

Universidad de Chile Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas Departamento de Ingeniería Civil

Modelación numérica de fluidización de un lecho de partículas y su incidencia en el gasto sólido de fondo

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL

Tomás Francisco Salazar González

PROFESOR GUÍA: Luis Zamorano Riquelme

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:

Yarko Niño Campos Aldo Tamburrino Tavantzis

> SANTIAGO DE CHILE 2019

RESUMEN DE MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL POR: TOMÁS SALAZAR GONZÁLEZ FECHA: SEPTIEMBRE DE 2019 PROF. GUÍA: LUIS ZAMORANO RIQUELME

Modelación numérica de fluidización de un lecho de partículas y su incidencia en el gasto sólido de fondo

El río Maipo es la principal fuente de agua potable de la ciudad de Santiago. Esta agua es captada por una bocatoma y es tratada por la empresa de agua potable Aguas Andinas. Desde los comienzos de su operación que esta bocatoma ha presentado problemas de acumulación de sedimentos. Las soluciones actuales para este problema no son del todo efectivas, por lo que en la presente memoria se presenta otra solución alternativa. Esta solución corresponde a fluidizar el lecho del río mediante chorros de agua. Para modelar numéricamente esta solución se utiliza el software OpenFOAM, usando modelación discreta de partículas (DPM), siendo el sedimento modelado por partículas esféricas de igual tamaño. Previo a ésto, se realizan simulaciones de validación del modelo. Esta validación se realiza comparando el gasto sólido de fondo adimensional obtenido numéricamente con los valores de relaciones obtenidas empíricamente en estudios anteriores. Las simulaciones realizadas en esta etapa corresponden a 15, que abarcan un rango aceptable de las relaciones de gasto sólido conocidas. Los resultados obtenidos en esta etapa muestran a simple vista un buen comportamiento del modelo, debido a que las partículas se mueven en la parte superficial del lecho, cuya capa podría semejarse a la capa de arrastre de fondo. Sin embargo, al comparar los resultados con las relaciones clásicas de gasto sólido de fondo, se evidencia que el modelo tiene un comportamiento distinto a lo obtenido experimentalmente. Uno de estos corresponde al esfuerzo de corte crítico obtenido, correspondiente a $\tau_{*c} = 0.79$. Este valor es mayor en comparación a lo obtenido experimentalmente por otros autores, cuyos valores rondan entre $\tau_{*c} = 0,048$ a 0,058. Estudios anteriores desarrollados con el mismo tipo de modelación numérica dan luces de los posibles errores obtenidos. Uno de estos errores podría ser que no se hayan utilizado valores adecuados en los parámetros utilizados en las partículas, tales como el coeficiente de restitución y el coeficiente de fricción dinámico. Otro podría ser que una modelación 3D mejore el modelo de arrastre realizado en 2D.

A partir del modelo de arrastre obtenido, se realiza una simulación con un chorro de agua de 1 m/s con una configuración del canal utilizada anteriormente en el modelo de arrastre, obteniéndose un valor de gasto sólido de fondo aproximadamente 100 veces mayor respecto a la situación sin chorros. Finalmente se dan recomendaciones de los pasos a seguir en un trabajo futuro. Uno de estos es realizar las simulaciones con chorros de agua y aire utilizando herramientas implementadas en OpenFOAM. Otra recomendación corresponde a realizar una metodología distinta para el cálculo del gasto sólido de fondo, para poder usar de mejor manera los datos que entrega la simulación numérica, los cuales en los casos experimentales son datos difíciles de obtener.

A mi abuelita...

Agradecimientos

Primeramente quisiera agradecer a mi madre y a mi tio, quienes me entregaron su preocupación, su esfuerzo, su amor y por escucharme cuando lo necesité. Sin ustedes nada de esto hubiese sido posible. Agradezco a mis hermanos por el apoyo y la confianza que siempre me tuvieron.

Agradezco a la Jacquie y a la tía Carmen por ser las jefazas durante mi estadía en el tercero. Les agradezco las charlas, la paciencia y las sonrisas compartidas. Agradezco también a tods ls funcionaries que con su trabajo silencioso hacen posible que nuestra estadía en la U sea la más grata.

También agradezco a mi comisión. Al profesor Luis Zamorano, por haberme ofrecido este tema de memoria y por ayudarme con varias dudas técnicas que tuve. Al profesor Yarko Niño por orientarme con sus sabios consejos y apoyarme durante mi memoria. Al profesor Aldo Tamburrino por su calidad humana, sus consejos y por aceptar ser parte de mi comisión.

A mis amigos de plan común: Nico, Francisco, Carlitros, Momo, Gonzalo, Javier, Seba y Fabián. Los primeros años en la U fueron gratos gracias a su compañía. No se olvidarán esas noches en el antro y los mochileos compartidos. A los pseudoplásticos, por enseñarme su gran amor y entrega por la ciencia y la hidráulica. A mi vecina Josefita, por compartir sus oncesitas piolas con el Danko y el Miti. A los cabros de la oficina: Tomás, Rodri, Joaquín, Jose y Gonzalo, vale por el apañe, fue grato compartir oficina con ustedes, a pesar de que no siempre nuestros momentos fueron de trabajo ni en la oficina. A mis amigos estructurales: Pablito, Miti, Camilo, Shesho, Nicky, Mati C., Migue, Egger y Boada, los quiero harto a pesar de haberse ido al lado oscuro de la fuerza. A mis amigos de hidráulica: Tomás, Carla, Gonzalo, Feolipe, Danko, Álvaro, Fabi, Pachi, Cote, Mati G., Juancito y Mauro, les agradez-co hacer que mi camino por el desafiante mundo del agua haya sido más grato, estoy feliz de haberlos conocido y espero toparlos en un futuro próximo como colegas, de seguro les irá bacán. A todos ustedes muchas gracias por acompañarme cuando más lo necesité y por no dejarme tirar la toalla.

Al Pato y al Kike, por haberme aguantado los primeros dos años en Bellas Artes y por quererme tanto, gracias cabros.

Un agradecimiento especial a quienes me ayudaron a resolver varias de mis dudas en el desarrollo de esta memoria: Gustavo, Aldo, Tomás y Natalia. Mención especial a la Nati por tener siempre la disposición y paciencia para ayudar a otros, de verdad muchas gracias por el tiempo dedicado para ayudarme.

A todos aquellos con quienes compartí una sonrisa o una conversación grata, a quienes me ayudaron y me acompañaron en este camino.

A mi abuelita. Gracias por enseñarme a querer a la gente de mi alrededor y ser solidario. Soy quien soy gracias a ti. Gracias por acompañarnos en todo momento a mí, a mi mamá y a mis hermanos. Por ser mi corazón, mi alma y mi fuerza. Todo esto es para ti abuelita.

Tabla de contenido

1.	Intr	oducción	1
	1.1.	Motivación	1
	1.2.	Objetivos	2
		1.2.1. Objetivos Generales	2
		1.2.2. Objetivos Específicos	2
	1.3.	Organización de la memoria	2
2.	Maı	co teórico	3
	2.1.	Fluidización	3
	2.2.	Modelación de la turbulencia	5
		2.2.1. Flujo turbulento en canales	5
		2.2.2. Escalas de la turbulencia	6
		2.2.3. Modelos de turbulencia	6
		2.2.4. Modelo $k - \epsilon$	7
		2.2.5. Funciones de pared	7
	2.3.	Modelación del movimiento de partículas	9
	2.4.	Otros estudios numéricos	0
	2.5.	Arrastre incipiente	2
	2.6.	Gasto sólido de fondo	4
3.	Mo	delo numérico utilizado 10	6
	3.1.	Descripción de DPMFoam	6
	3.2.	Fase continua	6
	3.3.	Partículas	7
	3.4.	Interacción fluido-partículas	9
4.	Met	odología numérica 20	0
	4.1.	Simulaciones a realizar	0
	4.2.	Geometría del problema	1
	4.3.	Malla numérica	3
	4.4.	Condiciones de borde	3
		4.4.1. Condición de borde de velocidad	3
		4.4.2. Condición de borde de presión	3
		4.4.3. Condiciones de borde turbulencia	4
	4.5.	Condición inicial del lecho	4
	4.6.	Discretización temporal	5
	4.7.	Parámetros del modelo DPM	6

	4.8.	Determinación del gasto sólido de fondo	26
5.	Res	ultados	28
	5.1.	Características del flujo	28
	5.2.	Gasto sólido de fondo	32
	5.3.	Simulación con chorros	39
6.	Con	clusiones, recomendaciones y trabajo futuro	41
	6.1.	Conclusiones	41
	6.2.	Recomendaciones y trabajo futuro	42
Bi	bliog	rafía	44
Aı	nexos	3	47
A.	Fich	eros del modelo en OpenFOAM	48
	A.1.	Carpeta 0	48
		A.1.1. Condición de borde de velocidad	49
		A.1.2. Condición de borde de presión	49
		A.1.3. Condición de borde para la turbulencia	50
	A.2.	Carpeta constant	52
		A.2.1. Parámetros del modelo DPM	52
	A.3.	Carpeta system	55
		A.3.1. Herramienta blockMesh	55
		A.3.2. Herramienta topoSet	57
		A.3.3. Herramienta createPatch	57
		A.3.4. Herramienta setFields	58
в.	Esca	alamiento del modelo	60
C.	Tip	os de condiciones de borde en OpenFOAM	62
D.	Sim	ulaciones de gasto sólido de fondo	63

