

A continuación se presenta un análisis de convergencia en malla para determinar el tamaño de malla óptimo que minimice los costos de simulación. Las Figs. 7.9 y 7.10 muestran el

crecimiento de una burbuja en dos estados de tiempo distintos y mallas con los siguientes refinamientos: 224×400 celdas (1x), 112×200 celdas (2x), 56×100 celdas (4x) y 28×50 celdas (8x). Aquí puede notarse que, para los distintos refinamientos de malla, la forma de la burbuja se conserva. Sin embargo, la interfase para las mallas 4x y 8x son altamente difusivas. Por otro lado, la malla 1x produce una interfase más detallada que la malla 2x, pero los tiempos de simulación se incrementan significativamente. Es por esto que, para los análisis subsiguientes, se adoptará la malla 2x, la cual provee un buen balance entre precisión y costos computacionales.

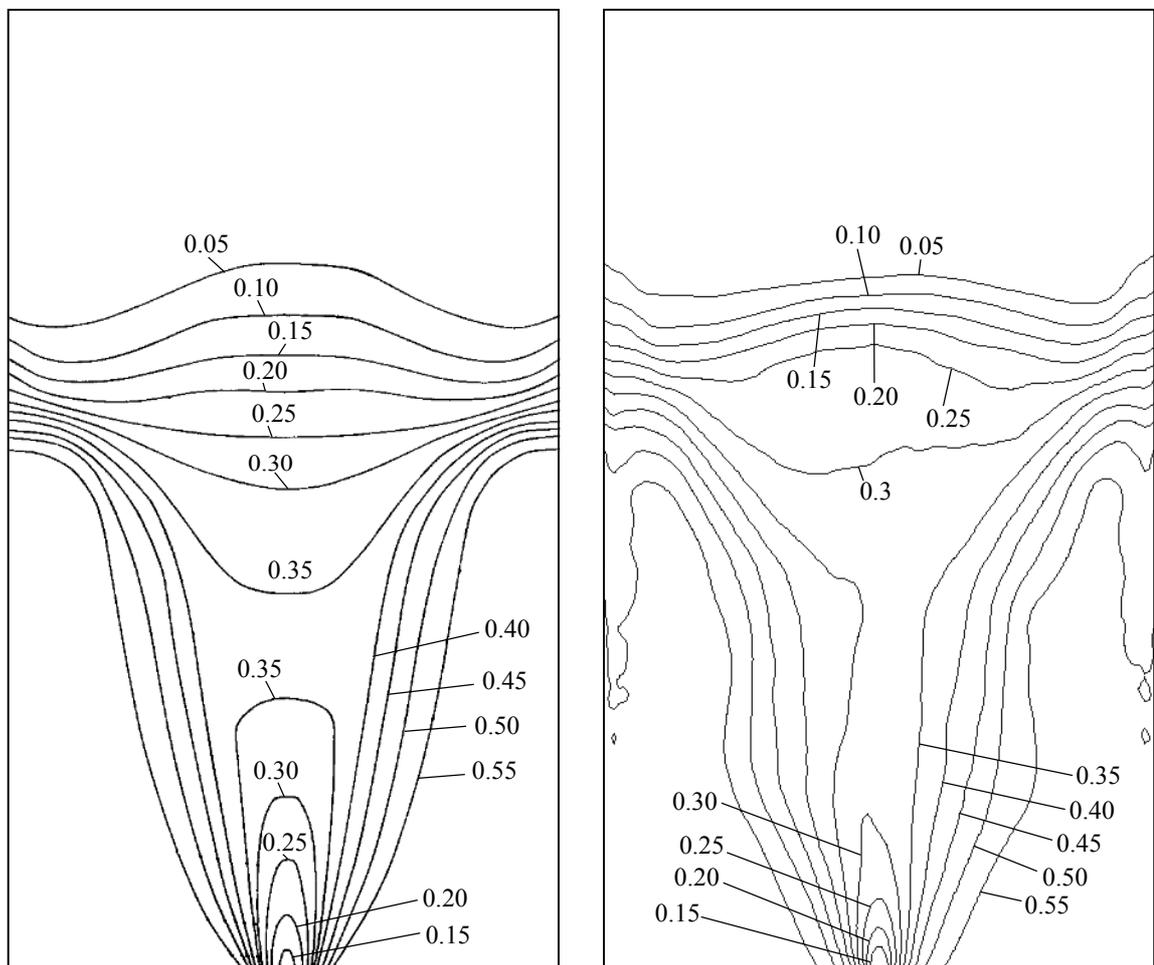


Figura 7.8: Líneas de contorno de fracción de volumen promedio: Resultados experimentales de Kuipers *et al.* (izquierda) y resultados de la simulación (derecha)

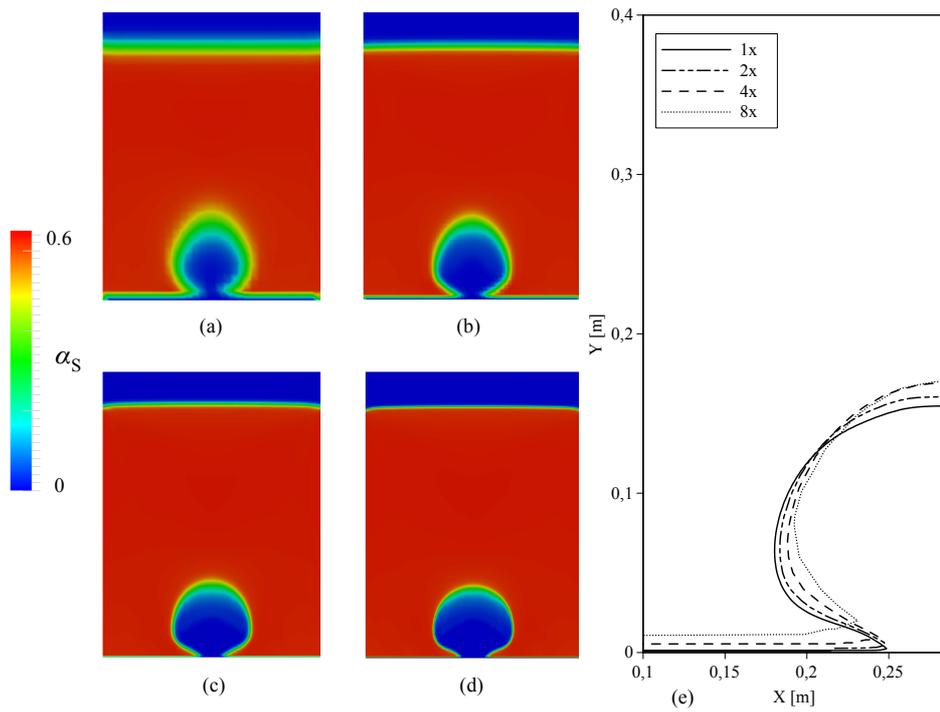


Figura 7.9: Crecimiento de una burbuja para diferentes tamaños de malla en $t = 0,1s$. (a) 8x, (b) 4x, (c) 2x, (d) 1x y (e) líneas de contorno para $\alpha_s = 0,2$

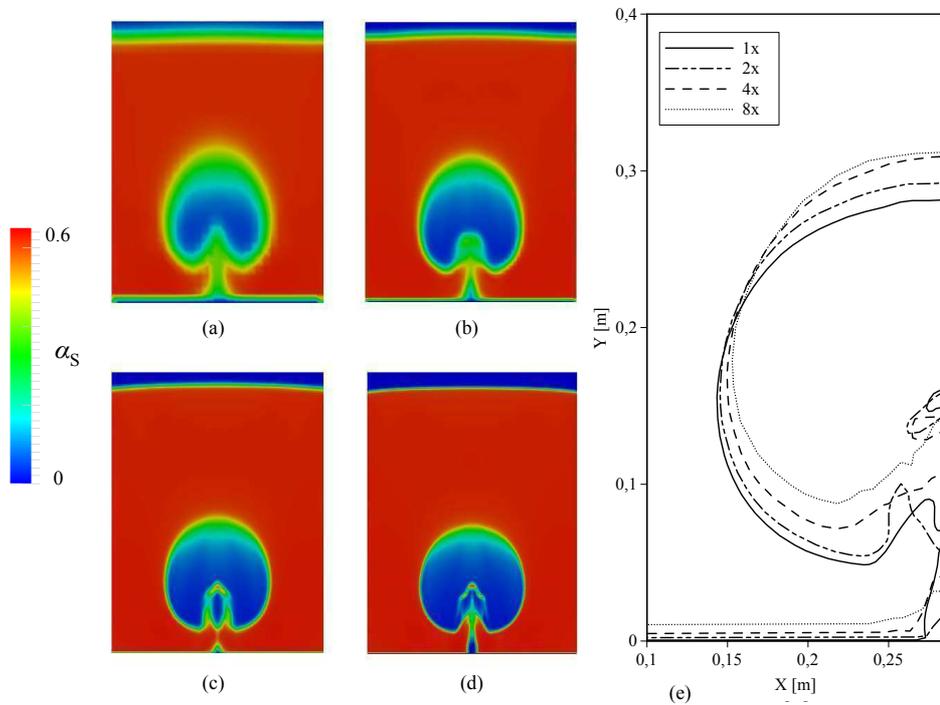


Figura 7.10: Crecimiento de una burbuja para diferentes tamaños de malla en $t = 0,2s$. (a) 8x, (b) 4x, (c) 2x, (d) 1x y (e) líneas de contorno para $\alpha_s = 0,2$

7.2.1. Modelos Cinético-Colisionales (KTGF)

Las Figs. 7.11 muestran los resultados para distintos modelos de viscosidades μ_s^{KTGF} y conductividades granulares κ_s (sin utilizar modelos friccionales) que se detallan en el Apéndice A: El modelo de Syamlal, el modelo de Gidaspow y el modelo de Hrenya-Sinclair.

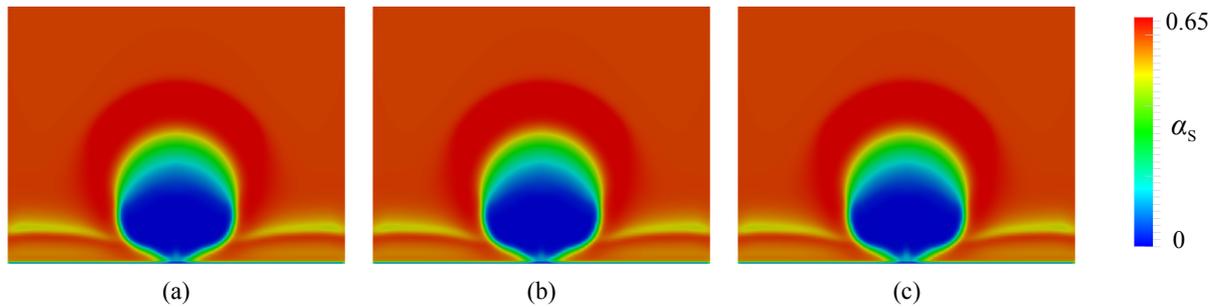


Figura 7.11: Tiempo de desprendimiento de una burbuja para diferentes modelos KTGF Modelo de (a) Syamlal, (b) Gidaspow y (c) Hrenya-Sinclair

Los resultados muestran que la forma de la burbuja no es sensible al modelo KTGF adoptado. Esto es esperable dado que la forma está determinada por las tensiones de la fase granular alrededor de la burbuja y esta se encuentra en concentraciones cercanas al empaquetamiento, para las cuales predominan los efectos friccionales. Esto está de acuerdo con las observaciones de Patil *et al.* [38] y Passalacqua y Marmo [37], quienes indican que la compactación alrededor de la burbuja no es regida por la interacción entre partículas por efectos colisionales.

7.2.2. Modelos Friccionales (FT)

La Fig. 7.12 muestra una comparación cualitativa entre los 4 modelos friccionales presentados junto a fotografías experimentales en distintos estadios de tiempo. Resulta claro que los Modelos I y II fallan en predecir la forma correcta de la burbuja, dando una burbuja mas estirada respecto al experimento. Los Modelos III y IV preservan la forma redonda de la burbuja pero el Modelo III tiene un mayor tiempo de desprendimiento del fondo en comparación al experimento (ver Tabla 7.2). Este mismo patrón es observado para el Modelo IV pero con mayor semejanza en términos de tiempo de desprendimiento y forma de burbuja.