Índice de figuras

2.1.	Tipos de fluidización: a) Lecho fijo, b) mínima fluidización, c) expansión del	
	lecho y fluidizacion homogenea, d) velocidad del lecho mayor a la minima	
	para generar la nuldización y se presentan burbujas, e) las burbujas crecen	
	uniendose a otra a medida que suben, mientras, las particulas descienden en	
	zonas cercanas a las paredes, f) se forma una capa inestable empujada por	
	una fuerza similar a un pistón, g) ocurre a altas velocidades, observándose	
	un movimiento turbulento de las burbujas y las partículas y h) cuando las	
	partículas quedan ya fuera del lecho. Fuente: Kunii & Levenspiel (1991).	4
2.2.	Diagrama de clasificación de partículas de fluidización por aire. Fuente: Geldart	~
0.0	(1973).	\mathbf{G}
2.3.	Esquema de implementación de función de pared. En azul se observa la zona	0
2.4	de la primera celda.	9
2.4.	Velocidad de computo para distintos métodos de seguimiento de particulas.	10
~ ~	Fuente: Lu <i>et al.</i> 2017	10
2.5.	Comparación entre la posición de las partículas para distintas razones entre	
	tamano de celda y partícula. (a) antes de 0.3 s (b) después de 0.3 s. Fuente:	
0.0	Li et al. (2017) .	11
2.6.	Resultados numéricos de Guandalini <i>et al.</i> (2015) con y sin flujo en 0.2 y 1.2	10
~ -	segundos después de la invección de CO_2 . Fuente: Guandalini <i>et al.</i> (2015).	12
2.7.	Fuerzas fundamentales que actuan para la condición de arrastre incipiente.	10
0.0	Fuente: Apuntes del curso Cl71J- Nino. (2013) $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	13
2.8.	Curva de Shields en funcion de Re_{*p} . Fuente: Apuntes del curso CI71J- Nino	14
0.0	$(2013) \dots \dots$	14
2.9.	Comparación entre las relaciones de Engelund & Fredøe, Meyer-Peter & Muller,	1 5
	Ashida & Michiue, Fernandez-Luque & van Beek y Wong & Parker	15
3.1.	Algoritmo de one-way coupling y two-way coupling. Fuente: Modificado de	
	Benra <i>et al.</i> (2011).	19
4.1.	Esquema de casos de estudio. (a) Perfil de velocidades y gasto sólido de fondo	
	en canal con lecho. (b) Perfil de velocidades y gasto solido de fondo en canal	01
4.0	con lecho y chorros.	21
4.2.	Partes de la geometria del problema. Vista frontal.	22
4.3.	Partes de la geometria del problema. Versión final en la cual se hicieron las	00
4 4	simulaciones. Vista frontal.	22
4.4.	Malla numerica utilizada, creada utilizando "blockMesh". Vista frontal	23
4.5.	Condicion inicial del lecho.	25

4.6.	Esquema de cálculo del gasto sólido de fondo. El color azul indica una baja velocidad de las partículas y el color rojo una velocidad alta	27
5.1.	Perfiles de velocidades adimensionalizados. Comparación de las simulaciones que no mostraron arrastre.	31
5.2.	Perfiles de velocidades adimensionalizados. Comparación de las simulaciones que mostraron arrastre.	32
5.3.	Situación del lecho del canal para $\tau_* = 0.08$ a los 60 segundos. (a) Vista total del canal y (b) zoom a las partículas. Vistas generadas en Paraview	34
5.4.	Situación del lecho del canal para $\tau_* = 10^{-0.1}$ a los 60 segundos. (a) Vista total del canal y (b) zoom a las partículas. Vistas generadas en Paraview	35
5.5.	Situación del lecho del canal para $\tau_* = 1$ a los 40 segundos. (a) Vista total del canal y (b) zoom a las partículas. Vistas generadas en Paraview	36
5.6.	Comparación de las soluciones numéricas obtenidas con las relaciones de Meyer- Peter & Müller (1948), Engelund & Fredsøe (1976), Ashida & Michiue (1972),	
5.7.	Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006) Ajuste de las soluciones numéricas en comparación con las relaciones de Meyer-	37
5.8.	Peter & Müller (1948), Engelund & Fredsøe (1976), Ashida & Michiue (1972), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006) Captura de simulación con chorro. (a) Vista del canal completo y (b) zoom a	39
	la zona del chorro	40
6.1.	Volumen de control para calcular el gasto sólido de fondo	43
A.1.	Estructura de carpetas y archivos del modelo	48
B.1.	Speedup (en rojo)y eficiencia (en azul) del modelo para simulaciones con dis- tintas cantidades de procesadores trabajando en paralelo.	61
D.1.	Situación del lecho para: (a) $\tau_* = 0.08$, (b) $\tau_* = 10^{-1}$, (c) $\tau_* = 10^{-0.5}$, (d) $\tau_* = -10^{-0.3}$	64
D.2.	Situación del lecho para: (a) $\tau_* = 1$. (b) $\tau_* = 10^{0.1}$. (c) $\tau_* = 10^{0.2}$. (d) $\tau_* = 10^{0.3}$.	65
D.3.	Situación del lecho para: (a) $\tau_* = 10^{0.4}$, (b) $\tau_* = 10^{0.5}$.	66
D.4.	Zoom de la situación del lecho para: (a) $\tau_* = 1$, (b) $\tau_* = 10^{0,1}$, (c) $\tau_* = 10^{0,2}$, (d) $\tau_* = 10^{0,3}$	67
D.5.	Zoom de la situación del lecho para: (a) $\tau_* = 10^{0,4}$, (b) $\tau_* = 10^{0,5}$.	68

Índice de tablas

2.1.	Constantes del modelo $k - \epsilon$	7
4.1.	Configuraciones de simulaciones a realizar para el caso sin chorros	21
4.2.	Discretización temporal utilizada en las simulaciones.	26
4.3.	Parámetros utilizados en el modelo DPMFoam.	26
5.1.	Tiempo en que se alcanza el régimen permanente del flujo	28
5.2.	Características del flujo obtenido en las simulaciones en régimen permanente.	29
5.3.	Diferencia entre la velocidad de corte obtenida del ajuste al perfil de velocida-	
	des con el obtenido de canal con flujo uniforme	30
5.4.	Gasto sólido de fondo adimensional para las configuraciones simuladas	33
5.5.	Gasto sólido de fondo para simulación con chorro	40

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

El río Maipo es la principal fuente de agua potable de la ciudad de Santiago. Esta agua es captada por una bocatoma y es tratada por la empresa de agua potable Aguas Andinas. Desde los comienzos de su operación, la bocatoma que capta las aguas del río Maipo ha tenido problemas de acumulación de sedimentos, por lo que se han estado buscando alternativas para facilitar el arrastre de éstos en el desripiador existente en la captación.

Hoy en día existen diversas alternativas que se utilizan para favorecer el arrastre de sedimentos, como por ejemplo, el estrechamiento del cauce, reorientación de la captación, manejo de compuertas, entre otras. Sin embargo, estas soluciones no siempre permiten el arrastre adecuado para limpiar la desripiadora, debido a que no necesariamente se tiene un caudal pasante importante que logre que se muevan las partículas de sedimento. Esto provoca diversos problemas en la operación y mantención en el mediano plazo en este tipo de obras. Incluso esto afecta a otro tipo de obras, como por ejemplo, en embalses la acumulación de sedimentos puede disminuir la vida útil de éstos. De estos problemas nace la necesidad de buscar una solución distinta a las actuales. En el presente trabajo se propone una solución alternativa, consistente en estudiar la fluidización del lecho en la desripiadora mediante chorros de agua. Mediante estos chorros se podría facilitar el movimiento de las partículas sin necesidad de tener una cantidad importante de caudal pasante.

Esta solución debería ser validada mediante un modelo físico conceptual del problema. Sin embargo, esto generalmente representa un alto costo en términos de tiempo y recursos. En este caso, el uso de un modelo numérico puede ser apropiado para estudiar el problema, debido a que ya existen estudios numéricos cuya aplicación en problemas de ingeniería similares han tenido resultados satisfactorios. La modelación numérica es desarrollada a partir de un modelo CFD-DEM del software OpenFOAM, donde el sedimento es representado mediante partículas esféricas de igual tamaño.

A partir de este modelo, se obtendrá una relación entre el caudal de los chorros, el caudal pasante y el gasto sólido de fondo. Los resultados obtenidos podrían ser extrapolados a otras obras hidráulicas que tengan problemas de acumulación de sedimentos, tales como bocatomas, desarenadores, embalses, etc.

1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivos Generales

El objetivo general de la presente memoria es determinar la incidencia de chorros de agua verticales en el gasto sólido de fondo en un lecho de partículas, mediante modelación numérica 2D utilizando el software OpenFOAM.

1.2.2. Objetivos Específicos

- 1. Validar un modelo de arrastre de sedimentos numéricamente mediante OpenFOAM para distintas pendientes en un canal 2D.
- 2. Simular con el modelo de OpenFOAM validado distintas configuraciones de caudal pasante, de los chorros y tamaño de partículas en un canal 2D.
- 3. Analizar el efecto del caudal pasante y de los chorros en el gasto sólido de fondo.

1.3. Organización de la memoria

- Capítulo 1: Se presenta la motivación que da origen al problema en estudio y cómo se pretende modelar el fenómeno. Se definen además los objetivos generales y específicos de la memoria.
- Capítulo 2: Contiene la revisión bibliográfica. Incluye una descripción del concepto de fluidización, una explicación sobre modelos de turbulencia y del movimiento de partículas. Además, se revisan estudios numéricos con modelos similares a los de la presente memoria y se da un marco teórico sobre arrastre incipiente y gasto sólido de fondo.
- Capítulo 3: Se describe el modelo numérico a utilizar, en particular, las ecuaciones que se utilizan para modelar el fenómeno.
- Capítulo 4: Se detalla la metodología numérica utilizada. Explica la construcción de la malla numérica, la discretización temporal, condiciones de bordes y el tipo de simulaciones se realizan en la memoria.
- Capítulo 5: Se presenta y discute los resultados obtenidos.
- Capítulo 6: Se realiza un análisis al trabajo desarrollado, incluyendo conclusiones y trabajo futuro.

Capítulo 2

Marco teórico

2.1. Fluidización

La fluidización es un proceso por el cual un flujo ascendente de gas, líquido o una mezcla de éstos, se utiliza para suspender partículas sólidas. En este proceso, macroscópicamente se puede observar que la fase sólida se comporta similar a un fluido.

Una clasificación de los tipos de fluidización que pueden ocurrir es mostrada por Kunii & Levenspiel (1991) y especifica también en qué tipo de fluidos usualmente puede ocurrir (Figura 2.1).

De manera similar a lo mostrado por Kunii & Levenspiel (1991), la fluidización por gases fue estudiada por Geldart (1973). A partir de su estudio, Geldart (1973) pudo evidenciar que los parámetros más importantes en el comportamiento de la fluidización por gases son la diferencia de densidades de las partículas con la del fluido (también conocida como densidad boyante) y el tamaño medio de las partículas. De esta manera, Geldart (1973) clasificó a las partículas en cuatro grupos de acuerdo al comportamiento de éstas ante un flujo de gas ascendente (Figura 2.2).