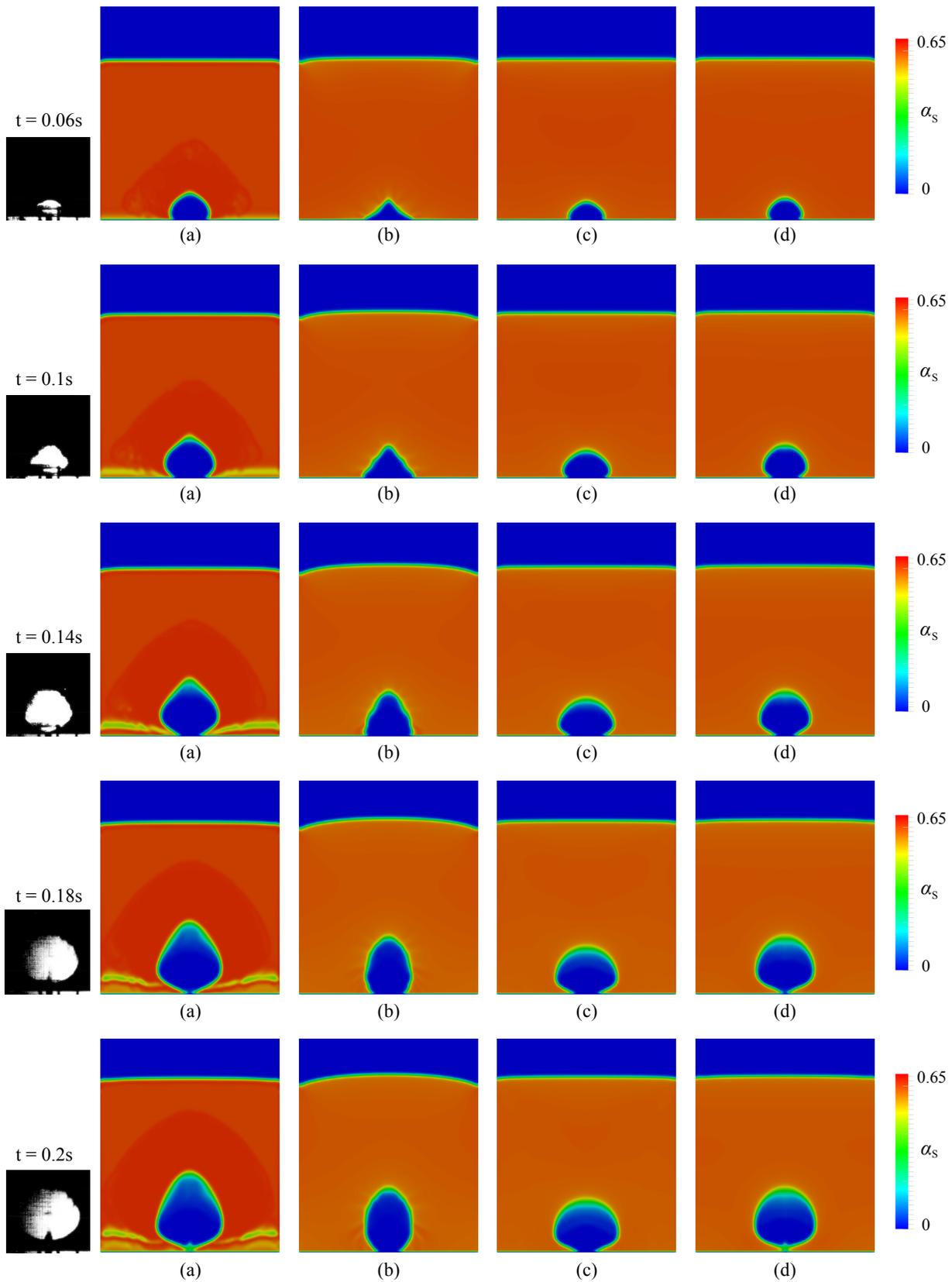


Figura 7.12: Crecimiento de una burbuja en diferentes instantes y bajo diferentes modelos friccionales: (a) Modelo I, (b) Modelo II, (c) Modelo III and (d) Modelo IV

Experimento	Modelo I	Modelo II	Modelo III	Modelo IV
0.170 s	0.180 s	0.233 s	0.235 s	0.179 s

Tabla 7.2: Tiempo de desprendimiento de una burbuja para diferentes modelos friccionales

7.3. Lecho de partículas uniformemente fluidizado

Este problema está basado en el experimento de Laverman *et al.* [118] y se esquematiza en la Fig. 7.13.

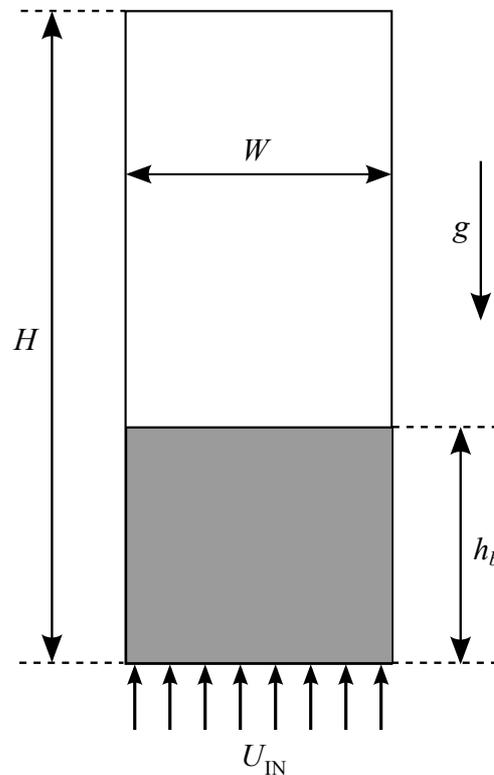


Figura 7.13: Esquema de lecho fluidizado burbujeante

Los parámetros de modelización y numéricos se presentan en la Tabla 7.3. La Fig. 7.14 muestra una secuencia de simulación comenzando de un estado de reposo usando el modelo de Syamlal-O'Brien para la fuerza de arrastre y el modelo de Syamlal para la viscosidad y conductividad granular. Para los efectos friccionales se utiliza el Modelo IV, el cual ha predicho los resultados más precisos para el crecimiento de una burbuja aislada.

Descripcion	Valor
Densidad del gas	1,2 kg/m ³
Viscosidad del gas	2,2 × 10 ⁻⁵ Pa s
Densidad del sólido	2500 kg/m ³
Diámetro de partículas	500 μm
Coefficiente de restitución	0,95
Ancho (W)	0,3 m
Alto (H)	0,7 m
Altura del lecho inicial (h_b)	0,3 m
Empaquetamiento inicial	0,6
Paso de tiempo	1,0 × 10 ⁻⁴ s
Tiempo de discretización	2do orden implícito
Esquema de términos convectivos	Diferencias centradas
Número de iteraciones PISO	5
Número de iteraciones externas	10
Modelo KTGF	Syamlal
Modelo friccional	Modelo IV
Velocidad de entrada (U_{IN})	2,5 U_f
Velocidad mínima de fluidización (U_f)	0,18 m/s
Presión exterior	0 Pa

Tabla 7.3: Parámetros numéricos correspondientes al experimento de Laverman *et al.*

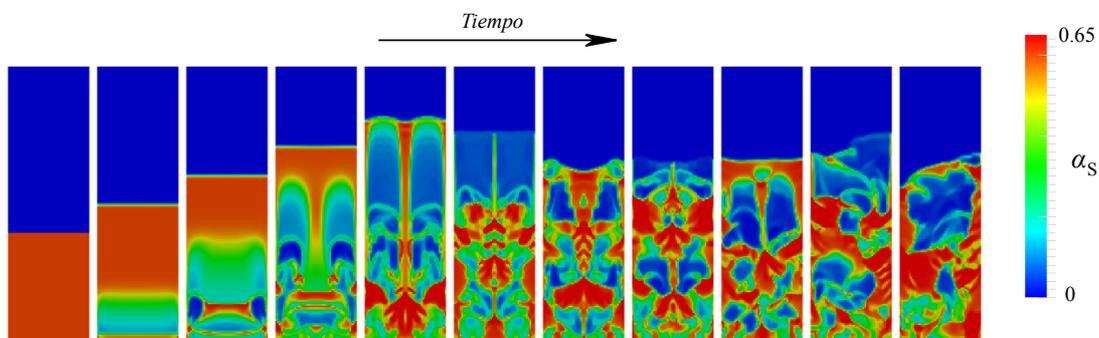


Figura 7.14: Secuencia de fluidización

La Fig. 7.15 muestra los resultados de un estudio de convergencia en malla para la fracción de sólidos promedio y velocidad vertical a 0,3m desde la base. Del perfil de fracción de sólido resulta claro que la malla de 8x no puede capturar correctamente el comportamiento cercano a la pared. Por otro lado las mallas 1x y 2x predicen resultados similares y por ende se opta por la malla mas gruesa (2x).

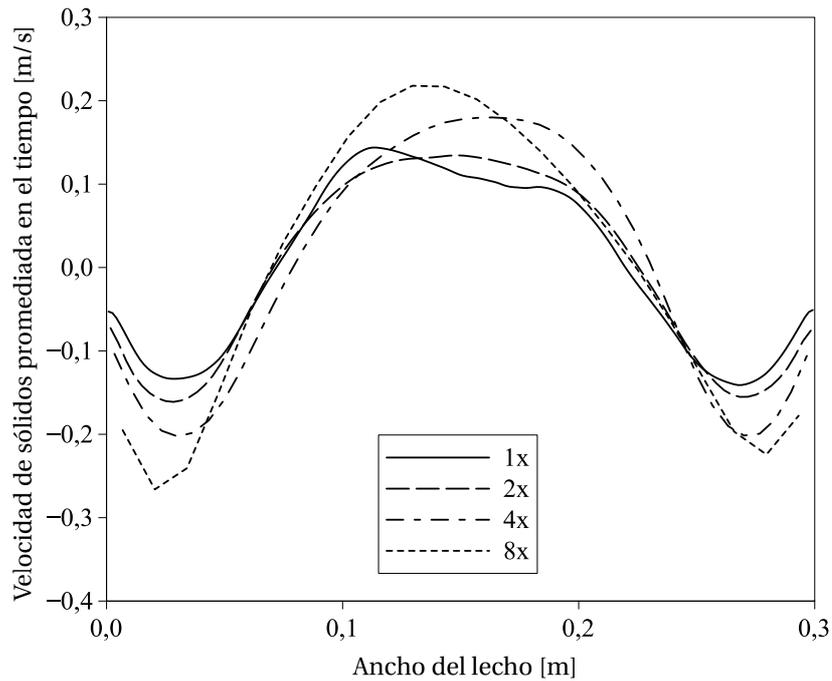


Figura 7.15: Velocidad de sólidos vertical promedio para diferentes refinamientos de malla en 0,3m desde la base

La Fig. 7.16 muestra dos comportamientos claramente distintos de la fase particulada luego de utilizar condiciones de deslizamiento y no-deslizamiento. La condición de deslizamiento produce dos vórtices estirados verticalmente que rotan en sentidos opuestos y abarcan toda la altura del lecho, con altas velocidades en la zona central. Por otro lado, la condición de no-deslizamiento predice dos vórtices en la zona superior y dos vórtices en la zona inferior de baja velocidad. A diferencia del caso de condiciones de deslizamiento, en el caso con no-deslizamiento se observa cierto grado de similitud con lo observado experimentalmente por Laverman *et al.*.

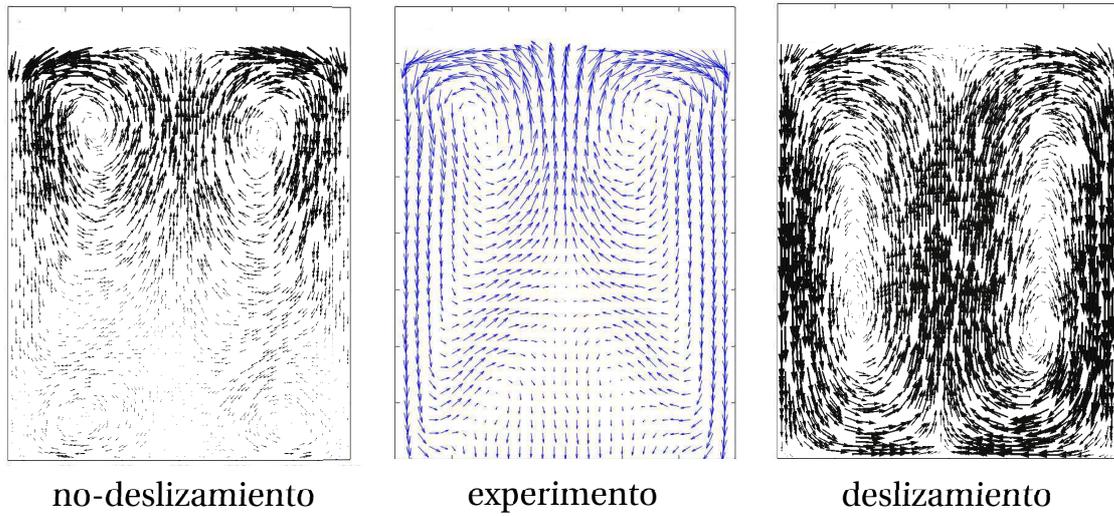


Figura 7.16: Vectores velocidad de sólidos promedio en el tiempo

La Fig. 7.17 muestra los efectos de considerar distintos coeficientes de especularidad mediante la aplicación de la condición de borde de Johnson-Jackson (ver Apéndice D), donde resulta claro que aplicar condiciones de deslizamiento o bajos coeficientes de especularidad produce resultados imprecisos en términos de velocidad media de sólidos.

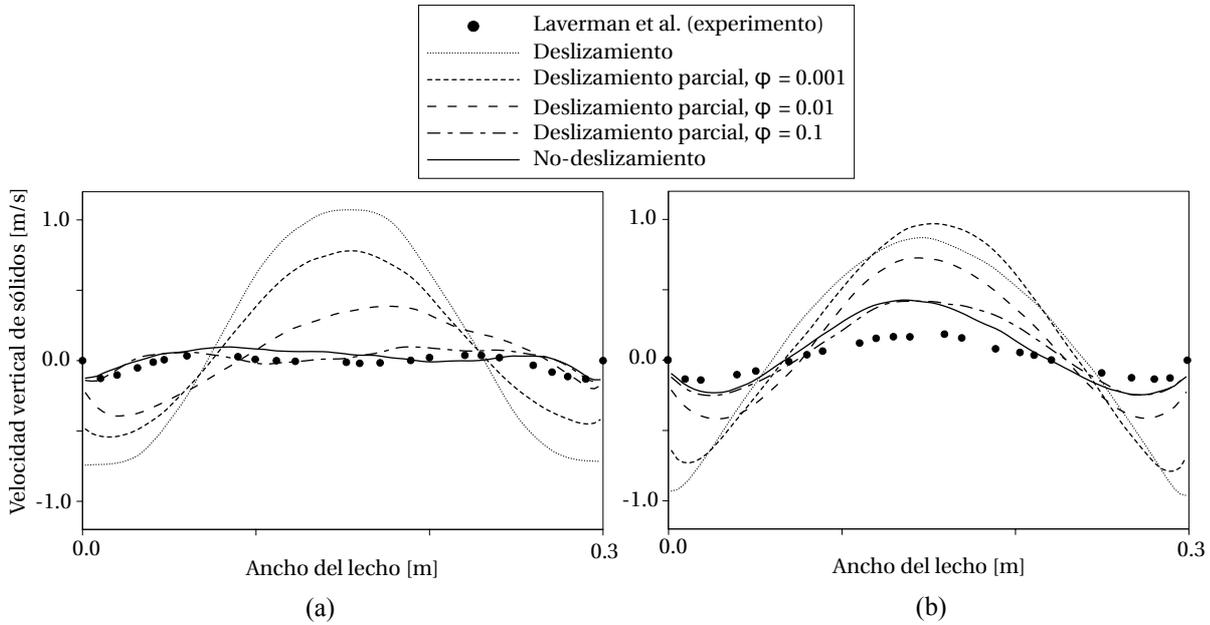


Figura 7.17: Perfil de velocidad de sólidos promedio para diferentes condiciones de pared en (a) 0,1m y (b) 0,3m desde la base

7.3.1. Modelos de arrastre

En primer lugar, se realiza una estimación de la velocidad mínima de fluidización para cada uno de los modelos presentados en la Sección 2.2 siguiendo el balance dado por la Ec. (7.2). Los resultados se presentan en la Tabla 7.4, donde resulta claro que el modelo de Syamlal-O'Brien sobre-predice ampliamente la u^{mf} . Esto inhabilita su uso para estudios más detallados sin, al menos, realizar un ajuste de los parámetros del modelo [119, 120, 40]. Lo mismo debe decirse del modelo de Gibilaro, el cual discrepa de u^{mf} experimental con un error de $\sim 25\%$. El resto de los modelos propuestos concuerdan con los resultados experimentales de forma aceptable (con ligeras discrepancias en el modelo de Di Felice, el cual será ajustado al igual que el modelo de Syamlal-O'Brien). El ajuste del modelo de Syamlal-O'Brien se realiza por medio de una modificación de los coeficientes de modo que $C_1 = 11,183$ y $C_2 = 0,2$. Por otro lado, el modelo de Di Felice ajustado resulta en $P = 4$ and $Q = 0,582$.

Experimento (u_{mf} [m/s])	Gidaspow	Gibilaro	Syamlal-O'Brien	Arastoopour	Di Felice
0,18	0,1902	0,2411	0,6850	0,1901	0,2137

Tabla 7.4: Predicciones de velocidad mínima de fluidización

La Fig. 7.18 muestra perfiles de velocidad de sólidos promedio y fracciones de volumen en 0,3m y 0,1m de la base. La Fig. 7.19 muestra perfiles verticales de fracción sólida y presión para los distintos modelos de arrastre estudiados. Los resultados para el perfil a 0,1m de la base indica que algunos de los modelos tienden a sobre-estimar las velocidades máximas de sólidos (*i.e.* los modelos de Gidaspow y Arastoopour), mientras otros, como el modelo de Di Felice, predice correctamente los resultados experimentales. Esto se ve enfatizado a 0,3m de la base donde el modelo de Di Felice (con y sin ajuste de parámetros) presenta la mayor concordancia con los resultados experimentales.

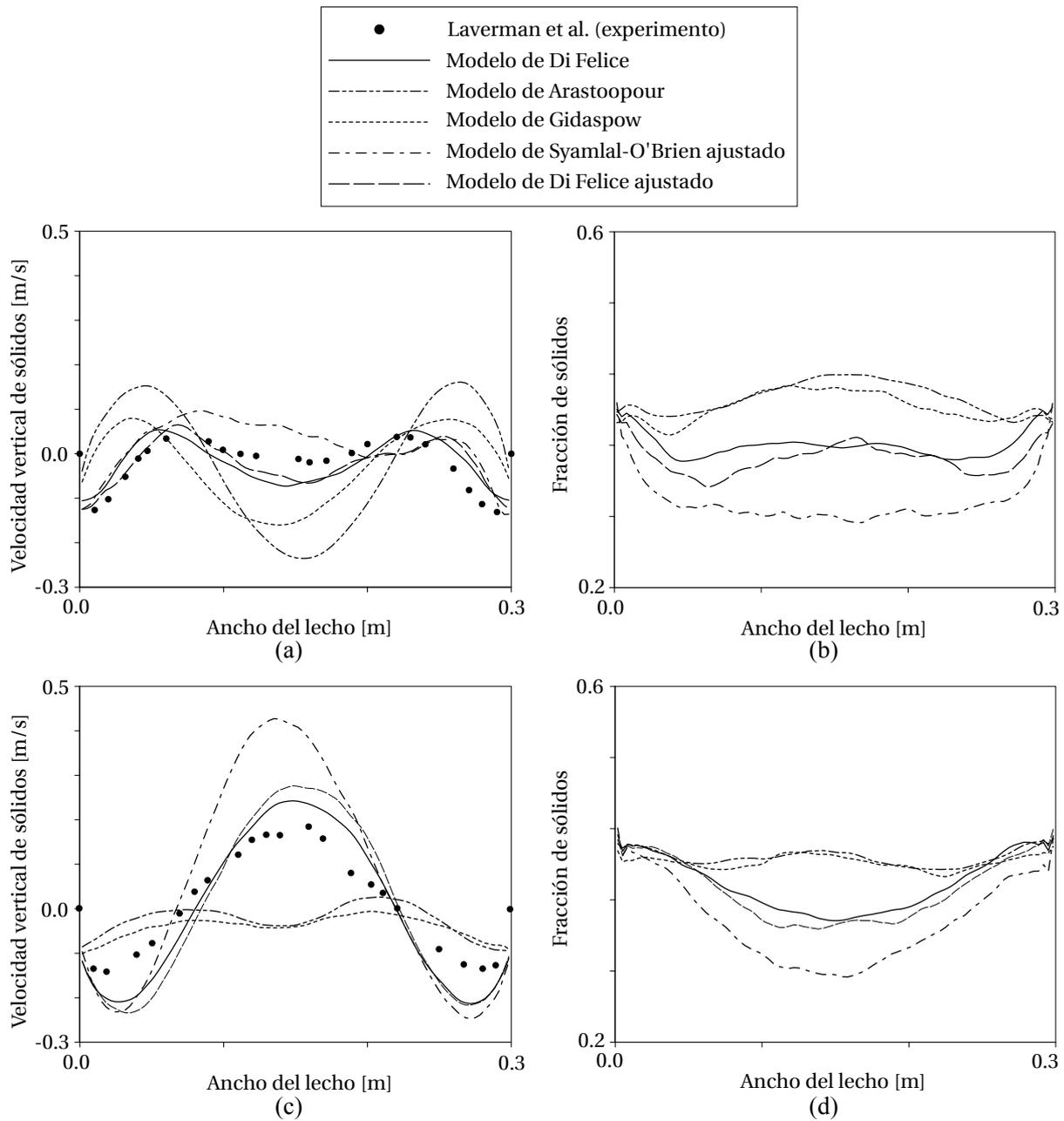


Figura 7.18: Velocidad vertical de sólidos promedio (a) y fracción de sólidos (b) en 0,3m y velocidad vertical de sólidos promedio (c) y fracción de sólidos (d) en 0,1m para distintos modelos de arrastre.

Estas diferencias también se presentan en la predicción de la expansión del lecho, donde el modelo de Syamlal-O'Brien produce la mayor expansión del lecho. Estos resultados se conciben con los observados por Esmaili *et al.* [40] y Vejahati *et al.* [121], quienes muestran que

el modelo de Di Felice produce los resultados más precisos en términos de expansión del lecho, mientras que Syamlal-O'Brien sobre-predice los resultados experimentales. En sus trabajos, muestran que estas diferencias se incrementan a medida que se incrementa la velocidad del gas. Esto puede observarse en la Fig. 7.20 donde se muestran los perfiles de velocidad de sólidos para diferentes velocidades de entrada de gas. Aquí se observa nuevamente que el modelo de Di Felice predice los resultados más cercanos a los experimentales. Sin embargo, para velocidades cercanas a las de mínima fluidización, ninguno de los modelos predice correctamente el perfil de velocidades sólido.

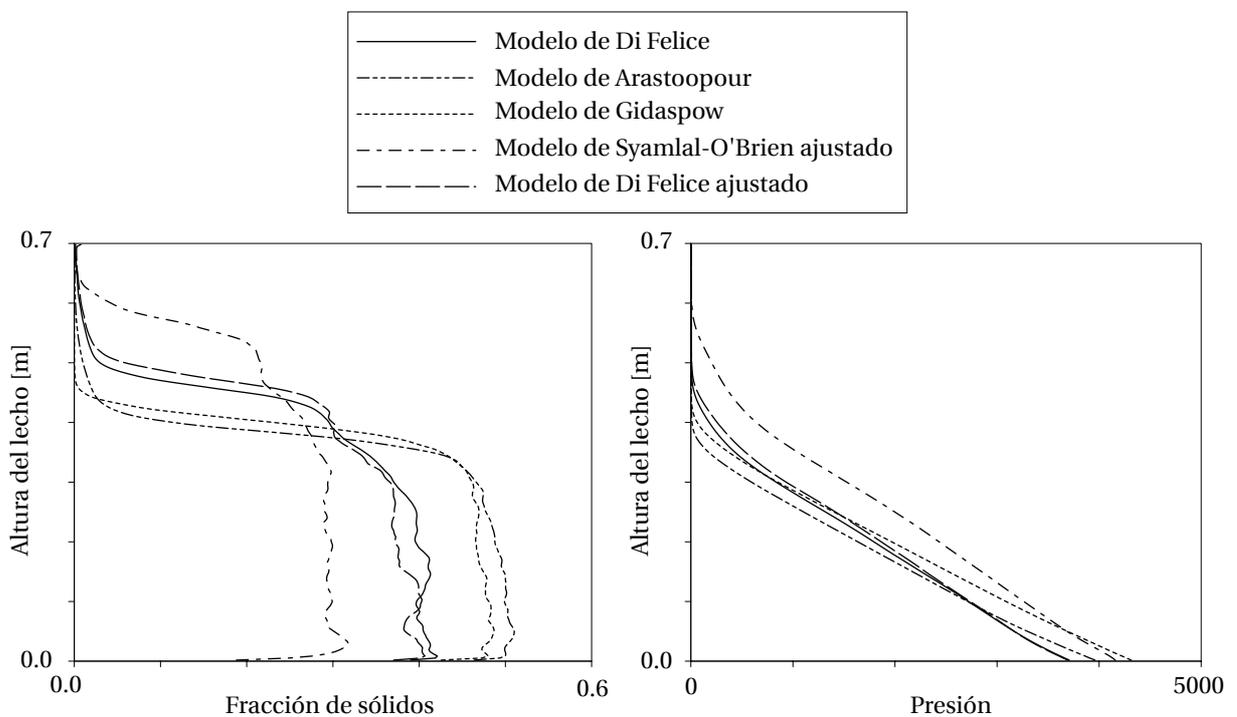


Figura 7.19: Perfiles verticales de fracción sólida (a) y presión (b) promedio para distintos modelos de arrastre.

7.3.2. Condiciones de pared para la fase sólida

La correcta selección de las condiciones de borde sobre la pared para la velocidad de la fase sólida en lechos fluidizados continua siendo, al día de hoy, un tema de discusión por la comunidad científica [122, 123, 124, 125].