- Grupo A: Son aquellas partículas que se fluidizan fácilmente, a bajas velocidades y se forman burbujas controladas a mayores velocidades. Poseen baja densidad de partícula o diámetros relativamente pequeños.
- **Grupo B:** Se fluidizan relativamente fácil y se forman burbujas apenas se alcanza la velocidad mínima de fluidización.
- **Grupo C:** Las partículas son finas y tienen un comportamiento cohesivo, por lo que son difíciles de fluidizar.
- Grupo D: Partículas más gruesas, que pueden fluidizarse solo a grandes caudales.



Figura 2.1: Tipos de fluidización: a) Lecho fijo, b) mínima fluidización, c) expansión del lecho y fluidización homogénea, d) velocidad del lecho mayor a la mínima para generar la fluidización y se presentan burbujas, e) las burbujas crecen uniéndose a otra a medida que suben, mientras, las partículas descienden en zonas cercanas a las paredes, f) se forma una capa inestable empujada por una fuerza similar a un pistón, g) ocurre a altas velocidades, observándose un movimiento turbulento de las burbujas y las partículas y h) cuando las partículas quedan ya fuera del lecho. Fuente: Kunii & Levenspiel (1991).

En un estudio previo, Geldart (1972) observó que no hay efecto de la distribución del tamaño de partículas en la velocidad incipiente de fluidización, pues no se observa un efecto significativo para partículas grupo B, sino que es principalmente influenciado por el tamaño medio de las partículas.



Figura 2.2: Diagrama de clasificación de partículas de fluidización por aire. Fuente: Geldart (1973).

2.2. Modelación de la turbulencia

2.2.1. Flujo turbulento en canales

El parámetro adimensional más usado para determinar si un flujo está en régimen turbulento corresponde al número de Reynolds. En este sentido, el número de Reynolds cuantifica la relación que existe entre la inercia y la viscosidad. En un canal 2D, el número de Reynolds es expresado como:

$$Re_w = \frac{Uh}{\nu} \tag{2.1}$$

donde U es la velocidad media del flujo, h corresponde a la altura de escurrimiento y ν es la viscosidad cinemática. En canales un flujo es turbulento cuando el número de Reynolds del flujo Re_w es mayor a 1000 (Dey, 2014).

Por otro lado, existe otro parámetro adimensional calculado en hidráulica de canales, denominado número de Froude (Fr). Este parámetro relaciona la inercia con la fuerza gravitacional, cuya expresión está dada por:

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gh}} \tag{2.2}$$

Así, cuando Fr < 1 la fuerza gravitacional domina sobre la inercia y se tiene un flujo subcrítico. Cuando Fr > 1 la inercia domina sobre la fuerza gravitacional y el flujo es supercrítico y cuando Fr = 1 se tiene flujo crítico.

2.2.2. Escalas de la turbulencia

La turbulencia es un fenómeno complejo. Sobre la turbulencia existen diversas teorías que permiten explicar simplificadamente cómo ésta funciona. Una teoría sobre la turbulencia es la llamada "cascada de energía", la cual explica que en un flujo turbulento se tienen vórtices de distintos tamaños. Los vórtices más grandes transfieren energía a los más pequeños hasta que la energía cinética turbulenta es disipada como calor (Moukalled *et al.* 2016). Las escalas más pequeñas donde se pueden presentar vórtices son denominadas escalas de Kolmogorov (2.3), las cuales corresponden a:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4}; t_\eta = \left(\frac{\eta}{\epsilon}\right)^{1/2}; u_\eta = (\nu\epsilon)^{1/4}$$
(2.3)

donde η es la microescala de longitud, t_{η} es la microescala de tiempo , u_{η} es la microescala de velocidad, ν es la viscosidad cinemática y ϵ la tasa de disipación de calor. A partir de esta teoría se basan los principales modelos de turbulencia utilizados hoy en día.

2.2.3. Modelos de turbulencia

Basado en la teoría presentada anteriormente, los principales modelos de turbulencia son:

- Direct Numerical Simulation (DNS): Resuelve numéricamente y directamente la ecuación de Navier-Stokes en todas las escalas de la turbulencia, con un tamaño de grilla espacial menor a la escala de Kolmogorov ($\Delta x < \eta$). Por esto, este tipo de modelación requiere recursos computacionales bastante altos, por lo que reduce su aplicación a pequeños problemas de escala de laboratorio (Moukalled *et al.*, 2016).
- Large Eddy Simulation (LES): Resuelve numéricamente y directamente las ecuaciones de Navier-Stokes en las escalas más grandes y las escalas más pequeñas son modeladas usando modelos empíricos de turbulencia (Moukalled *et al.*, 2016).
- Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS): Se basa en que en la turbulencia hay fluctuaciones pseudo-aleatorias en su comportamiento, por lo que la velocidad y la presión pueden descomponerse mediante un promedio y su fluctuación (2.4 y 2.5):

$$u = \overline{u} + u' \tag{2.4}$$

$$p = \overline{p} + p' \tag{2.5}$$

En este modelo, se quiere rescatar la componente media de estas expresiones, por lo que se realiza un promedio de las ecuaciones de Navier-Stokes sobre la turbulencia. Al realizar este promedio se obtienen términos llamados esfuerzos turbulentos o de Reynolds. Estos esfuerzos le agregan más incógnitas al problema, en consecuencia, se tienen que estimar mediante modelos de cierre de la turbulencia. Algunos modelos de cierre conocidos son el modelo de longitud de mezcla, el modelo $k - \omega$ y el modelo $k - \epsilon$ (Moukalled *et al.*, 2016).

2.2.4. Modelo $k - \epsilon$

El modelo $k - \epsilon$ es un modelo de cierre de la turbulencia de orden 2, pues contiene dos ecuaciones diferenciales para realizar el cierre de la turbulencia. Una para la energía cinética turbulenta k y otra para la disipación de energía turbulenta ϵ . La ecuación para la disipación de energía turbulenta ϵ . La ecuación para la disipación de energía turbulenta está dada por:

$$\frac{D\epsilon}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} + \mu \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_1 \frac{\epsilon}{k} \frac{\mu_t}{\rho} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{C_2 \epsilon^2}{k} - 2 \frac{\nu \mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_i} \right)^2$$
(2.6)

donde μ_t es la viscosidad dinámica turbulenta, σ_{ϵ} es el coeficiente de Schmidt turbulento para ϵ y C_1 y C_2 son constantes empíricas.

Por otro lado, la ecuación de la energía cinética turbulenta está dada por:

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} + \mu \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \frac{\mu_t}{\rho} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - 2\mu \left(\frac{\partial k^{1/2}}{\partial x_j} \right)^2 - \epsilon$$
(2.7)

donde σ_k es el coeficiente de Schmidt turbulento para k.

Launder & Spalding (1974), usan valores para las constantes los mostrados en la Tabla2.1

Estos mismos valores son utilizados por defecto al utilizar este modelo en OpenFOAM.

2.2.5. Functiones de pared

En flujos turbulentos, como se tienen elevados números de Reynolds, se puede pensar que los esfuerzos viscosos no son importantes. Sin embargo, en las cercanías a una pared esto no es así, pues las velocidades bajan hasta el punto que empiezan a predominar los esfuerzos viscosos por sobre los inerciales. Se definen las variables internas adimensionales u^+ y z^+ de la siguiente manera:

$$z^+ = \frac{z \cdot u_*}{\nu} \tag{2.8}$$

$$u^+ = \frac{u}{u_*} \tag{2.9}$$

A partir de estas variables se definen tres regiones con distintos comportamientos del perfil de velocidades del flujo turbulento. La primera región es la denominada subcapa viscosa, la cual se encuentra en $0 \le z^+ \le 5$; la segunda región es la de amortiguamiento, donde $5 < z^+ \le 30$; finalmente está la región turbulenta, donde $z^+ > 30$ (Dey, 2014). En cada una de estas regiones se cumplen las siguientes distribuciones de velocidades: Subcapa viscosa: Distribución lineal.

$$u^{+} = z^{+} \tag{2.10}$$

• Región de amortiguamiento: Distribución de Spalding.

$$z^{+} = u^{+} + e^{-\kappa B} \cdot \left(e^{\kappa u^{+} - 1} - 1 - \kappa u^{+} - \frac{(\kappa u^{+})^{2}}{2} - \frac{(\kappa u^{+})^{3}}{6} \right)$$
(2.11)

• Región turbulenta: Distribución logarítmica.

$$u^{+} = \frac{1}{\kappa} \ln z + B$$
 (2.12)

donde κ es la constante de von Karman, cuyo valor es 0,41 y B una constante.

En la región logarítmica, dependiendo del tamaño relativo entre el espesor de la subcapa viscosa con la aspereza de la pared, se puede tener pared lisa o pared rugosa. En el primer caso, el espesor de la subcapa viscosa (δ_v) es mayor que la aspereza en la pared (k_s) . En pared rugosa sucede lo contrario. En este sentido, número de corte de Reynolds (R_*) permite clasificar un flujo entre hidrodinámicamente liso, rugoso o en transición (Dey, 2014) y está dado por:

$$R_* = \frac{u_*k_s}{\nu} \tag{2.13}$$

Cuando $R_* \leq 5$ la aspereza de la pared k_s es mucho menor que el espesor de la subcapa viscosa δ_v y se tiene pared lisa. Cuando $5 < R_* < 70$ la aspereza de la pared es del orden del espesor de la subcapa viscosa y se tiene pared en transición. Cuando $R_* > 70$ la aspereza de la pared es mucho mayor que el espesor de la subcapa viscosa y se tiene pared hidrodinámicamente rugosa.

Para pared lisa, la distribución logarítmica está dada por:

$$u^{+} = \frac{1}{\kappa} \ln z^{+} + C \tag{2.14}$$

donde C = 5 para pared rugosa:

$$u^{+} = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{k_s}\right) + D \tag{2.15}$$

donde D = 8,5.

Es por las distribuciones mostradas anteriormente que en caso de querer representar adecuadamente un perfil de velocidades en las zonas cercanas a las paredes puede aumentar considerablemente el costo computacional, pues esto significa que se debería calcular a través de celdas cada una de estas regiones. En términos simples, para capturar los efectos que ocurren en la subcapa viscosa, el centro de la primera celda de la malla numérica debería estar localizada aproximadamente en $z^+ = 3$. Para evitar esto es que existen el enfoque de funciones de pared. Las funciones de pared modelan el comportamiento del flujo en las regiones cercanas a la pared, por lo que el centro de la primera celda de la malla numérica podría ubicarse en $z^+ > 30$, tal como se muestra en la Figura 2.3:



Figura 2.3: Esquema de implementación de función de pared. En azul se observa la zona de la primera celda.