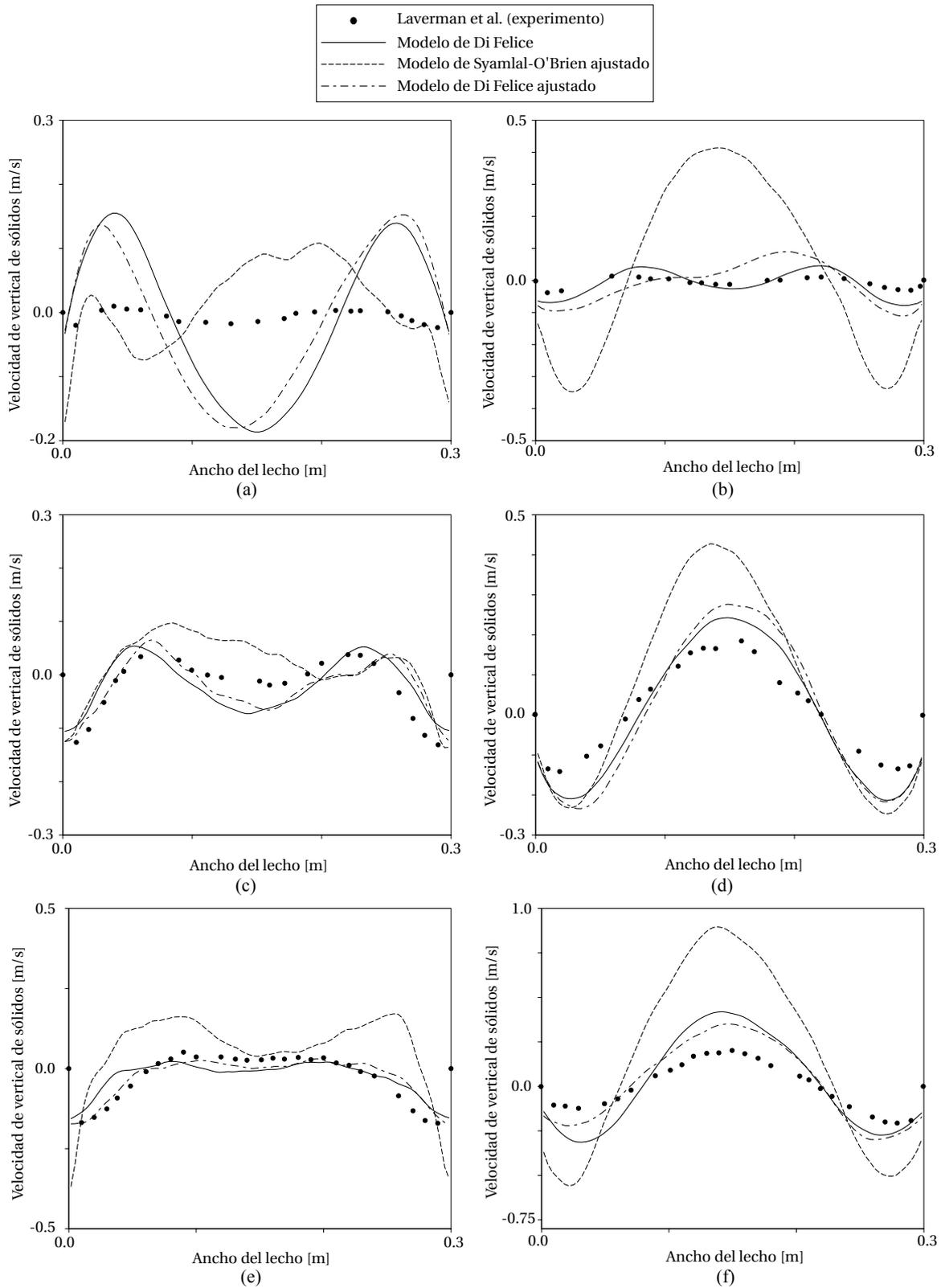


Figura 7.20: Velocidad vertical de sólidos promedio para: (a) $U_{IN} = 1,5 U_f$ en 0,1m, (b) $U_{IN} = 1,5 U_f$ en 0,3m, (c) $U_{IN} = 2,5 U_f$ en 0,1m, (d) $U_{IN} = 2,5 U_f$ en 0,3m, (e) $U_{IN} = 3,5 U_f$ en 0,1m, (f) $U_{IN} = 3,5 U_f$ en 0,3m

Como fue mostrado previamente, la condición de pared de no-deslizamiento y las condiciones de Johnson-Jackson para coeficientes de especularidad altos predicen el comportamiento hidrodinámico del lecho con una aceptable precisión. En particular, las condiciones de Johnson-Jackson introducen el concepto de coeficiente de especularidad que da una medida de la fricción propia de las paredes del lecho. Como se muestra en la literatura [122, 126], el comportamiento hidrodinámico es altamente sensible a este parámetro. Desafortunadamente, este parámetro depende del problema en cuestión y, para su determinación, hay que valerse de estimaciones o experimentos preliminares. Varios autores han propuesto métodos alternativos para modelar dicho parámetro [24, 123, 124]. A continuación se evalúan los resultados para dos de estos modelos: el modelo de Li-Benyahia y el modelo de Schneiderbauer (ver Apéndice D) y los resultados se comparan con los propios para condiciones de no-deslizamiento. La Fig. 7.21 muestra estos resultados en términos de la velocidad vertical de sólidos promedio. Los mismos sugieren que el modelo de Li-Benyahia resulta adecuado para estimar correctamente el coeficiente de especularidad, donde los perfiles concuerdan con los de la condición de no-deslizamiento.

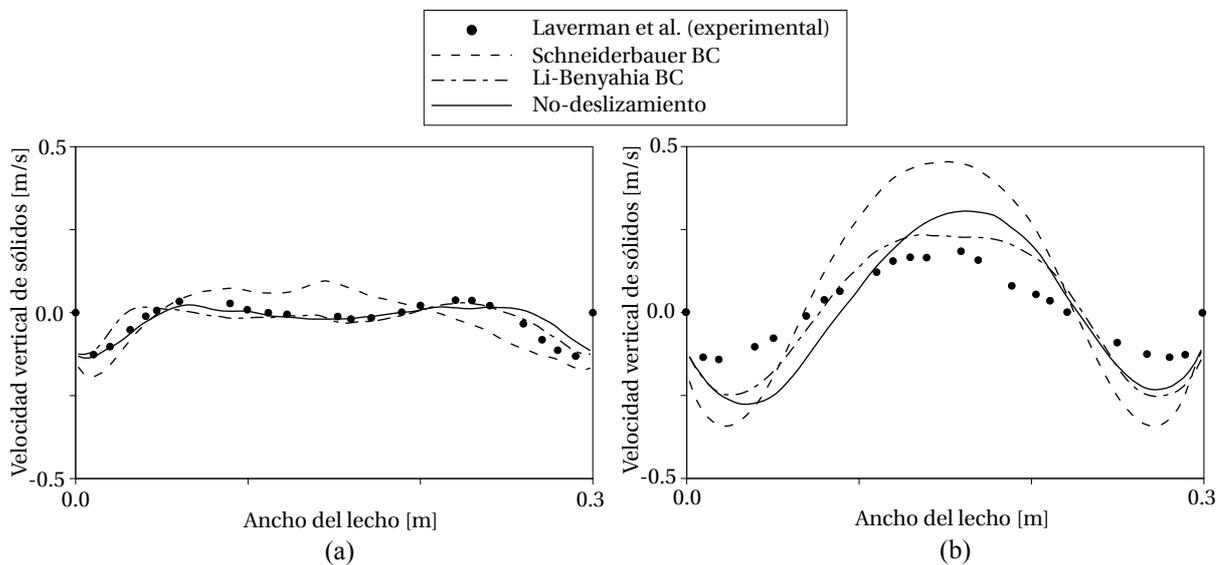


Figura 7.21: Velocidad vertical de sólidos promedio para diferentes condiciones de pared en (a) 0,1m y (b) 0,3m desde la base con el modelo de arrastre de Di Felice ajustado

7.4. Análisis de los resultados

La exploración de los distintos modelos físicos para la simulación de flujos granulares ha mostrado que:

- Para condiciones cercanas al empaquetamiento, como las que se presentan en el problema de crecimiento de una burbuja en las zonas de fase mayormente granular cercanas a la interfase, se ha visto que la adopción de distintos modelos KTGF para la modelización de los parámetros reológicos no tienen una influencia clara sobre la forma de la burbuja.
- Por el contrario, la forma de la burbuja y el tiempo de desprendimiento del jet tienen una marcada sensibilidad a los modelos friccionales adoptados. Esto es esperable dado que gran parte del fenómeno ocurre en zonas de altas concentraciones de partículas o con ausencia de partículas (interior de la burbuja). En este sentido, el Modelo IV presenta los mejores resultados en contraste con los datos experimentales.
- En cuanto a la elección del modelo de arrastre, se ha determinado que, para las condiciones de fluidización estudiadas, el modelo de Di Felice (con o sin ajuste de parámetros) predice los resultados de mayor concordancia con las observaciones experimentales. En este sentido, algunos modelos (en este caso, el modelo de Syamlal-O'Brien) no logran predecir correctamente la velocidad mínima de fluidización, lo que lo invalida para ser adoptado en el presente estudio sin un ajuste de parámetros preliminar.
- Los resultados macroscópicos (perfiles promediados en el tiempo) para lechos uniformemente fluidizados muestran que la adopción de condiciones de borde cercanas a no-deslizamiento son las más adecuadas para representar el fenómeno. En este sentido, se recomienda el uso de modelos contemplativos que no dependan de experimentos adicionales para determinar sus parámetros, como puede ser el modelo de Li-Benyahia.

Para todos los casos estudiados, el modelo computacional de gas y partículas ha tenido un buen desempeño, resultando en una herramienta robusta y eficiente para el estudio de problemas de lechos fluidizados. En este sentido, los comportamientos relativos de los distintos modelos físicos involucrados han podido ser contrastados contra resultados computacionales y

experimentales de la literatura. Esto ha permitido delinear conclusiones que ayuden a formar criterios generales para la selección de los mismos en aplicaciones de escala industrial.

*“In all affairs it’s a healthy thing now
and then to hang a question mark on the
things you have long taken for granted.”*

– Bertrand Russell (1872-1970)

Capítulo 8

Conclusiones

En esta tesis se ha presentado el Modelo de Dos Fluidos (TFM) aplicado a flujos granulares haciendo uso de la Teoría Cinética de Flujo Granular (KTGF) y la Teoría Friccional (FT) para la modelización de su reología. Esta metodología ha sido aplicada en el marco del Método de Volúmenes Finitos (FVM) y de distintos algoritmos de acoplamiento entre fases, sobre la estructura general de la plataforma de código abierto OpenFOAM®. La herramienta computacional se ha desarrollado atendiendo criterios de estabilidad y conservatividad, así como también, garantizando la mayor eficiencia en el uso de recursos computacionales. Por medio de esta, se han podido explorar distintos aspectos del modelado, dejando un detallado análisis teórico del modelo computacional aplicado a flujos granulares en régimen diluido y en fase densa.

En particular, se han estudiado tres de las formulaciones para el término advectivo de las ecuaciones de momento de cada fase mas comúnmente empleadas en los códigos computacionales. Mediante este análisis, se ha puesto de manifiesto que el uso de una formulación conservativa resulta esencial para problemas transitorios con presencia de discontinuidades tipo ondas de choque (los cuales pueden encontrarse en múltiples problemas multifásicos en la realidad). La implementación de esta formulación debe hacerse conforme a un apropiado tratamiento de las ecuaciones ante las condiciones de desaparición de alguna de las fases. Por otro lado, si bien las formulaciones no-conservativas no pueden predecir

correctamente las velocidades ante ondas de choque, la forma llamada fase-intensiva permite un manejo natural de las condiciones de desaparición de fase.

Por otra parte, motivado por la elevada cantidad de iteraciones necesarias para lograr convergencia en el acoplamiento de las distintas variables involucradas, se ha propuesto un estudio exhaustivo de la estabilidad de métodos segregados a una y dos fases. Para ello, se ha realizado un análisis basado en el método de descomposición de Fourier. Este desarrollo representa la formalización del análisis de estabilidad del método PISO, el cual había sido presentado solo conceptualmente por el autor del método y en trabajos posteriores en la materia. Mediante este método, se ha podido detectar que el algoritmo PISO no tiene mecanismos para atenuar errores relacionados a altos números de Reynolds de malla, mientras que para valores bajos, aumentando el acoplamiento presión-velocidad mediante el aumento de iteraciones PISO, se reducen sensiblemente los errores de cada variable. Asimismo, se ha detectado que, en problemas dominados por efectos viscosos, altas relaciones de aspecto de la malla pueden afectar sensiblemente la estabilidad del algoritmo, lo cual puede mitigarse aumentando nuevamente las iteraciones PISO. Para el caso de tener más de una fase, se ha podido cuantificar el efecto positivo de aumentar la implícitud del acoplamiento por arrastre. En efecto, el Algoritmo de Eliminación Parcial (PEA) resulta óptimo frente a otras metodologías para amortiguar los errores sin afectar los costos computacionales involucrados. En cualquier caso, las conclusiones desarrolladas mediante el análisis de Fourier han podido ser constatadas en problemas prácticos, lo cual vuelve al método una herramienta de extrema utilidad para predecir la estabilidad de esquemas segregados ante distintas condiciones de flujo.