En OpenFOAM existen implementadas estas funciones de pared para los modelos de turbulencia, lo cual puede ser revisado en el Anexo C.

2.3. Modelación del movimiento de partículas

Existen diversos modelos numéricos para el estudio del movimiento de partículas. En particular, para el estudio de fluidización de lechos, los más utilizados son los siguientes:

- Discrete Particle Model (DPM): Propuesto por Cundall & Strack (1979), consiste en un modelo numérico que describe el comportamiento de un conjunto de discos o esferas basado en un esquema numérico explícito, donde el movimiento y contacto entre partículas es calculado. Este modelo posee un enfoque Euleriano-Lagrangiano para el fluido y la partícula, respectivamente.
- **Two-Fluid Model (TFM)**: Propuesto por Gidaspow (1994), supone al fluido y a los sólidos como un continuo. En el TFM las relaciones constitutivas para la fase sólida generalmente se cierran utilizando la teoría cinética de flujo granular. Este modelo posee un enfoque Euleriano-Euleriano y un bajo costo a nivel computacional.

• Multi-phase Particle-in-Cell (MP-PIC): Propuesto por Andrews & O'Rourke (1996), es un modelo que describe el comportamiento de un conjunto de partículas, sin resolver la interacción de cada partícula, sino que resuelve estas interacciones en paquetes de estas de similares características. Estas características similares son representadas mediante una función de probabilidad que depende de la locación espacial de la partícula, su velocidad y su masa. Este modelo posee un enfoque Euleriano-Lagrangiano y un bajo costo a nivel computacional en comparación al modelo DPM (Lu *et al.* 2017).

Para las investigaciones en modelación numérica es importante tener en cuenta el tiempo de cómputo, debido a que un tiempo excesivo de cómputo puede no compensar la precisión del modelo, respecto a un modelo simplificado. Una comparación entre el gasto computacional entre distintos métodos Euleriano-Lagrangianos se puede observar en la Figura 2.4 (Lu *et al.* 2017).



Figura 2.4: Velocidad de cómputo para distintos métodos de seguimiento de partículas. Fuente: Lu *et al.* 2017.

En azul, se puede observar el tiempo requerido en el cálculo de la fase continua y en negro el de las partículas, respecto al tiempo de cómputo total. La Figura 2.4 muestra que el gasto computacional en las simulaciones con el modelo DPM (o CFD-DEM, equivalentemente) es mucho mayor respecto al modelo MP-PIC, principalmente debido a que el tiempo de cálculo en las partículas es menor en este último modelo.

2.4. Otros estudios numéricos

Actualmente existen diversos estudios numéricos en OpenFOAM asociados al movimiento de partículas por la acción de un fluido. Se pueden nombrar por ejemplo estudios de fluidización, socavación y modelos de arrastre de sedimentos. Greifzu *et al.* (2015) realizan una evaluación de modelos de rastreo de partículas en los softwares OpenFOAM y Ansys con datos experimentales. En este estudio se muestra que en un caso OpenFOAM sobreestima la dispersión y predice levemente menores velocidades de las partículas en comparación a los datos experimentales. Por otro lado, Liu & García (2008) realizaron un estudio numérico de socavación local mediante un modelo tridimensional con el uso de este software. En este trabajo concluyen que obtienen resultados prometedores haciendo uso de utilización de malla deformable. Li *et al.* (2017) realizaron una modelación usando DPM para estudiar el efecto de la grilla en el rendimiento del modelo y se prueban modelos de cierre para el coeficiente de arrastre de sedimentos. En este estudio, los investigadores concluyen que para el movimiento de una partícula es adecuado utilizar celdas, de al menos 1.67 veces el tamaño del diámetro de las partículas (Figura 2.5).



Figura 2.5: Comparación entre la posición de las partículas para distintas razones entre tamaño de celda y partícula. (a) antes de 0.3 s (b) después de 0.3 s. Fuente: Li *et al.* (2017).

Un estudio importante respecto al estudio de arrastre de sedimentos en OpenFOAM es el realizado por Sun & Xiao (2016). En este trabajo muestran el desarrollo de una herramienta basada en OpenFOAM y LAAMPS, enfocada en arrastre de sedimento, denominada SediFoam. Al igual que en el presente trabajo, se utiliza un modelo del tipo CFD-DEM y para validar su modelo utiliza datos experimentales de estudios anteriores, mostrando ser una buena aproximación respecto a dichos estudios. Parámetros a destacar de las partículas utilizados en este estudio corresponden al coeficiente de restitución y de fricción, cuyos valores son de 0.97 y 0.1 para dos de los casos estudiados y 0.01 y 0.6 para el otro caso, respectivamente. Un aspecto importante a destacar en SediFoam es que el modelo puede realizar simulaciones con 256 núcleos trabajando en paralelo con una eficiencia mayor a 0.5.

Adicionalmente, existen otras investigaciones numéricas asociados al movimiento de partículas estudiadas en otros softwares. Link *et al.* (2008) realizan una evaluación del modelo DPM con datos experimentales medidos mediante rastreo de emisión de positrones (PEPT) en un estudio de lecho fluidizado. En este estudio el modelo DPM reproduce de manera precisa las velocidades de la partícula y su RMS (valor cuadrático medio). Por otro lado, en la investigación realizada por Guandalini *et al.* (2015), evalúan una solución similar propuesta en el presente trabajo. En el trabajo de Guandalini *et al.* (2015) se realiza una modelación con Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) con el código SPHERA, cuya modelación consistió en la invección de CO_2 en un lecho de partículas. En este estudio se logran suspender las partículas del lecho para facilitar su arrastre por el flujo longitudinal (Figura 2.6). Estos resultados fueron posteriormente validados de manera experimental en el mismo estudio citado.



Figura 2.6: Resultados numéricos de Guandalini *et al.* (2015) con y sin flujo en 0.2 y 1.2 segundos después de la inyección de CO_2 . Fuente: Guandalini *et al.* (2015).

2.5. Arrastre incipiente

La condición inicial de arrastre de sedimentos es llamada arrastre incipiente (Raudkivi, 1990). Corresponde a la condición hidráulica asociada al umbral de movimiento de las partículas en un lecho. Esta condición puede ser estudiada de manera simplificada mediante un equilibrio entre las fuerzas que actúan sobre las partículas (Figura 2.7) en un lecho de inclinación de ángulo α . Las fuerzas que actúan sobre las partículas principalmente son las fuerzas de arrastre F_a , de sustentación hidrodinámica F_s , el peso sumergido W_s , el roce F_r y la fuerza normal N (Niño, 2013).



Figura 2.7: Fuerzas fundamentales que actúan para la condición de arrastre incipiente. Fuente: Apuntes del curso CI71J- Niño. (2013)

Sabiendo que $F_r = \mu \cdot N$, la condición de arrastre incipiente (2.16) está dada por:

$$F_a + W_s \operatorname{sen} \alpha = \mu(W_s \cos \alpha - F_s) \tag{2.16}$$

La curva de Shields (Figura 2.8) muestra la relación del esfuerzo de corte adimensional τ_* con el número de Reynolds de la partícula Re_{*p} (Ec 2.17) respecto a la condición de arrastre incipiente. El número de Reynolds de la partícula está dado por:

$$Re_{*p} = \frac{u_*d_p}{\nu} \tag{2.17}$$

donde d_p el diámetro de la partícula, ν la viscosidad cinemática y u_* es la velocidad de corte dada por:

$$u_* = \sqrt{ghS} \tag{2.18}$$

donde h corresponde a la altura de escurrimiento y S la pendiente del lecho. Por otro lado, el esfuerzo de corte adimensional es (Ec 2.19):

$$\tau_* = \frac{u_*^2}{gRd_p} \tag{2.19}$$

donde R corresponde a la densidad específica sumergida del sedimento, dada por:

$$R = \frac{\rho_s - \rho}{\rho} \tag{2.20}$$

De esta manera, lo ubicado sobre la curva de Shields presentará movimiento de las partículas, en cambio el resto no mostrará movimiento.



Figura 2.8: Curva de Shields en función de Re_{*p} . Fuente: Apuntes del curso CI71J- Niño (2013).

2.6. Gasto sólido de fondo

Cuando se alcanza el umbral de arrastre incipiente, se tiene un movimiento generalizado del sedimento, el cual es denominado gasto sólido, que puede ocurrir tanto como transporte de fondo, cuando está en constante contacto con el lecho, o en suspensión, cuando permanece de forma prolongada en la columna de agua.

El gasto sólido de fondo puede ocurrir mediante los siguientes mecanismos de transporte: deslizamiento, rotación y saltación, donde éste último mecanismo es el más frecuente. El transporte de fondo, en particular la saltación ocurre en una capa delgada denominada *capa de arrastre de fondo*, cuyo espesor corresponde a aproximadamente dos veces el diámetro del sedimento (Niño & García, 1998). Por otro lado, actualmente existen diversas fórmulaciones empíricas que relacionan el gasto sólido de fondo con el esfuerzo de corte adimensional τ^* y el esfuerzo de corte crítico τ_{*c} . Relaciones clásicas para el cálculo del gasto sólido de fondo son las propuestas por Meyer-Peter & Müller (1948), Engelund & Fredsøe (1976), Ashida & Michiue (1972), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006), dadas respectivamente por:

$$q_s^* = 8(\tau_* - \tau_{*c})^{3/2} \tag{2.21}$$

$$q_s^* = 18,74(\tau_* - \tau_{*c})(\tau_*^{1/2} - 0,7\tau_{*c}^{1/2})$$
(2.22)

$$q_s^* = 17(\tau_* - \tau_{*c})(\tau_*^{1/2} - \tau_{*c}^{1/2})$$
(2.23)

$$q_s^* = 5.7(\tau_* - \tau_{*c})^{3/2} \tag{2.24}$$

$$q_s^* = 3.97(\tau_* - \tau_{*c})^{3/2} \tag{2.25}$$

donde q_s^* corresponde al gasto sólido de fondo adimensional y el esfuerzo de corte crítico adimensional τ_{*c} tiene valores de 0.048, 0.05, 0.05, 0.05 a 0.058 y 0.0495 para estas ecuaciones, respectivamente Niño, 2013.

En la Figura 2.9, se presenta una comparación de las relaciones para el cálculo de gasto sólido de fondo mostradas anteriormente.



Figura 2.9: Comparación entre las relaciones de Engelund & Fredøe, Meyer-Peter & Müller, Ashida & Michiue, Fernandez-Luque & van Beek y Wong & Parker.