Finalmente, el modelo computacional desarrollado para flujos de gas y partículas ha sido puesto a prueba en problemas de fluidización burbujeante. Además, se ha estudiado el desempeño de los distintos modelos físicos de conocida sensibilidad sobre los patrones fluidodinámicos de dichos problemas. En estos aspectos, se ha detectado que, a diferencia de los distintos modelos de KTGF, los modelos de FT para la viscosidad tienen un impacto directo sobre la formación de burbujas de gas en los lechos fluidizados. Sumado a esto, se ha detectado que las condiciones de borde de no-deslizamiento para la fase de partículas resultan más apropiadas que condiciones cercanas a deslizamiento para múltiples regímenes de fluidización. En todos los casos prácticos estudiados, la herramienta computacional ha tenido un desempeño satisfactorio en términos de estabilidad y precisión de la solución.

Respecto a los objetivos planteados, se ha logrado sentar bases fundamentales para el análisis de flujos granulares por vías computacionales, se ha provisto de metodologías para el estudio de estabilidad de los algoritmos involucrados, se han puesto en evidencia formulaciones óptimas para la simulación ante distintas condiciones de flujo y se ha provisto de criterios para la selección de diversos parámetros reológicos y de transferencia. Teniendo todo esto en cuenta, se espera que el lector pueda abordar problemas de flujos granulares haciendo uso de las herramientas y criterios numéricos desarrollados.

Apéndice A: Modelos de la Teoría Cinética de Flujo Granular

Parámetro	Modelo
Presión de sólido	Syamlal $p_s^{KTGF} = 2\rho_s\alpha_s^2g_0(1 - e_p)\theta$
	Lun $p_s^{KTGF} = \rho_s\alpha_s\theta_s + 2\rho_s\alpha_s^2g_0(1 - e_p)\theta$
Disipación granular	Gidaspow $\gamma_s = 3\rho_s\alpha_s^2g_0(1 - e_p^2)\theta \left(\frac{4}{d_p}\sqrt{\frac{\theta}{\pi}} - \nabla \cdot \mathbf{u}_s \right)$
Viscosidad KTGF	Gidaspow $\mu_s^{KTGF} = \frac{10\rho_s d_p \sqrt{\theta\pi}}{96g_0(1 + e_p)} \left[1 + \frac{4}{5}(1 - e_p)\alpha_s g_0 \right]^2$
	Syamlal $\mu_s^{KTGF} = \frac{\alpha_s \rho_s d_p \sqrt{\theta\pi}}{6(3 - e_p)} \left[1 + \frac{2}{5}(1 - e_p)(3e_p - 1)\alpha_s g_0 \right]$
	Hrenya-Sinclair $\mu_s^{KTGF} = \frac{\alpha_s \rho_s d_p \sqrt{\theta\pi}}{6(3 - e_p)} \left[1 + \frac{(3e_p - 1)}{2l} + \frac{2}{5}(1 - e_p)(3e_p - 1)\alpha_s g_0 + \frac{5}{4} \frac{1}{(1 - e_p)\alpha_s g_0 l} \right]$

Parámetro	Modelo
Conductividad granular	Gidaspow $\kappa_s = \rho_s d_p \sqrt{\theta} \left[\frac{2\alpha_s^2 g_0 (1 + e_p)}{\sqrt{\pi}} + \frac{9}{16} \sqrt{\pi} \alpha_s^2 g_0 (1 + e_p) + \frac{15}{16} \sqrt{\pi} \alpha_s + \frac{25 \sqrt{\pi} g_0}{64(1 + e_p)} \right]$
	Syamlal $\kappa_s = \rho_s d_p \sqrt{\theta} \left[\frac{2\alpha_s^2 g_0 (1 + e_p)}{\sqrt{\pi}} + \frac{9 \sqrt{\pi} \alpha_s^2 g_0 (1 + e_p) (2e_p - 1)}{2(49 - 33e_p)} + \frac{15 \sqrt{\pi} \alpha_s}{2(49 - 33e_p)} \right]$
	Hrenya-Sinclair $\kappa_s = \rho_s d_p \sqrt{\theta} \left[\frac{2\alpha_s^2 g_0 (1 + e_p)}{\sqrt{\pi}} + \frac{9 \sqrt{\pi} \alpha_s^2 g_0 (1 + e_p) (2e_p - 1)}{2(49 - 33e_p)} + \frac{15 \sqrt{\pi} \alpha_s (0,5e_p^2 + 0,25e_p - 0,75 + l)}{(49 - 33e_p)l} + \frac{25 \sqrt{\pi}}{4(49 - 33e_p)(1 + e_p)l g_0} \right]$
Distribución radial	Sinclair-Jackson $g_0 = \frac{1}{1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}}\right)^{1/3}}$
	Gidaspow $g_0 = \frac{0,6}{1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}}\right)^{1/3}}$
	Lun-Savage $g_0 = \left(1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}}\right)^{-2,5\alpha_{s,max}}$
	Carnahan-Starling $g_0 = \frac{1}{1 - \alpha_s} + \frac{3\alpha_s}{2(1 - \alpha_s)^2} + \frac{\alpha_s^2}{2(1 - \alpha_s)^3}$

Parámetro	Modelo
Producción de energía granular por intercambio entre fases	Gidaspow-Koch $J_{sg} = \frac{d_p \rho_s}{4\sqrt{\pi\theta}} \left(\frac{18\mu_g}{d_p^2 \rho_s} \right)^2 \mathbf{u}_s - \mathbf{u}_g ^2 - 3K_{sg}\theta$

Apéndice B: Inestabilidades tipo “checkerboard” y la corrección de Rhie-Chow

La forma más intuitiva de resolver la ecuación de presión (Ec. (3.17)) puede llevar a la aparición de inestabilidades de altas frecuencias, conocidas como inestabilidades tipo “checkerboard” [127, 128]. Para poder entender el fenómeno e introducir métodos para corregirlos, se presentan paralelamente la formulación en variables absolutas (\mathbf{p} , \mathbf{p}^* , \mathbf{p}^{**} , ...) y en correcciones (\mathbf{p}' , \mathbf{p}'' , ...). Esta última es la forma usual de expresar los algoritmos segregados para poder visualizar explícitamente los términos correctores. Por cuestiones de simplicidad, los desarrollos subsiguientes son para un problema de FVM unidimensional, donde el campo de velocidades es simplemente un escalar. Sin embargo, las conclusiones pueden ser extendidas a dos y tres dimensiones.

La técnica que se describe a continuación para mitigar las oscilaciones de altas frecuencias de presiones es conocida como corrección de Rhie-Chow [127].

La ecuación de presión en métodos segregados surge de plantear:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \rightarrow \sum_{nb} \mathbf{u}_{nb}^{**} \cdot \mathbf{S}_{nb} = 0 \quad (1.1)$$

Recordando la formulación matricial utilizada en el Capítulo 3, las ecuaciones de conservación de masa y momento lineal en forma discreta pueden escribirse como:

$$\mathbf{D} \mathbf{u} = 0 \quad (1.2)$$

$$(\mathbf{A}_P + \mathbf{B} + \mathbf{H}) \mathbf{u}^{n+1} = -\mathbf{G}^B \mathbf{p} + \mathbf{B} \mathbf{u}^n \quad (1.3)$$

Aquí, \mathbf{A}_P y \mathbf{H} son las matrices de coeficientes diagonales y no-diagonales respectivamente, correspondientes a la discretización de los términos convectivos y difusivos : $\mathbf{A}_P = \text{diag}\{\mathbf{A}_F\}$ y $\mathbf{H} = \mathbf{A}_F - \text{diag}\{\mathbf{A}_F\}$, donde \mathbf{A}_F es la matriz completa de coeficientes. Por otro lado, \mathbf{B} es la matriz de coeficientes correspondiente al término transitorio, asumiendo una discretización de primer orden, y \mathbf{D} y \mathbf{G} son las matrices de coeficientes correspondientes a los operadores discretos de divergencia y gradiente respectivamente. Puede notarse que la matriz \mathbf{D} opera sobre valores centrados en celda. De hecho, la matriz \mathbf{D} puede ser descompuesta en 2 operaciones: una interpolación a las caras y una posterior suma por celda de estos valores interpolados:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_f &= \mathbf{I}_f \mathbf{u} \\ \sum_{nb} \mathbf{u}_{nb} \cdot \mathbf{S}_{nb} &\rightarrow \mathbf{D}_f \mathbf{u}_f = \mathbf{D}_f \mathbf{I}_f \mathbf{u} = \mathbf{D} \mathbf{u} \end{aligned} \quad (1.4)$$

donde el subíndice f indica valores interpolados a las caras, \mathbf{I}_f es la matriz de interpolación a las caras y \mathbf{D}_f es la matriz suma que además contiene los valores de áreas de caras.

En la etapa de predictor de momento, la predicción de velocidad \mathbf{u}^* es obtenida al considerar valores almacenados del campo de presiones:

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B} + \mathbf{H}) \mathbf{u}^* &= -\mathbf{G}^B \mathbf{p}^0 + \mathbf{B} \mathbf{u}^0 \\ \mathbf{p}^* &= \mathbf{p}^0 \end{aligned} \quad (1.5)$$

La ecuación de presión resulta del método de separación del sistema lineal de la Ec. (1.5):

$$(\mathbf{A}_P + \mathbf{B}) \mathbf{u}^{**} = -\mathbf{H} \mathbf{u}^* - \mathbf{G}^C \mathbf{p}^{**} + \mathbf{B} \mathbf{u}^0 \quad (1.6)$$

Entonces:

$$\mathbf{u}^{**} = -(\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{H} \mathbf{u}^* - (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^{**} + (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B} \mathbf{u}^0 \quad (1.7)$$

Para obtener un campo de presiones tal que se verifique la condición de divergencia nula, la Ec. (1.2) se aplica sobre la Ec. (1.7):

$$\mathbf{D} \mathbf{u}^{**} = -\mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{H} \mathbf{u}^* - \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^{**} + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B} \mathbf{u}^0 = 0 \quad (1.8)$$

Finalmente, la ecuación de la presión es obtenida al redistribuir términos de la Ec. (1.8):

$$\mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^{**} = -\mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{H} \mathbf{u}^* + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B} \mathbf{u}^0 \quad (1.9)$$

Luego de computar el campo de presión, la velocidad es actualizada por medio de la Ec. (1.7) que, junto con la Ec. (1.9), forma el primer paso corrector.

El lector puede notar que la matriz gradiente \mathbf{G}^B cambió a \mathbf{G}^C para derivar la ecuación de presión (como fue introducida en la Ec. (1.6)). A diferencia de \mathbf{G}^B que usa valores en centro de celda de celdas vecinas para el cálculo del gradiente, \mathbf{G}^C utiliza valores centrados en caras. Esta es la esencia del método de corrección para evitar las inestabilidades “checkerboard” que están relacionadas con un desacoplamiento espacial entre los campos de presión y velocidad [88, 5].

Usualmente, la corrección de Rhie-Chow es presentada a partir de formulaciones en correcciones. Sin embargo, muchos códigos computacionales utilizan formulaciones absolutas y la aparición explícita de dicha corrección resulta encubierta. Este Apéndice tiene el propósito de denotar dicha corrección para formulaciones absolutas y su equivalencia con la formulación tradicional de la corrección de Rhie-Chow.

La ecuación de presión basada en correcciones de presión puede derivarse de la Ec. (1.9) agregando y sustrayendo un término relacionado con un gradiente centrado en celda de \mathbf{p}^0 , de modo que:

$$\begin{aligned} \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^{**} = & -\mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{H} \mathbf{u}^* + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^B \mathbf{p}^0 \\ & + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B} \mathbf{u}^0 - \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^B \mathbf{p}^0 \end{aligned} \quad (1.10)$$

Ahora, reemplazando \mathbf{p}^0 por \mathbf{p}^* (siendo que son equivalentes) en el segundo término del lado derecho y reemplazando el tercer y cuarto término por medio de la Ec. (1.5):

$$\begin{aligned} \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^{**} = & -\mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{H} \mathbf{u}^* \\ & + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B} + \mathbf{H}) \mathbf{u}^* + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^B \mathbf{p}^* \end{aligned} \quad (1.11)$$

Esta expresión puede ser simplificada como:

$$\mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^{**} = \mathbf{D} \mathbf{u}^* + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^B \mathbf{p}^* \quad (1.12)$$

La ecuación de presión para la corrección de presión puede ser obtenida al sustraer un término relacionado con un gradiente centrado en caras de \mathbf{p}^* en ambos lados de la Ec. (1.12):

$$\begin{aligned} \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^{**} - \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^* = \\ \mathbf{D} \mathbf{u}^* + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^B \mathbf{p}^* - \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}^* \end{aligned} \quad (1.13)$$

Finalmente, esta expresión puede llevarse a:

$$\mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} \mathbf{G}^C \mathbf{p}' = \mathbf{D} \mathbf{u}^* + \mathbf{D} (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{G}^B - \mathbf{G}^C) \mathbf{p}^* = \mathbf{D}_f [\mathbf{I}_f \mathbf{u}^* - \underbrace{\mathbf{I}_f (\mathbf{A}_P + \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{G}^C - \mathbf{G}^B) \mathbf{p}^*}_{\text{corrección de Rhie-Chow}}] \quad (1.14)$$

El lector puede notar la similitud del último término de la Ec. (1.14) con la forma semi-discreta de la corrección de Rhie-Chow usualmente presente en la literatura [5, 129]:

$$\mathbf{u}_{nb}^* = \mathbf{u}_{nb}^{MP} - \left(\frac{1}{b_P + a_P} \right)_{nb} \left[\left(\hat{\nabla} p \right)_{nb}^C - \left(\hat{\nabla} p \right)_{nb}^B \right] \quad (1.15)$$

donde resulta claro la necesidad de corregir el campo de velocidades provenientes del paso predictor de momento para computar la corrección de presión en la ecuación de presión. Si esta corrección no se considera, las formulaciones de los algoritmos de acoplamiento segregados presión-velocidad pueden presentar errores de altas frecuencias.