Capítulo 3

Modelo numérico utilizado

El modelo numérico es desarrollado en OpenFOAM, el cual es un software con una colección de librerías abierta, gratuita y bajo licencia GNU. En OpenFOAM se pueden resolver, modelar y simular diversos problemas de mecánica de fluidos, reacciones químicas, electromagnetismo y mecánica de sólidos, principalmente mediante el método de volúmenes finitos. En la presente memoria, las simulaciones son realizadas con la librería DPMFoam en la versión OpenFOAM 5.0.

3.1. Descripción de DPMFoam

DPMFoam es una librería de OpenFOAM que utiliza el modelo DPM (Discret Particle Model) para resolver el transporte de partículas y el efecto de éstas en la fase continua. En las ecuaciones que gobiernan el modelo para el caso de la fluidización del lecho, se deben distinguir a aquellas que resuelven la fase continua, el contacto entre partículas y la interacción entre la fase continua y las partículas. Estas ecuaciones son las dadas en las siguientes secciones.

3.2. Fase continua

Se resuelve una ecuación de continuidad (Ecuación 3.1) y momentum (Ecuación 3.2)

$$\frac{\partial \alpha_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c u_c) = 0 \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial(\alpha_c\rho u_c)}{\partial t} + \nabla(\alpha\rho u_c u_c) = -\alpha_c \nabla P + \nabla \cdot (\alpha_c \tau) + F_p + \alpha_c \rho g \tag{3.2}$$

donde τ es el tensor de esfuerzos, P es la presión, u_c la velocidad de la fase continua, α_c es la fracción de volumen no sólida, ρ es la densidad de la fase continua, F_p es el término fuente, que representa la transferencia de momentum del fluido a las partículas, el cual está dado por:

$$F_p = \frac{1}{V_{cell}} \sum_{\text{particle} \in cell} \frac{V_p \beta}{1 - \alpha_c} (u_p - u_{c_p})$$
(3.3)

donde V_{cell} es el volumen de la celda, V_p el volumen de la partícula, u_p es la velocidad de la partícula, u_{c_p} es la velocidad del fluido interpolada a la posición de la partícula y β representa

el coeficiente de transferencia de momentum debido al arrastre, para el cual se usa la relación de Plessis & Masliyah (1991)

$$\beta = \begin{cases} A \frac{\alpha_p^2 \mu_c}{\alpha_c d_p^2} + B \alpha_p \frac{\rho}{d_p} |u_c - u_p| \; ; \; \alpha_c < 0.8 \\ \frac{3}{4} C_D \alpha_p \frac{\rho}{d_p} |u_c - u_p| \alpha_c^{-1.65} \; ; \; \alpha_c \ge 0.8 \end{cases}$$

donde $\alpha_p = 1 - \alpha_c$ es la fracción de volumen sólida y A y B son constantes dadas por:

$$A = \frac{26,8\alpha_c^3}{\alpha_p^{2/3} \left(1 - \alpha_p^{1/3}\right) \left(1 - \alpha_p^{2/3}\right)^2}$$
(3.4)
$$B = \frac{\alpha_c^2}{\left(1 - \alpha_p^{2/3}\right)^2}$$
(3.5)

donde C_D es el coeficiente de arrastre de Shiller & Naumann (1935), expresado por:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24(1+0.15Re_{pt}^{0.687})}{Re_{pt}} ; Re_{pt} < 1000\\ 0.44 ; Re_{pt} \ge 1000 \end{cases}$$

donde Re_{pt} corresponde al número de Reynolds de partícula en DPMFoam, cuya fórmula está dada por:

$$Re_{pt} = \frac{\alpha_p \rho d_p |u_c - u_p|}{\mu_c} \tag{3.6}$$

donde μ_c es la viscosidad dinámica del fluido.

3.3. Partículas

El movimiento de las partículas se calcula mediante la segunda ley de Newton:

$$m_p \frac{du_p}{dt} = \frac{V_p \beta}{1 - \alpha_c} (u_{c_p} - u_p) + m_p g \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p}\right) + F_C + F_s + F_{ma}$$
(3.7)

donde m_p es la masa de la partícula, V_p el volumen de la partícula, F_C es la fuerza de contacto entre las partículas, F_s es la fuerza de sustentación hidrodinámica y F_{ma} es la fuerza de masa agregada.

La fuerza de sustentación hidrodinámica en DPMFoam es calculada como :

$$F_s = C_l \rho \alpha_p \left(u_{c_p} - u_p \right) \times \left(\nabla \times u_{c_p} \right)$$
(3.8)

donde el coeficiente de sustentación hidrodinámica, de acuerdo al modelo Saffman-Mei para partículas esféricas está dado por:

$$C_l = \begin{cases} 6,46 \cdot f(Re_{pt}, Re_w) & ; Re_{pt} \le 40\\ 6,46 \cdot 0,0524 \cdot (\beta_s Re_{pt})^{0,5} & ; 40 < Re_{pt} < 100 \end{cases}$$

donde $\beta_s = 0.5 \frac{Re_w}{Re_{pt}}$, Re_w por le Ec y $f(Re_{pt}, Re_w) = (1 - 0.3314\beta_s^{0.5}) \exp(-0.1Re_{pt}) + 0.3314\beta_s^{0.5}$

Por su parte, la fuerza de masa agregada se calcula como:

$$F_{ma} = C_m \rho V_p \cdot \left(\frac{du_p}{dt} - \frac{du_{c_p}}{dt}\right)$$
(3.9)

donde $C_m = 0.5$.

La fuerza de contacto entre las partículas se descompone en una fuerza normal y tangencial, es decir:

$$F_C = F_{C_n} + F_{C_t} (3.10)$$

donde la fuerza normal es calculada como:

$$F_{C_{nij}} = (-k_n \delta_{nij}^{3/2} - \eta_n u_{ij} \cdot n_{ij}) n_{ij}$$
(3.11)

$$F_{C_{tij}} = -k_t \delta_{tij} - \eta_t u_{sij} \tag{3.12}$$

Por otro lado, la fuerza tangencial es calculada como:

$$F_{C_{tij}} = -\mu_f |F_{C_{nij}}| u_{sij} / |u_{sij}|$$
(3.13)

donde:

$$k_n = \frac{4}{3}\sqrt{r_{eff}}\frac{E}{2(1-\sigma_j^2)}$$
(3.14)

$$k_t = 8\sqrt{r_{eff}\delta_{nij}}\frac{G}{2(2-\sigma)}$$
(3.15)

donde k es la rigidez de la partícula, μ_f es el coeficiente de fricción, n_{ij} es el vector normal de la partícula i a la partícula j, δ es el desplazamiento, E es el módulo de Young, σ es el coeficiente de Poisson, $G = \frac{E}{2(1+\sigma)}$, η es el coeficiente de amortiguamiento y está dado por:

$$\eta_n = \lambda (mk_n)^{1/2} \delta_n^{1/4}$$
(3.16)

donde m es la masa de la partícula, λ es un coeficiente asociado al coeficiente de restitución e de la siguiente manera:

$$\lambda = -0.719 \ln\left(\frac{e+0.08}{1.078}\right) \tag{3.17}$$

donde la Ecuación 3.17 corresponde a un ajuste a datos empíricos.

3.4. Interacción fluido-partículas

La interacción entre las partículas y la fase continua se tiene mediante el término fuente F_p mostrado anteriormente. El coeficiente de transferencia de momentum debido al arrastre β es función del coeficiente de arrastre C_D y éste último del número de Reynolds Re_p . La resolución de esta interacción entre el fluido y las partículas puede ser resuelto mediante acople unidireccional o bidireccional (también conocido en inglés como one-way coupling y twoway coupling). El acople bidireccional resuelve la interacción entre el fluido y las partículas mediante transferencia de momentum del fluido a la partícula y de la partícula al fluido. Por otro lado, el acople unidireccional solo realiza la transferencia de momentum del fluido a las partículas. Ambos mecanismos de acople son explicados por Benra *et al.* (2011), lo cual se ve esquematizado en la Figura 3.1.



Figura 3.1: Algoritmo de *one-way coupling* y *two-way coupling*. Fuente: Modificado de Benra *et al.* (2011).

Cabe destacar que según la revisión de Vinayak *et al.* (2012) a diversos modelos numéricos realizados con DPM, se debe tener en cuenta un adecuado cálculo de la fuerza de arrastre y de las fuerzas interpartículas, debido a que éstas son las que dominan la dinámica de las partículas.

Capítulo 4

Metodología numérica

4.1. Simulaciones a realizar

Para cumplir los objetivos de la memoria, se modela un canal bidimensional (2D) de grandes dimensiones con lecho y sin chorros hasta obtener un régimen permanente (Figura 4.1a). En este caso se realizan 15 simulaciones para distintos valores de esfuerzo de corte adimensional τ_* , se calcula el gasto sólido de fondo y el perfil de velocidades en el canal. El esfuerzo de corte adimensional corresponde al mostrado en la ecuación (2.19), donde la velocidad de corte u_* en un canal 2D está dada por:

$$u_* = \sqrt{Sgh} \tag{4.1}$$

donde S es la pendiente del canal, g la aceleración de gravedad y h la altura de agua. Reemplazando la ecuación (5.3) en la ecuación (2.19), se obtiene que el esfuerzo de corte adimensional en un canal 2D es:

$$\tau_* = \frac{Sh}{Rd_p} \tag{4.2}$$

Los 15 valores de esfuerzos de corte adimensional, se calculan manteniendo fijos los valores de la altura de escurrimiento h en 30 cm y del diámetro de las partículas d_p en 1 mm, variando solo la pendiente del canal. Las configuraciones a realizar se especifican en la Tabla 4.1

Para homogeneizar la definición de régimen permanente, se entenderá que este ocurre cuando la diferencia de velocidades medias en el perfil es menor a un 1% entre un paso de tiempo y otro, considerando que éste es de 0.1 s.

Simulación	$ au_*$	S (%)
1	0.08	0.05
2	10^{-1}	0.06
3	$10^{-0.5}$	0.19
4	$10^{-0,3}$	0.30
5	$10^{-0.25}$	0.34
6	$10^{-0,2}$	0.38
7	$10^{-0.15}$	0.42
8	$10^{-0,1}$	0.48
9	$10^{-0.05}$	0.53
10	10^{0}	0.60
11	$10^{0,1}$	0.75
12	$10^{0,2}$	0.95
13	$10^{0,3}$	1.20
14	$10^{0,4}$	1.50
15	$10^{0,5}$	1.90

Tabla 4.1: Configuraciones de simulaciones a realizar para el caso sin chorros.

Los resultados obtenidos en este caso, se deben contrastar con las relaciones de los autores mostrados en la Figura 2.9 para verificar que el modelo es una buena representación para el cálculo de gasto sólido de fondo. Luego, a partir de estos resultados se obtienen los parámetros para simular el canal con chorros (Figura 4.1b) y se calcula el gasto sólido de fondo y el perfil de velocidades en el canal.



Figura 4.1: Esquema de casos de estudio. (a) Perfil de velocidades y gasto sólido de fondo en canal con lecho. (b) Perfil de velocidades y gasto sólido de fondo en canal con lecho y chorros.

Las simulaciones son realizadas utilizando un acoplamiento bidimensional, o también conocido como two-way coupling.

4.2. Geometría del problema

El canal es modelado como un rectángulo de tamaño de 0.9 metros de largo y 0.3 metros de alto. Se tomó como convención que la dirección del flujo es en el eje Y. La geometría es dividida en cuatro partes, a las cuales se les asignan condiciones de bordes específicas para modelar el canal, cuyos nombres se pueden observar en la Figura 4.2



Figura 4.2: Partes de la geometría del problema. Vista frontal.

Con esta geometría no se obtiene el comportamiento esperado de las partículas, debido a que aquellas ubicadas en el fondo del canal presentaban movimiento y las partículas se movían como un bloque, lo que hizo pensar que la condición de borde en el fondo no se aseguraba. Para lograr que las partículas del fondo no se movieran, se colocaron cuñas de 1 cm x 1 cm equiespaciadas a 30 cm una de otra, tal como se observa en la Figura 4.3



Figura 4.3: Partes de la geometría del problema. Versión final en la cual se hicieron las simulaciones. Vista frontal.

Como se va a mostrar posteriormente, las cuñas sirven para mantener fijas las partículas del fondo y permiten que solo una capa superficial de éstas presenten movimiento.

4.3. Malla numérica

La malla utilizada es del tipo estructurada con tamaño de celda de 2 mm en ambas dimensiones para que ésta sea mayor al tamaño del sedimento, según lo sugerido en el estudio de Li *et al.* (2015) y tal como se puede observar en la Figura 4.4.



Figura 4.4: Malla numérica utilizada, creada utilizando "blockMesh". Vista frontal

La malla numérica contiene 67575 celdas, con 136.384 puntos y 270916 caras. Esta malla es construida a través del módulo "blockMesh" de OpenFOAM, mostrado en el Anexo A.

4.4. Condiciones de borde

4.4.1. Condición de borde de velocidad

Para el caso sin chorros, se utilizó condiciones de borde del tipo cíclica para la entrada y la salida del canal, para simular un canal de grandes dimensiones y obtener el régimen permanente del canal. En el fondo se utilizó la condición de borde de no deslizamiento (Ecuación 4.3), es decir, que la velocidad es nula en las paredes. En la zona superior se usó una condición de borde de gradiente cero (Ecuación 4.4).

$$u|_{z=0} = 0 (4.3)$$

$$\left(\frac{du}{dz}\right)_{z=h} = 0 \tag{4.4}$$

4.4.2. Condición de borde de presión

Para la entrada y la salida del canal se utilizó condiciones de borde del tipo cíclica. Para el resto de la geometría se fijó una condición de borde del tipo fixedFluxPressure, que consiste en fijar la presión de tal forma que se mantenga el valor del flujo especificado en la condicón de borde de velocidades.

4.4.3. Condiciones de borde turbulencia

Para el cierre de la turbulencia se utilizó el modelo $k - \epsilon$. En este modelo, la condición de borde para la viscosidad cinemática turbulenta ν_t está dada por:

$$\nu_t = 0.09 \cdot \frac{k^2}{\epsilon} \tag{4.5}$$

donde k corresponde a la energía cinética turbulenta, la cual es calculada como:

$$k = \frac{1}{2}(\overline{u'}^2 + \overline{v'}^2 + \overline{w'}^2) \tag{4.6}$$

donde u', v' y w' en coordenadas cartesianas corresponden a las fluctuaciones de la velocidad en los ejes x, y y z.

Por otro lado, ϵ corresponde a la tasa de disipación turbulenta y está dada por:

$$\epsilon = 0.09^{3/4} \frac{k^{3/2}}{l} \tag{4.7}$$

$$l = 0.07L$$

donde L es la longitud característica en la entrada, que en este caso corresponde a la altura de escurrimiento del canal.

Las condiciones de borde para la energía cinética en la entrada del flujo, están dadas por:

$$k = \frac{3}{2} \left(UI \right)^2 \tag{4.8}$$

donde U es la velocidad media de entrada e I corresponde a la intensidad de la turbulencia, donde un valor comúnmente utilizado para este parámetro en problemas de contornos abiertos es una intensidad de 0,05 (Maric *et al.*, 2014).

4.5. Condición inicial del lecho

El modelo inicialmente fue realizado con un lecho de un espesor de 5 cm, pero esto se cambió debido a que gran parte del costo computacional del modelo corresponde al cálculo de las interacciones con las partículas (Lu *et al.* 2017). Es por esto, que se decidió utilizar un lecho de espesor de 2.5 cm, tal como se muestra en la Figura 4.5



Figura 4.5: Condición inicial del lecho.

Con esta configuración, se tienen 22170 partículas en el lecho.

4.6. Discretización temporal

Para asegurar la estabilidad de los modelos numéricos con esquemas explícitos, Open-FOAM calcula el número de Courant (C_o) para cada una de las celdas de la malla numérica, el cual en el programa está definido de la siguiente manera:

$$C_o = 0.5 \cdot \left(\frac{\phi}{V_{cell}}\right) \cdot \Delta t \tag{4.9}$$

donde ϕ es el flujo que pasa por las celdas, V_{cell} es el volumen de la celda y Δt es la discretización temporal utilizada. Un modelo con esquema explícito es estable cuando el número de Courant es menor que 1, por lo que la discretización temporal es elegida de tal forma que esta condición se asegure. Dichas discretizaciones temporales se muestran en la Tabla 4.6. En algunas librerías de OpenFOAM, la discretización temporal se ajusta automáticamente durante la simulación para asegurar un número de Courant menor que 1. Los valores obtenidos de número de Courant, con las discretizaciones temporales mostradas en la Tabla 4.6, estuvieron entre 0.3 y 0.9.

Simulación	$ au_*$	Δt (s)
1	0.08	$5 \cdot 10^{-3}$
2	10^{-1}	$5\cdot 10^{-3}$
3	$10^{-0.5}$	$5\cdot 10^{-3}$
4	$10^{-0,3}$	$1\cdot 10^{-3}$
5	$10^{-0.25}$	$1\cdot 10^{-3}$
6	$10^{-0,2}$	$1\cdot 10^{-3}$
7	$10^{-0.15}$	$1\cdot 10^{-3}$
8	$10^{-0,1}$	$1\cdot 10^{-3}$
9	$10^{-0.05}$	$1\cdot 10^{-3}$
10	10^{0}	$1\cdot 10^{-3}$
11	$10^{0,1}$	$1\cdot 10^{-3}$
12	$10^{0,2}$	$1\cdot 10^{-3}$
13	$10^{0,3}$	$1\cdot 10^{-3}$
14	$10^{0,4}$	$1\cdot 10^{-3}$
15	$10^{0,5}$	$5\cdot 10^{-4}$

Tabla 4.2: Discretización temporal utilizada en las simulaciones.

4.7. Parámetros del modelo DPM

Los parámetros utilizados en el modelo DPM son mostrados en la Tabla 4.3. Los valores del coeficiente de restitución y fricción corresponde a valores usados en simulaciones realizadas por Sun & Xiao (2016).

Parámetro	Unidad	Valor
Densidad partículas ρ_s	kg/m^3	2650
Diámetro partículas d_p	mm	1
Coeficiente de restitución e	-	0.97
Coeficiente de fricción μ_f	-	0.1
Módulo de Young E	Pa	$1 \cdot 10^8$

Tabla 4.3: Parámetros utilizados en el modelo DPMFoam.

4.8. Determinación del gasto sólido de fondo

Para el cálculo del gasto sólido de fondo, se utiliza la siguiente fórmula:

$$q_s = \delta \langle u_p \rangle \alpha_p \tag{4.10}$$

donde δ corresponde a un espesor similar a la capa de arrastre de fondo definida por Niño & García (1998), el cual se ve esquematizado en la Figura 4.6). Por otro lado, $\langle u_p \rangle$ corresponde a la velocidad promedio de las partículas en esta capa de arrastre de fondo y α_p es la fracción volumétrica de sólidos.



Figura 4.6: Esquema de cálculo del gasto sólido de fondo. El color azul indica una baja velocidad de las partículas y el color rojo una velocidad alta.

De esta manera, el gasto sólido de fondo adimensional será calculado como:

$$q_s^* = \frac{q_s}{\sqrt{gRd_p^3}} = \frac{\delta\langle u_p \rangle \alpha_p}{\sqrt{gRd_p^3}} \tag{4.11}$$
Capítulo 5

Resultados

Las simulaciones mostradas a continuación fueron realizadas en la versión 5.0 de Open-FOAM y enviadas para correrse en el National Laboratory for High Performance Computing (NLHPC) del Centro de Modelamiento Matemático. Cada simulación fue realizada con 6 núcleos trabajando en paralelo, de acuerdo a la prueba de escalamiento mostrada en el Anexo B.

5.1. Características del flujo

Las simulaciones fueron realizadas hasta obtenerse un régimen permanente, debido a que las simulaciones parten con condición inicial de un perfil con velocidades nulas. Como se definió anteriormente, este régimen iba a ser considerado así cuando la diferencia de velocidades medias entre dos pasos de tiempo de 0.1 s fueran menor a un 1%. En la Tabla 5.1, se presenta el tiempo en que fue alcanzado el régimen permanente para cada simulación.

Simulation	$ au_*$	Regimen permanente (s)
1	0.08	54.0
2	10^{-1}	44.1
3	$10^{-0.5}$	37.6
4	$10^{-0,3}$	34.3
5	$10^{-0.25}$	33.1
6	$10^{-0,2}$	24.3
7	$10^{-0.15}$	47.2
8	$10^{-0,1}$	43.8
9	$10^{-0.05}$	44.0
10	10^{0}	31.0
11	$10^{0,1}$	35.0
12	$10^{0,2}$	30.5
13	$10^{0,3}$	45.3
14	$10^{0,4}$	44.0
15	$10^{0,5}$	32.4

Tabla 5.1: Tiempo en que se alcanza el régimen permanente del flujo.