En este proceso se ha puesto en evidencia que la corrección de Rhie-Chow equivale a manipular la forma de calcular los gradientes de presión en la formulación absoluta.

Apéndice C: Amplificación del error en un problema con condiciones de borde

Basado en el análisis teórico preliminar, se propone estudiar un ejemplo práctico para verificar los resultados obtenidos mediante el análisis de Fourier. Aquí se plantea un flujo uniforme dado por $u^0 = 0,25$ m/s y $v^0 = 0$ m/s en un dominio cuadrado de lado $L = 0,1$ m. Todos los casos son resueltos para $Re = 10^{-3}$ and $Co = 0,5$.

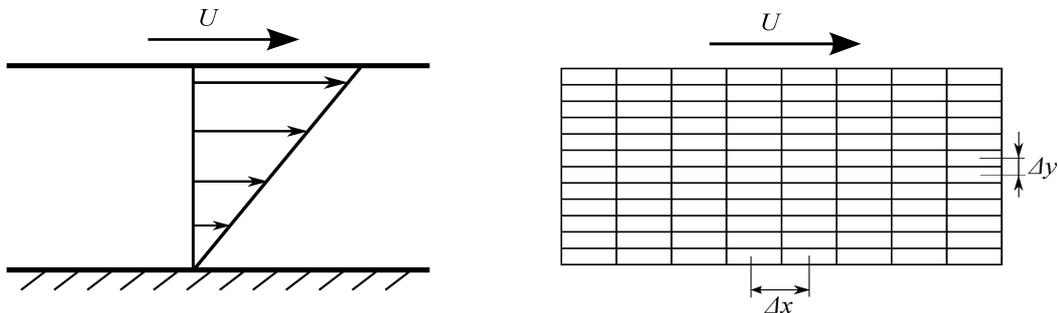


Figura 9.1: Esquema de flujo Couette

Se proponen dos tipos de problema. El primero consiste en un dominio con condiciones de borde cíclicas en todas las paredes, respetando así las hipótesis del análisis de Fourier. El segundo toma en consideración los efectos de tener condiciones no-cíclicas en al menos 2 de los 4 bordes obteniendo así un flujo de Couette estándar. Esto se realiza imponiendo una velocidad nula en el borde inferior y una velocidad constante en el borde superior $U = (0,5, 0)$ m/s (ver Fig. 9.1). En el primer caso se espera verificar los resultados del análisis de Fourier, mientras que el segundo busca tener una noción de que tanto se alejan los resultados teóricos respecto a un problema más cercano a la realidad como lo es un flujo Couette.

Caso	θ_x	θ_y	AR	n_P	β (teórico)
1	$\pi/4$	$\pi/4$	1	2	< 1
2	$\pi/2$	$\pi/2$	5	2	< 1
3	$\pi/2$	0	5	2	> 1
4	$\pi/2$	0	5	10	< 1

Tabla 9.1: Casos a analizar

Para cada caso considerado, la presión media es nula en el dominio con una perturbación inicial dada por una función armónica bidimensional. El objetivo es determinar la evolución de esta perturbación sobre una iteración PISO a través de diferentes condiciones como se describe en la Tabla 9.1.

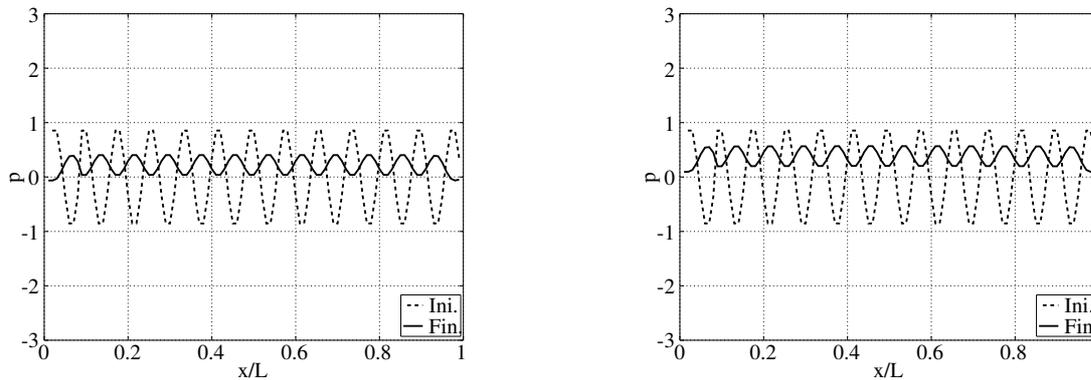


Figura 9.2: Amplificación de errores de presión en casos con condiciones de borde cíclicas (izquierda) y condiciones de borde de pared (derecha) para el Caso 1, antes (línea de trazo) y después (línea continua) de una iteración

La Fig. 9.2 muestra el campo de presiones sobre una línea central horizontal para el Caso 1, donde la relación entre amplitudes del error antes y después de una iteración se utiliza como medida de la amplificación del error. Para un problema con $AR = 1$, el algoritmo PISO amortigua el pulso de presión con un factor de amplificación similar al obtenido en el cuadro izquierdo de la Fig. 9.2 ($\beta \sim 0,25$). Este comportamiento es similar para condiciones de borde no-cíclicas (flujo Couette), con un pequeño desfase respecto a la media.

Ahora, se analizarán problemas que transiten entre estados estables e inestables basándose en los resultados del análisis de Fourier. Esto se logra mediante un refinamiento de malla en la dirección y de modo que $AR = 5$. Para $\theta_x = \frac{\pi}{2}$, dos frecuencias y (correspondientes al Caso 2 y Caso 3) son consideradas: $\theta_y = \frac{\pi}{2}$ (estable) y $\theta_y = 0$ (inestable). Las Figs. 9.3 y 9.4 muestran los resultados para estos casos, con una clara amplificación de la perturbación para el Caso 3. El comportamiento del problema con condiciones no-cíclicas mantiene el mismo comportamiento que el caso con condiciones cíclicas en todos sus bordes (nuevamente con un ligero desfase del valor medio como en el Caso 1).

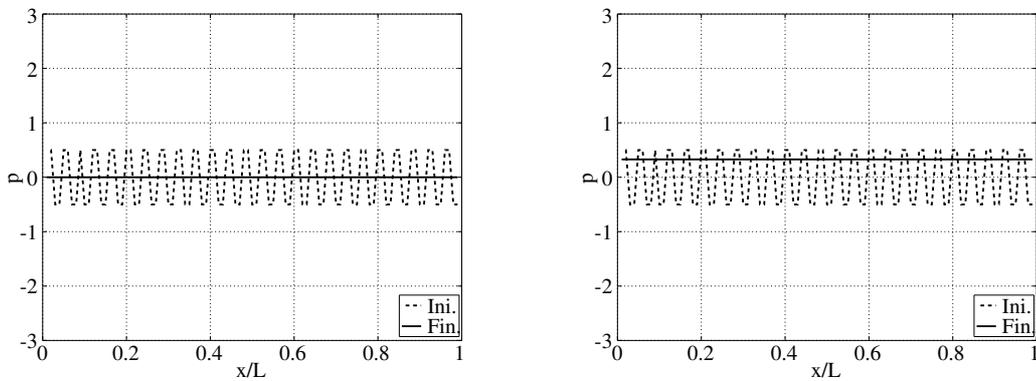


Figura 9.3: Amplificación de errores de presión en casos con condiciones de borde cíclicas (izquierda) y condiciones de borde de pared (derecha) para el Caso 2, antes (línea de trazo) y después (línea continua) de una iteración

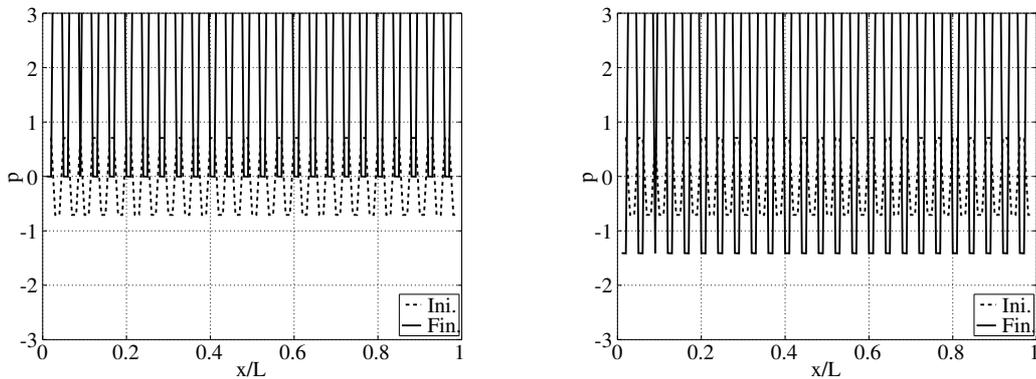


Figura 9.4: Amplificación de errores de presión en casos con condiciones de borde cíclicas (izquierda) y condiciones de borde de pared (derecha) para el Caso 3, antes (línea de trazo) y después (línea continua) de una iteración

Finalmente, un mayor numero de correcciones PISO se aplican sobre el Caso 3 con el propósito de re-estabilizar la perturbación (basado en los resultados del análisis de Fourier). Para estas frecuencias (ver Fig. 9.5) , el algoritmo se estabiliza con 6 pasos correctores para el caso con condiciones cíclicas y no-cíclicas.

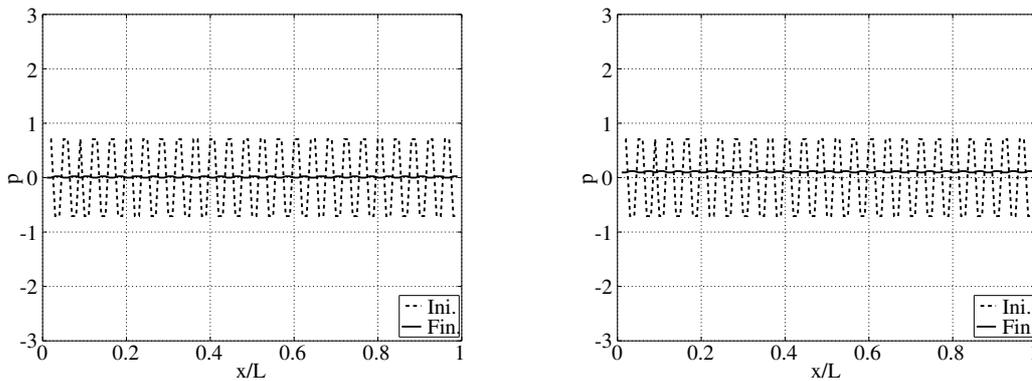


Figura 9.5: Amplificación de errores de presión en casos con condiciones de borde cíclicas (izquierda) y condiciones de borde de pared (derecha) para el Caso 4, antes (línea de trazo) y después (línea continua) de una iteración

Resulta importante remarcar que esto no garantiza la estabilidad en casos generales, donde el error puede estar compuesto de múltiples frecuencias. Sin embargo, los factores de amplificación obtenidos mediante la descomposición de Fourier permiten detectar las frecuencias más problemáticas y definir criterios generales para mitigar inestabilidades (*e.g.* aumentar el numero de correctores PISO) de acuerdo a los requerimientos del problema. Además, vale la pena mencionar que las condiciones de pared no han aumentado o disminuido los rangos de estabilidad para el caso estudiado.

Apéndice D: Condiciones de pared para la fase granular en lechos fluidizados

En la simulación de lechos fluidizados mediante técnicas Eulerianas, la elección de condiciones de borde adecuadas para la velocidad de la fase granular en contacto con la pared es un tema de discusión por la comunidad [130, 25, 62, 122, 131, 124, 132, 125]. Dado que la naturaleza de la fase granular, que en el presente modelo se trata como un medio continuo, es realmente un conjunto de partículas discretas, es esperable que la rugosidad de la pared afecte la cantidad de deslizamiento que dicha fase experimenta en contacto con la pared. A diferencia de una fase fluida, donde las condiciones de no-deslizamiento se asumen naturalmente, la condición de borde para la fase granular puede ser más compleja. Una de las técnicas más utilizadas es la de considerar condiciones de borde tipo mixtas para la velocidad de sólidos y para la temperatura granular, siguiendo el trabajo de Johnson y Jackson [25]:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_{s,w}}{\partial x} = \frac{\pi}{6} \frac{\alpha_{s,w}}{\alpha_{s,\max}} \varphi \rho_s g_0 \frac{\sqrt{3\theta_w}}{\mu_s} \mathbf{u}_{s,w} \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial \theta_w}{\partial x} = -\frac{\pi}{6} \frac{\alpha_{s,w}}{\alpha_{s,\max}} \varphi \frac{\rho_s^2}{\kappa_s} g_0 \frac{\sqrt{3\theta_w}}{\mu_s} |\mathbf{u}_{s,w}|^2 + \frac{\pi}{4} \frac{\alpha_{s,w}}{\alpha_{s,\max}} (1 - e_w^2) \frac{\rho_s}{\kappa_s} g_0 \sqrt{3\theta_w^3} \quad (3.17)$$

donde φ es el coeficiente de especularidad y e_w es el coeficiente de restitución entre la pared y las partículas. El coeficiente de especularidad puede tomar valores entre 0, correspondiendo a paredes suaves y total deslizamiento, y 1, correspondiente a paredes rugosas. En la práctica, este parámetro no es medible y se lo especifica por medio de técnicas de ajuste de datos experimentales. En este contexto, Li y Benyahia [123] propusieron una expresión para el coeficiente de especularidad como función de otros parámetros medibles (coeficiente

friccional, velocidad de deslizamiento y coeficiente de restitución de pared), generalizando así la aplicación del modelo de condiciones de borde a diversas condiciones de flujo. De esta forma, la condición de pared de Li-Benyahia hace uso de las Ecs. (3.16) y (3.17), con un coeficiente de especularidad definido como:

$$\varphi = \left(1 - \frac{d_p}{4|\mathbf{u}_{s,w}|} \frac{\partial |\mathbf{u}_{s,w}|}{\partial x}\right) \varphi' \quad (3.18)$$

donde:

$$\varphi' = \begin{cases} -\frac{7\sqrt{6\pi}(\varphi'_0)^2}{8k}, & \text{if } r \leq \frac{4k}{7\sqrt{6\pi}\varphi'_0} \\ \frac{2}{7} \frac{k}{r\sqrt{6\pi}}, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \varphi'_0 = & -0,0012596 + 0,1064551k - 0,04281476k^2 + 0,0097594k^3 \\ & - 0,0012508258k^4 + 0,0000836983k^5 - 0,00000226955k^6 \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$r = \frac{|\mathbf{u}_{s,w}|}{\sqrt{3\theta}}, \quad k = \frac{7}{2}\mu(1 + e_w) \quad (3.21)$$

Aquí μ es el coeficiente friccional entre las partículas y la pared.

Un abordaje alternativo es presentado por Schneiderbauer *et al.* [124], que combina condiciones de deslizamiento y no-deslizamiento sobre las paredes y así derivar las siguientes condiciones de pared:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_{s,w}}{\partial x} = N \mu \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{r}{\mu_0} \right) \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_w}{\partial x} = & N\sqrt{3\theta} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\mu^2}{\mu_0^2} (1 + e_w - \mu_0) \exp\left(-\frac{3r^2}{2\mu_0^2}\right) r^2 \right. \\ & + \frac{\mu}{\sqrt{6\pi}\mu_0^2} (7\mu(1 + e_w) - 4\mu_0(1 + \mu) - 3\mu\mu_0^2(1 + e_w)) \exp\left(-\frac{3r^2}{2\mu_0^2}\right) \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{6\pi}} (2(e_w - 1) + 3\mu^2(1 + e_2)) \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde:

$$N = \sqrt{\frac{\pi}{24}} \frac{\rho_s \alpha_s g_0 (1 + e_w) \theta}{\alpha_{s,max}} \quad (3.24)$$

$$\mu_0 = \frac{7(1 + e_w)}{2(1 + \beta_0)}\mu \quad (3.25)$$

siendo β_0 el coeficiente de restitución tangencial con la pared.

Bibliografía

- [1] G. Batchelor, *An Introduction to Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, New York, 1967.
- [2] W. E. Stewart, E. N. Lightfoot, R. B. Bird, *Transport phenomena*, J. Wiley, 1962.
- [3] O. A. Ladyzhenskaya, Sixth problem of the millennium: Navier-stokes equations, existence and smoothness, *Russian Mathematical Surveys* 58 (2) (2003) 251.
- [4] H. K. Versteeg, W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*, Pearson Education, 2007.
- [5] J. H. Ferziger, M. Peric, *Computational methods for fluid dynamics*, Springer Science & Business Media, 2012.
- [6] C. Christov, P. Volkov, Numerical investigation of the steady viscous flow past a stationary deformable bubble, *Journal of Fluid Mechanics* 158 (1985) 341–364.
- [7] A. Tomiyama, A. Sou, H. Minagawa, T. Sakaguchi, Numerical analysis of a single bubble by VOF method, *JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering* 36 (1) (1993) 51–56.
- [8] G. Ryskin, L. Leal, Numerical solution of free-boundary problems in fluid mechanics. Part 2. Buoyancy-driven motion of a gas bubble through a quiescent liquid, *Journal of Fluid Mechanics* 148 (1984) 19–35.
- [9] G. Ryskin, L. Leal, Numerical solution of free-boundary problems in fluid mechanics. Part 1. the finite-difference technique, *Journal of Fluid Mechanics* 148 (1984) 1–17.

- [10] M. Ishii, Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow, NASA STI/Recon Technical Report A 75 (1975) 29657.
- [11] D. A. Drew, Continuum modeling of two-phase flows., Tech. rep., DTIC Document (1982).
- [12] H. Enwald, E. Peirano, A.-E. Almstedt, Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization, *International Journal of Multiphase Flow* 22 (1996) 21–66.
- [13] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, T. Tanaka, Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed, *Powder technology* 77 (1) (1993) 79–87.
- [14] Y. Tsuji, T. Tanaka, T. Ishida, Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe, *Powder technology* 71 (3) (1992) 239–250.
- [15] P. A. Cundall, O. D. Strack, A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique* 29 (1) (1979) 47–65.
- [16] H. Arastoopour, D. Gidaspow, Analysis of IGT pneumatic conveying data and fast fluidization using a thermohydrodynamic model, *Powder Technology* 22 (1) (1979) 77–87.
- [17] D. Gidaspow, *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*, Academic press, 1994.
- [18] M. Syamlal, The particle-particle drag term in a multiparticle model of fluidization, Tech. rep., EG and G Washington Analytical Services Center, Inc., Morgantown, WV (USA) (1987).
- [19] C. Wen, Y. Yu, Mechanics of fluidization, *Chemical Engineering Progress Symposium* 62 (1966) 100–111.
- [20] L. Gibilaro, R. Di Felice, S. Waldram, P. Foscolo, Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid-particle interactions, *Chemical Engineering Science* 40 (10) (1985) 1817–1823.

- [21] R. Di Felice, The voidage function for fluid-particle interaction systems, *International Journal of Multiphase Flow* 20 (1) (1994) 153–159.
- [22] C. Lun, S. Savage, D. Jeffrey, N. Chepuriniy, Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield, *Journal of Fluid Mechanics* 140 (1984) 223–256.
- [23] J. T. Jenkins, S. B. Savage, A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles, *Journal of fluid mechanics* 130 (1983) 187–202.
- [24] J. T. Jenkins, M. Y. Louge, On the flux of fluctuation energy in a collisional grain flow at a flat, frictional wall, *Physics of Fluids* 9 (10) (1997) 2835–2840.
- [25] P. C. Johnson, R. Jackson, Frictional–collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing, *Journal of Fluid Mechanics* 176 (1987) 67–93.
- [26] D. G. Schaeffer, Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow, *Journal of Differential Equations* 66 (1) (1987) 19–50.
- [27] P. J. Oliveira, R. I. Issa, Numerical aspects of an algorithm for the Eulerian simulation of two-phase flows, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 43 (10-11) (2003) 1177–1198.
- [28] I. Park, H. Cho, H. Yoon, J. Jeong, Numerical effects of the semi-conservative form of momentum equations for multi-dimensional two-phase flows, *Nuclear Engineering and Design* 239 (11) (2009) 2365–2371.
- [29] A. Passalacqua, R. O. Fox, Implementation of an iterative solution procedure for multi-fluid gas–particle flow models on unstructured grids, *Powder Technology* 213 (1) (2011) 174–187.
- [30] R. J. LeVeque, *Finite volume methods for hyperbolic problems*, Vol. 31, Cambridge University Press, 2002.
- [31] R. I. Issa, Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting, *Journal of Computational Physics* 62 (1) (1986) 40–65.

- [32] R. I. Issa, A. Gosman, A. Watkins, The computation of compressible and incompressible recirculating flows by a non-iterative implicit scheme, *Journal of Computational Physics* 62 (1) (1986) 66–82.
- [33] T. F. Miller, Fourier analysis of the SIMPLE algorithm formulated on a collocated grid, *Numerical Heat Transfer* 30 (1) (1996) 45–66.
- [34] D. Spalding, Numerical computation of multi-phase fluid flow and heat transfer, *Recent Advances in Numerical Methods in Fluids* 1 (1980) 139–167.
- [35] P. J. Oliveira, R. I. Issa, On the numerical treatment of interphase forces in two-phase flow, *ASME-PUBLICATIONS-FED* 185 (1994) 131–131.
- [36] C. Loha, H. Chattopadhyay, P. K. Chatterjee, Assessment of drag models in simulating bubbling fluidized bed hydrodynamics, *Chemical Engineering Science* 75 (2012) 400–407.
- [37] A. Passalacqua, L. Marmo, A critical comparison of frictional stress models applied to the simulation of bubbling fluidized beds, *Chemical Engineering Science* 64 (12) (2009) 2795–2806.
- [38] D. Patil, M. van Sint Annaland, J. Kuipers, Critical comparison of hydrodynamic models for gas–solid fluidized beds - Part I: Bubbling gas–solid fluidized beds operated with a jet, *Chemical Engineering Science* 60 (1) (2005) 57–72.
- [39] D. Patil, M. van Sint Annaland, J. Kuipers, Critical comparison of hydrodynamic models for gas–solid fluidized beds - Part II: Freely bubbling gas–solid fluidized beds, *Chemical Engineering Science* 60 (1) (2005) 73–84.
- [40] E. Esmaili, N. Mahinpey, Adjustment of drag coefficient correlations in three dimensional CFD simulation of gas–solid bubbling fluidized bed, *Advances in Engineering Software* 42 (6) (2011) 375–386.
- [41] J.-M. Delhaye, M. Giot, M. Riethmuller, *Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering*, Hemisphere Pub, 1981.

- [42] J. Boure, A. Bergles, L. Tong, Review of two-phase flow instability, *Nuclear Engineering and Design* 25 (2) (1973) 165–192.
- [43] A. L. Zanotti, Modelado del flujo multifase en la producción de acero por colada continua, Ph.D. thesis, Universidad Nacional del Litoral (2007).
- [44] S. F. Corzo, Assessment of nuclear power reactor using computational fluid dynamics, Ph.D. thesis, Universidad Nacional del Litoral (2015).
- [45] N. Zuber, J. Findlay, Average volumetric concentration in two-phase flow systems, *Journal of heat transfer* 87 (4) (1965) 453–468.
- [46] S. Politis, Prediction of two-phase solid-liquid turbulent flow in stirred vessels, Ph.D. thesis, University of London (1989).
- [47] R. Nigmatulin, Spatial averaging in the mechanics of heterogeneous and dispersed systems, *International Journal of Multiphase Flow* 5 (5) (1979) 353–385.
- [48] S. Whitaker, The transport equations for multi-phase systems, *Chemical Engineering Science* 28 (1) (1973) 139–147.
- [49] S. Teletov, Problems of the hydrodynamics of two-phase mixtures. i, *Vestn. Mosk. Gos. Univ., Ser. Mat. Mekh. Astron. Fiz. Khim* 2 (1958) 15–27.
- [50] S. Teletov, Fluid dynamic equations for two-phase fluids, *Soviet Physics Doklady, Akademiia Nauk SSSR* 50 (1945) 99.
- [51] P. Vernier, J. Delhaye, General two-phase flow equations applied to the thermohydrodynamics of boiling nuclear reactor, *Energie Primaire* 4 (1) (1968) 3–43.
- [52] M. Ishii, K. Mishima, Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations, *Nuclear Engineering and design* 82 (2-3) (1984) 107–126.
- [53] J. Delhaye, J. Achard, On the averaging operators introduced in two-phase flow modeling, in: *Proceedings CSNI Specialist Meeting in transient two-phase flow, Vol. 1, 1976, pp. 5–84.*

- [54] G. S. Arnold, D. A. Drew, R. T. Lahey Jr, Derivation of constitutive equations for interfacial force and Reynolds stress for a suspension of spheres using ensemble cell averaging, *Chemical Engineering Communications* 86 (1) (1989) 43–54.
- [55] D. Zhang, A. Prosperetti, Averaged equations for inviscid disperse two-phase flow, *Journal of Fluid Mechanics* 267 (1994) 185–219.
- [56] D. A. Drew, S. L. Passman, *Theory of multicomponent fluids*, Vol. 135, Springer Science & Business Media, 2006.
- [57] I. Kataoka, Local instant formulation of two-phase flow, *International Journal of Multiphase Flow* 12 (5) (1986) 745–758.
- [58] S. Ergun, Fluid flow through packed columns, *Chemical Engineering Progress* 48.
- [59] J. Richardson, W. Zaki, The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow, *Chemical Engineering Science* 3 (2) (1954) 65–73.
- [60] H. Arastoopour, P. Pakdel, M. Adewumi, Hydrodynamic analysis of dilute gas–solids flow in a vertical pipe, *Powder technology* 62 (2) (1990) 163–170.
- [61] S. Chapman, T. G. Cowling, *The mathematical theory of non-uniform gases: An account of the Kinetic Theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*, Cambridge university press, 1970.
- [62] J. Jenkins, M. Richman, Boundary conditions for plane flows of smooth, nearly elastic, circular disks, *Journal of Fluid Mechanics* 171 (1986) 53–69.
- [63] G. I. Tardos, A fluid mechanistic approach to slow, frictional flow of powders, *Powder Technology* 92 (1) (1997) 61–74.
- [64] J. Sinclair, R. Jackson, Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions, *AIChE Journal* 35 (9) (1989) 1473–1486.
- [65] S. Dartevelle, Numerical and granulometric approaches to geophysical granular flows, Ph.D. thesis, Michigan Technological University (2003).