A partir de lo mostrado en la Tabla 5.1, no se puede observar un comportamiento que permita predecir en qué tiempo de simulación se tiene régimen permanente. Al menos, de lo presentado, no hay una correlación entre el tiempo en que se obtiene el régimen permanente con el esfuerzo de corte adimensional.

Por otro lado, parámetros que son importantes de caracterizar en canales, corresponden al número de Reynolds, de Froude, la velocidad de corte, entre otros. En la Tabla 5.2, se presentan parámetros de los flujos simulados en régimen permanente.

Simulación	$u_* (m/s)$	Re_{*p}	Re_w	F'r
1	0.04	36	34650	0.08
2	0.04	40	40975	0.09
3	0.07	72	65450	0.14
4	0.09	90	94600	0.21
5	0.10	95	95425	0.21
6	0.10	101	102300	0.23
7	0.11	107	108350	0.24
8	0.11	113	115775	0.26
9	0.12	120	117975	0.26
10	0.13	127	147675	0.33
11	0.14	142	165550	0.37
12	0.16	160	210100	0.47
13	0.18	180	279950	0.62
14	0.20	201	452925	1.00
15	0.23	226	688875	1.53

Tabla 5.2: Características del flujo obtenido en las simulaciones en régimen permanente.

De esta manera, 13 de las 15 simulaciones realizadas tienen régimen subcrítico y solo dos presentan régimen supercrítico, debido a los números de Froude Fr calculados en las simulaciones. Adicionalmente, todas las simulaciones presentan régimen turbulento, debido a que su número de Reynolds Re_w es mayor a 1000. La velocidad de corte tuvo valores que rondan de los 0.36 a los 2.26 m/s.

Para determinar el perfil de velocidades en el canal, primero se determinó el tramo logarítmico y se ajustaron los valores a:

$$u = a \ln z + b \tag{5.1}$$

donde $a \ge b$ son los valores a obtener de los ajustes.

A partir de esto, se puede obtener $u_* = \kappa \cdot a$ y con esto $R_* = \frac{u_*k_s}{\nu}$ determinó el tipo de pared del flujo tomando $k_s = d_p$. Los valores obtenidos se pueden observar en la Tabla 5.1.

Simulación	a	b	$u_* (m/s)$	R_*
1	0.08	0.29	0.03	32.8
2	0.09	0.34	0.04	36.9
3	0.15	0.55	0.06	61.5
4	0.21	0.78	0.09	86.1
5	0.21	0.79	0.09	86.1
6	0.22	0.85	0.09	90.2
7	0.24	0.9	0.10	98.4
8	0.25	0.95	0.10	102.5
9	0.25	0.96	0.10	102.5
10	0.31	1.19	0.13	127.1
11	0.33	1.32	0.14	135.3
12	0.41	1.64	0.17	168.1
13	0.48	2.06	0.20	196.8
14	0.57	2.88	0.23	233.7
15	0.79	4.19	0.32	323.9

A partir de esto, se evidencia que las primeras cuatro simulaciones tienen pared transición lisa-rugosa y las siguientes presentan pared hidrodinámicamente rugosa.

Al observar los valores de u_* obtenidos del ajuste al perfil de velocidades (Tabla 5.1) con respecto a los valores de la Tabla 5.2 se puede notar una leve diferencia entre ambas, la cual se muestra en la Tabla 5.3.

Tabla 5.3: Diferencia entre la velocida	ad de corte obtenic	da del ajuste al perfi	l de velocidades
con el obtenido de canal con flujo uni	forme		

Simulación	$u_{*_{per}}$ (m/s)	$u_{*_{cal}}$ (m/s)	$\frac{u_{*per}}{u_{*cal}}$
1	0.03	0.04	1.10
2	0.04	0.04	1.09
3	0.06	0.07	1.16
4	0.09	0.09	1.04
5	0.09	0.10	1.11
6	0.09	0.10	1.12
7	0.10	0.11	1.09
8	0.10	0.11	1.11
9	0.10	0.12	1.17
10	0.13	0.13	1.00
11	0.14	0.14	1.05
12	0.17	0.16	0.95
13	0.20	0.18	0.91
14	0.23	0.20	0.86
15	0.32	0.23	0.70

La diferencia de valores mostrados en la Tabla 5.3, son probablemente debido a la naturaleza de cada expresión, la primera velocidad nace de usar el Teorema de Cantidad de Movimiento en flujo uniforme, en cambio, la otra velocidad de corte es calculada ajustando los valores del perfil de velocidades en la región turbulenta.

Por otro lado, cabe destacar que las simulaciones realizadas tomaron en cuenta que en el fondo se utilizó una función de pared que simuló los efectos que ocurren en la subcapa viscosa y en la región de amortiguamiento. Los perfiles de velocidades obtenidos se pueden observar en la Figura 5.1 y Figura 5.2. Estos perfiles de velocidades presentan el eje z adimensionalizado con la altura la aspereza de la pared y por su parte, la velocidad en el canal es adimensionalizada con la velocidad de corte presentada en la Tabla 5.2. Estos perfiles fueron separados en aquellas simulaciones que presentaron arrastre de sedimentos (Figura 5.2) de las que no (Figura 5.1).



Figura 5.1: Perfiles de velocidades adimensionalizados. Comparación de las simulaciones que no mostraron arrastre.



Figura 5.2: Perfiles de velocidades adimensionalizados. Comparación de las simulaciones que mostraron arrastre.

En la Figura 5.1, se puede notar que en las simulaciones que no hubo arrastre no existen diferencias notorias entre los perfiles. Al contrario, en el caso de las simulaciones que presentaron arrastre, los perfiles de velocidad difieren claramente entre sí en su forma.

5.2. Gasto sólido de fondo

En la Tabla 5.4, se muestra el gasto sólido de fondo calculado para 10 simulaciones y los parámetros respectivos para realizar su cálculo. para poder se comparado con las relaciones experimentales mostradas en la Figura 2.9.

Simulación	$ au_*$	S (%)	$\langle u_p \rangle ~({\rm cm/s})$	$\delta~({ m mm})$	α_c	q_s^*
1	0.08	0.05	-	-	-	-
2	10^{-1}	0.06	-	-	-	-
3	$10^{-0,5}$	0.19	-	-	-	-
4	$10^{-0,3}$	0.3	-	-	-	-
5	$10^{-0.25}$	0.34	-			
6	$10^{-0,2}$	0.38	-	-	-	-
7	$10^{-0.15}$	0.42	-	-	-	-
8	$10^{-0,1}$	0.48	1.79	1.1	0.3	0.04
9	$10^{-0.05}$	0.53	2.48	2.6	0.3	0.15
10	10^{0}	0.6	3.23	3.3	0.3	0.26
11	$10^{0,1}$	0.75	4.33	5.8	0.3	0.59
12	$10^{0,2}$	0.95	9.55	6.5	0.3	1.46
13	$10^{0,3}$	1.2	22.66	7.5	0.3	3.98
14	$10^{0,4}$	1.5	62.27	19.3	0.3	28.40
15	$10^{0,5}$	1.9	125.70	26.8	0.3	79.43

Tabla 5.4: Gasto sólido de fondo adimensional para las configuraciones simuladas.

El modelo no presentó arrastre de sedimentos en las simulaciones cuyo esfuerzo de corte adimensional fluctuó de $\tau_* = 0,08$ a $\tau_* = 10^{-0.3}$ (Figura 5.3). A partir de $\tau_* = 10^{-0.1}$ se obtuvo arrastre de las partículas (Figura 5.4). En la Figura 5.5 se muestra una simulación en régimen permanente con arrastre de partículas en una capa de arrastre más o menos bien definida.



Figura 5.3: Situación del lecho del canal para $\tau_* = 0.08$ a los 60 segundos. (a) Vista total del canal y (b) zoom a las partículas. Vistas generadas en Paraview



Figura 5.4: Situación del lecho del canal para $\tau_* = 10^{-0.1}$ a los 60 segundos. (a) Vista total del canal y (b) zoom a las partículas. Vistas generadas en Paraview



Figura 5.5: Situación del lecho del canal para $\tau_* = 1$ a los 40 segundos. (a) Vista total del canal y (b) zoom a las partículas. Vistas generadas en Paraview.

En la Figura 5.3, 5.4 y 5.5, se muestra el lecho del canal representado por partículas esféricas de 1 mm. La velocidad de las partículas está representada en una escala de colores, donde el color azul indica el valor más bajo de velocidades y el rojo el más alto. En particular, en la Figura 5.3, se tiene una situación sin arrastre, lo cual se evidencia con los colores de las partículas. En esta simulación se observan unas peculiaridades en las velocidades de las partículas. En la Figura 5.3b, se puede ver en la zona comprendida entre y = -0.31 m y y = -0.27 m un movimiento de las partículas que se disipa en el tiempo y luego vuelve a aparecer. Este comportamiento se observa en ciertos instantes en todas las simulaciones realizadas, sin conocer exactamente su naturaleza, que a pesar de ser velocidades bastante bajas, serían interesantes de analizar. Por otro lado, se observa arrastre generalizado de las partículas en la parte superficial del lecho en la simulación con $\tau_* = 1$ mostrada en la Figura 5.5. En este caso se observa claramente una capa de arrastre en la parte superficial del lecho, cuyo espesor ronda los 3 mm. En la Figura 5.4, se observa la primera simulación que pre-

sentó arrastre de partículas, la cual se definió como la simulación a la cual a partir se obtuvo arrastre incipiente.

A partir de los resultados obtenidos se realiza una comparación con las relaciones experimentales de Meyer-Peter & Müller (1948), Engelund & Fredsøe (1976), Ashida & Michiue (1972), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006), la cual se esquematiza en la Figura 5.6



Figura 5.6: Comparación de las soluciones numéricas obtenidas con las relaciones de Meyer-Peter & Müller (1948), Engelund & Fredsøe (1976), Ashida & Michiue (1972), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006).