- [66] A. Schofield, P. Wroth, *Critical state soil mechanics*, Vol. 310, McGraw-Hill London, 1968.
- [67] E. B. Pitman, D. G. Schaeffer, Stability of time dependent compressible granular flow in two dimensions, *Communications on Pure and Applied Mathematics* 40 (4) (1987) 421–447.
- [68] S. Benyahia, Validation study of two continuum granular frictional flow theories, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 47 (22) (2008) 8926–8932.
- [69] A. Srivastava, S. Sundaresan, Analysis of a frictional–kinetic model for gas–particle flow, *Powder Technology* 129 (1) (2003) 72–85.
- [70] M. Syamlal, W. Rogers, T. J. O’Brien, *MFIX documentation: Theory guide*, National Energy Technology Laboratory, Department of Energy, Technical Note DOE/METC-95/1013 and NTIS/DE95000031.
- [71] S. Savage, Analysis of slow high-concentration flows of granular materials, *Journal of Fluid Mechanics* 377 (1998) 1–26.
- [72] D. Spalding, A. Gosman, W. Pun, A. Runchal, M. Wolfshtein, *Heat and mass transfer in recirculating flows*, Academic Press, London, 1969.
- [73] S. V. Patankar, D. B. Spalding, A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (10) (1972) 1787–1806.
- [74] F. H. Harlow, J. E. Welch, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface, *The physics of fluids* 8 (12) (1965) 2182–2189.
- [75] A. J. Chorin, The numerical solution of the Navier-Stokes equations for an incompressible fluid, *Bulletin of the American Mathematical Society* 73 (6) (1967) 928–931.
- [76] A. J. Chorin, Numerical solution of the Navier-Stokes equations, *Mathematics of computation* 22 (104) (1968) 745–762.

- [77] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, Butterworth-Heinemann, 2007.
- [78] H. Jasak, *Error analysis and estimation for the Finite Volume Method with applications to fluid flows*, Ph.D. thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine (1996).
- [79] S. Márquez Damián, *An extended mixture model for the simultaneous treatment of short and long scale interfaces*, Ph.D. thesis, Universidad Nacional del Litoral (2013).
- [80] H. Jasak, *Numerical solution algorithms for compressible flows*, Lecture Notes Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, Croatia, Academic Year 2007.
- [81] S. V. Patankar, *A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations*, *Numerical Heat Transfer* 4 (4) (1981) 409–425.
- [82] J. Van Doormaal, G. Raithby, *Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows*, *Numerical Heat Transfer* 7 (2) (1984) 147–163.
- [83] W.-Q. Tao, Hiroyuki Ozoe, *A modified pressure-correction scheme for the SIMPLER method, MSIMPLER*, *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals* 39 (5) (2001) 435–449.
- [84] W. Q. Tao, Z. G. Qu, Y. L. He, *A novel segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems - CLEAR (coupled and linked equations algorithm revised) part I: Mathematical formulation and solution procedure*, *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 45 (1) (2004) 1–17.
- [85] Z. Qu, W. Tao, Y. He, *Implementation of CLEAR algorithm on collocated grid system and application examples*, *Numerical Heat Transfer* 47 (1) (2004) 65–96.
- [86] Y. Cheng, T. Lee, H. Low, W. Tao, *An efficient and robust numerical scheme for the SIMPLER algorithm on non-orthogonal curvilinear coordinates: CLEARER*, *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 51 (5) (2007) 433–461.
- [87] S. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, CRC press, 1980.

- [88] F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab*, Vol. 113, Springer, 2015.
- [89] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, C. Fureby, A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques, *Computers in Physics* 12 (6) (1998) 620–631.
- [90] A. F. U. Guide, Ansys, Inc. November.
- [91] C. Rhie, W. Chow, Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation, *AIAA journal* 21 (11) (1983) 1525–1532.
- [92] H. Karema, S. Lo, Efficiency of interphase coupling algorithms in fluidized bed conditions, *Computers & fluids* 28 (3) (1999) 323–360.
- [93] Y. Liu, F. Wang, Y. Li, Fourier analysis of the SIMPLE serials, *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 69 (3) (2016) 197–216.
- [94] T. F. Miller, D. J. Miller, A Fourier analysis of the IPSA/PEA algorithms applied to multiphase flows with mass transfer, *Computers & fluids* 32 (2) (2003) 197–221.
- [95] S. S. Deshpande, L. Anumolu, M. F. Trujillo, Evaluating the performance of the two-phase flow solver interFoam, *Computational Science & Discovery* 5 (1) (2012) 014016.
- [96] S. T. Zalesak, Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids, *Journal of Computational Physics* 31 (3) (1979) 335–362.
- [97] H. Weller, Non-orthogonal version of the arbitrary polygonal C-grid and a new diamond grid, *Geoscientific Model Development* 7 (3) (2014) 779–797.
- [98] H. Weller, A. Shahrokhi, Curl-free pressure gradients over orography in a solution of the fully compressible Euler equations with implicit treatment of acoustic and gravity waves, *Monthly Weather Review* 142 (12) (2014) 4439–4457.

- [99] J. Perot, D. Vidovic, P. Wesseling, Mimetic reconstruction of vectors, *Compatible Spatial Discretizations* (2006) 173–188.
- [100] M. Shashkov, B. Swartz, B. Wendroff, Local reconstruction of a vector field from its normal components on the faces of grid cells, *Journal of Computational Physics* 139 (2) (1998) 406–409.
- [101] H. J. Aguerre, C. I. Pairetti, C. M. Venier, S. M. Damián, N. M. Nigro, An oscillation-free flow solver based on flux reconstruction, *Journal of Computational Physics* 365 (2018) 135–148.
- [102] C. M. Venier, S. M. Damian, N. M. Nigro, Numerical aspects of Eulerian gas–particles flow formulations, *Computers & Fluids* 133 (2016) 151–169.
- [103] W. J. Rider, D. B. Kothe, Reconstructing volume tracking, *Journal of Computational Physics* 141 (2) (1998) 112–152.
- [104] J. Spore, J. Elson, S. Jolly-Woodruff, T. Knight, J. Lin, R. Nelson, K. Pasamehmetoglu, R. Steinke, C. Unal, TRAC-M/FORTRAN 90 (version 3.0) - Theory manual (2000).
- [105] D. H. Sharp, An overview of Rayleigh-Taylor instability, *Physica D: Nonlinear Phenomena* 12 (1) (1984) 3–18.
- [106] J. Kuipers, W. Prins, W. Van Swaaij, Theoretical and experimental bubble formation at a single orifice in a two-dimensional gas-fluidized bed, *Chemical Engineering Science* 46 (11) (1991) 2881–2894.
- [107] C. M. Venier, C. I. Pairetti, S. M. Damian, N. M. Nigro, On the stability analysis of the PISO algorithm on collocated grids, *Computers & Fluids* 147 (2017) 25–40.
- [108] F. Wang, L. Zheng, Y. T. Li, Fourier analysis of the effect of non-constant terms on the convergence properties of simple algorithm formulated on a staggered grid, in: *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 204, Trans Tech Publ, 2012, pp. 4688–4693.
- [109] C. Merkle, S. Venkateswaran, P. Buelow, The relationship between pressure-based and density-based algorithms, AIAA 92-0425.

- [110] D. Kunii, O. Levenspiel, *Fluidization engineering*, Elsevier, 2013.
- [111] D. Geldart, Types of gas fluidization, *Powder technology* 7 (5) (1973) 285–292.
- [112] J. Ding, D. Gidaspow, A bubbling fluidization model using Kinetic Theory of Granular Flow, *AIChE Journal* 36 (4) (1990) 523–538.
- [113] S. Yuu, H. Nishikawa, T. Umekage, Numerical simulation of air and particle motions in group-B particle turbulent fluidized bed, *Powder Technology* 118 (1) (2001) 32–44.
- [114] F. Taghipour, N. Ellis, C. Wong, Experimental and computational study of gas–solid fluidized bed hydrodynamics, *Chemical Engineering Science* 60 (24) (2005) 6857–6867.
- [115] L. Mazzei, Eulerian modelling and computational fluid dynamics simulation of mono and polydisperse fluidized suspension, Ph.D. thesis, UCL (University College London) (2008).
- [116] J.-F. Parmentier, O. Simonin, O. Delsart, A numerical study of fluidization behavior of Geldart B, A/B and A particles using an Eulerian multifluid modeling approach, *Circulating Fluidized Bed Technology IX*, Hamburg, Germany.
- [117] C. M. Venier, S. Marquez Damian, N. M. Nigro, Assessment of gas-particle flow models for pseudo-2d fluidized bed applications, *Chemical Engineering Communications* 205 (4) (2018) 456–478.
- [118] J. A. Laverman, I. Roghair, M. v. S. Annaland, H. Kuipers, Investigation into the hydrodynamics of gas–solid fluidized beds using Particle Image Velocimetry coupled with Digital Image Analysis, *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 86 (3) (2008) 523–535.
- [119] M. Syamlal, T. O’Brien, The derivation of a drag coefficient formula from velocity-voidage correlations, Technical Note, US Department of energy, Office of Fossil Energy, NETL, Morgantown, WV.
- [120] S. Zimmermann, F. Taghipour, CFD modeling of the hydrodynamics and reaction kinetics of FCC fluidized-bed reactors, *Industrial & engineering chemistry research* 44 (26) (2005) 9818–9827.

- [121] F. Vejahati, N. Mahinpey, N. Ellis, M. B. Nikoo, CFD simulation of gas–solid bubbling fluidized bed: A new method for adjusting drag law, *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 87 (1) (2009) 19–30.
- [122] S. Benyahia, M. Syamlal, T. J. O’Brien, Evaluation of boundary conditions used to model dilute, turbulent gas/solids flows in a pipe, *Powder Technology* 156 (2) (2005) 62–72.
- [123] T. Li, S. Benyahia, Revisiting Johnson and Jackson boundary conditions for granular flows, *AIChE journal* 58 (7) (2012) 2058–2068.
- [124] S. Schneiderbauer, D. Schellander, A. Löderer, S. Pirker, Non-steady state boundary conditions for collisional granular flows at flat frictional moving walls, *International Journal of Multiphase Flow* 43 (2012) 149–156.
- [125] P. Fede, O. Simonin, A. Ingram, 3D numerical simulation of a lab-scale pressurized dense fluidized bed focussing on the effect of the particle-particle restitution coefficient and particle–wall boundary conditions, *Chemical Engineering Science* 142 (2016) 215–235.
- [126] T. Li, J. Grace, X. Bi, Study of wall boundary condition in numerical simulations of bubbling fluidized beds, *Powder Technology* 203 (3) (2010) 447–457.
- [127] C. M. Rhie, Pressure-based Navier-Stokes solver using the multigrid method, *AIAA journal* 27 (8) (1989) 1017–1018.
- [128] S. Zhang, X. Zhao, S. Bayyuk, Generalized formulations for the Rhie-Chow interpolation, *Journal of Computational Physics* 258 (2014) 880–914.
- [129] F. P. Kärrholm, Numerical modelling of diesel spray injection, turbulence interaction and combustion, Chalmers University of Technology, 2008.
- [130] K. Hui, J. Ungar, P. Haff, R. Jackson, Boundary conditions for high-shear grain flows, *Journal of Fluid Mechanics* 145 (22) (1984) 233.
- [131] N. A. Konan, O. Simonin, K. Squires, Rough wall boundary condition derivation for particle continuum equations: validation from LES/DPS of gas-solid turbulent channel flow, in: ASME 2006 2nd Joint US-European Fluids Engineering Summer Meeting

Collocated With the 14th International Conference on Nuclear Engineering, American Society of Mechanical Engineers, 2006, pp. 1723–1732.

- [132] A. Soleimani, S. Schneiderbauer, S. Pirker, A comparison for different wall-boundary conditions for kinetic theory based two-fluid models, *International Journal of Multiphase Flow* 71 (2015) 94–97.

Doctorado en Ingeniería
Mención Mecánica Computacional

Título de la obra:

**Resolución computacional
de flujos multifásicos granulares
por métodos Eulerianos**

Autor: César Martín Venier

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

Método de Volúmenes Finitos,
Fluidodinámica Computacional (CFD),
Flujo Granular,
Métodos Eulerianos.