La Figura 5.6 muestra a simple vista que las simulaciones no siguen un comportamiento similar a las relaciones de los autores anteriormente mencionados. Sin embargo, es importante notar que los resultados muestran que el esfuerzo de corte adimensional crítico es aproximadamente $\tau_* = 10^{-0.1} = 0.79$. Este valor claramente es mucho mayor que al usado por los autores mencionados anteriormente, pues dichos valores rondan entre $\tau_{*c} = 0.048$ a 0.058. En este mismo sentido, se puede notar que las relaciones de Meyer-Peter & Müller (1948), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006) se pueden expresar de la siguiente forma:

$$q_s^* = a(\tau_* - \tau_{*c})^b \tag{5.2}$$

donde los valores de las constantes $a \ y \ b$ dependen del autor. Teniendo en cuenta este tipo de relación, y tomando el valor de la primera simulación que presentó arrastre, es decir, $\tau_{*c} = 0.79$, se realiza un ajuste a los parámetros, obteniéndose la siguiente relación:

$$q_s^* = 7.18(\tau_* - \tau_{*c})^{1.8} \tag{5.3}$$

con un coeficiente de correlación estadística $R^2 = 0.85$.

Ahora, hay que tener en cuenta que los resultados mostrados en la Tabla 5.4 evidencian que las simulaciones 14 y 15 presentan una peculiaridad. Esto pues el valor de δ , que correspondería al espesor de la *capa de arrastre de fondo*, presentan un valor mucho mayor que el indicado por Niño & García (1998). La capa de arrastre de fondo tiene un espesor de aproximadamente 2 veces el tamaño del diámetro de las partículas según lo indicado por estos autores. Sin embargo, es la última simulación se tiene que este valor es incluso 10 veces mayor. Es por esto, que para tener un análisis distinto de los resultados obtenidos, se ajustan los datos solo con las simulaciones 5, 6, 7 y 8, resultando la siguiente relación:

$$q_s^* = 2.64(\tau_* - \tau_{*c})^{1,1} \tag{5.4}$$

con un coeficiente de correlación estadística $R^2 = 0.93$.

En la Figura 5.7, se muestra una comparación de los resultados numéricos y los ajustes obtenidos en la Ecuación 5.3 y 5.4 con las relaciones de Meyer-Peter & Müller (1948), Engelund & Fredsøe (1976), Ashida & Michiue (1972), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006).

En la Figura 5.7, observa que el ajuste que no utilizó las simulaciones 14 y 15 (Ecuación 5.4) muestra un mejor comportamiento visualmente en comparación al ajuste que sí tomó en cuenta estas simulaciones (Ecuación 5.3). Sin embargo, ambas subestiman el gasto sólido de fondo para valores menores de τ_* .



Figura 5.7: Ajuste de las soluciones numéricas en comparación con las relaciones de Meyer-Peter & Müller (1948), Engelund & Fredsøe (1976), Ashida & Michiue (1972), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006)

5.3. Simulación con chorros

A partir de los resultados obtenidos en la presente memoria, se demuestra que los parámetros utilizados en el modelo numérico lo hacen capaz de poder simular el canal con chorros, a pesar que el modelo sobreestima el arrastre incipiente.

Para la construcción del modelo con chorros, se crean los chorros con las herramientas "topoSet" y "createPatch" de OpenFOAM. Éstas herramientas permiten crear nuevos parches en la geometría para utilizar otras condiciones de borde. Adicionalmente, en este caso, se utiliza como condición inicial los perfiles de velocidades obtenidos en la validación del modelo de arrastre. Para fijar estos valores de velocidades en el perfil, se utiliza la herramienta "set-Fields". En el Anexo A, se tiene una breve explicación de cómo funcionan las herramientas anteriormente mencionadas.

En la Figura 5.8, se observa la situación de la simulación con chorros realizada a los 2.5 segundos. Esta simulación es realizada en un canal de 2.08 m, es decir, más grande que el tamaño utilizado para las simulaciones de validación del modelo de arrastre. Esto pues, en

este caso no se utiliza una condición cíclica como condición de borde de entrada y salida y se utiliza un chorro de agua de velocidad 1 m/s en el eje z hacia arriba. La pendiente del canal es de 0.6%, al igual que la simulación 10.



Figura 5.8: Captura de simulación con chorro. (a) Vista del canal completo y (b) zoom a la zona del chorro

Analizando la zona aguas abajo de donde está actuando el chorro, es decir de 0 a 0.05 (m) aproximadamente, se tienen los siguientes resultados:

0	.o. Gabic	bolluo ue loli	uo para si	manac	Jon con	
	S (%)	$\langle u_p \rangle \ (\mathrm{cm/s})$	$\delta \ (mm)$	α_c	q_s^*	
	0.6	9.1	8.1	0.3	26.74	

Tabla 5.5: Gasto sólido de fondo para simulación con chorro.

El valor de gasto sólido de fondo observado en la Tabla 5.3 es aproximadamente 100 veces mayor al dado por la Tabla 5.4, teniendo en cuenta que se utilizó el mismo perfil de velocidades obtenido para el régimen permanente y la misma pendiente.

Capítulo 6

Conclusiones, recomendaciones y trabajo futuro

6.1. Conclusiones

En relación a las características del flujo, se presentó un régimen turbulento en todas las simulaciones realizadas, evidenciado por los altos números de Reynolds Re_w obtenidos, tal como podría darse en un cauce natural.

Respecto al gasto sólido de fondo se pudo observar una gran diferencia respecto a las relaciones de Meyer-Peter & Müller (1948), Engelund & Fredsøe (1976), Ashida & Michiue (1972), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006). La diferencia más importante entre con las relaciones de estos autores corresponde al esfuerzo de corte adimensional crítico. Esto pues, las simulaciones demuestran que este valor en el modelo podría ser más de un orden de magnitud mayor en comparación a lo obtenido experimentalmente por estos autores. Esto indica que el modelo posiblemente pueda presentar un error en el valor de alguno de sus parámetros. Lo más probable es que este error sea referido a parámetros utilizados en el modelo DPM, debido a que se observa un buen comportamiento respecto a las características del flujo, como se mencionó anteriormente. Los valores utilizados en este caso fueron los mostrados en la Tabla 4.3, probándose también valores de e = 0,3 y $\mu_f = 0,4$, los cuales eran los valores predeterminados en el modelo inicial y no son mostrados en el presente trabajo. No se probaron los valores de e = 0,01 y $\mu_f = 0,6$. Otra posible razón puede estar en la naturaleza del modelo, debido a que este modelo es 2D y probando con un modelo 3D se podría tener un modelo de arrastre mejorado.

Otra de las diferencias respecto a las relaciones mencionadas anteriormente, corresponde a la forma de la curva. Las relaciones de Meyer-Peter & Müller (1948), Fernandez Luque & van Beek (1976) y Wong & Parker (2006) tienen una relación de la forma que se expresa en la Ecuación 5.2. Los ajustes realizados muestran que considerando todas las simulaciones el exponente b es mayor que el obtenidos por estos autores, y en el caso de no considerar las dos últimas simulaciones el exponente b es menor. Por cierto, tiene más sentido considerar lo obtenido en el ajuste de la Ecuación 5.4, pues las simulaciones no consideradas en este caso corresponden a aquellas que el valor de la capa de arrastre alcanza las cuñas utilizadas para mantener las partículas quietas. De cierta forma, la cuña en estos dos últimos casos se puede intuir que perturban el comportamiento de las partículas. Una recomendación adecuada sería utilizar un tamaño de cuñas más pequeños y no así aumentar las partículas en el lecho, debido al alto costo computacional que estas implican.

En relación al tiempo de cómputo de las simulaciones, se puede comentar que este es alto, debido a que las simulaciones fueron realizadas en un modelo 2D y con una cantidad relativamente baja de partículas. Esto es debido principalmente a que el modelo no logra una buena paralelización, pues se obtiene una eficiencia menor a 0.5 después de los 6 núcleos de procesamiento, de acuerdo a lo mostrado en el Anexo D. En cambio, SediFoam desarrollada por Sun & Xiao (2016), logra una buena paralelización al obtener una eficiencia sobre 0.5 corriendo sus modelos con hasta 256 núcleos. Esto podría reducir considerablemente el tiempo de cómputo de las simulaciones y pensar en extender el presente trabajo y su continuación a un modelo a 3D.

Ahora, respecto a la posibilidad de fluidizar el lecho con chorros, se realiza tan solo una simulación. En esta se evidencia que hubo un valor de gasto sólido aproximadamente 100 veces mayor utilizando un chorro de 1 m/s. Este hecho sirve como antecedente para poder realizar trabajos futuros con este mismo modelo de arrastre con otras configuraciones de chorros. Adicionalmente, en base a la revisión bibliográfica realizada, se puede clasificar a las partículas en el grupo D, de acuerdo a la clasificación realizada por Geldart (1972). Esto indicaría que el lecho solo puede fluidizarse a grandes caudales, pero las partículas están también en la zona cercana con las del grupo B como se puede evidenciar observando la Figura 2.2. Adicionalmente, Guandalini *et al.* (2015) muestra que se puede conseguir un aumento en el arrastre de fondo a partir de una solución similar a la mostrada en el presente trabajo.

6.2. Recomendaciones y trabajo futuro

Se puede comentar que estas simulaciones, además del gran costo computacional en cuanto a tiempos de cómputo, las simulaciones, en gran parte, demandan altos recursos de almacenamiento. En palabras simples, los resultados obtenidos de las simulaciones son altamente dependientes de la cantidad de partículas utilizados. Dados estos antecedentes, se recomienda elegir adecuadamente cada cuánto tiempo guardar los resultados de las simulaciones. En la presente memoria los resultados fueron almacenados cada 0.1 s desde el principio de la simulación.

En el presente trabajo se calculó el gasto sólido de fondo mediante la Ecuación 4.10, a pesar de que la idea inicial para determinar el gasto sólido de fondo, era contar las partículas que salían de un cierto volumen de control. Se decidió utilizar en el presente trabajo la Ecuación 4.10 debido a que los resultados en modelos con partículas en OpenFOAM 5.0 presentan la posición de éstas en coordenadas baricéntricas. Estas coordenadas hacen que un rastreo de estas partículas sea difícil. A pesar de que la Ecuación 4.10 permite calcular el gasto sólido de fondo y es dimensionalmente consistente, podría aprovecharse mejor las simulaciones para tener un resultado más exacto.

En el caso de transformar las coordenadas de la posición de las partículas a coordenadas

cartesianas, se propone para el cálculo del gasto sólido de fondo utilizar un volumen de control como el mostrado en la Figura 6.1.



Figura 6.1: Volumen de control para calcular el gasto sólido de fondo.

Este volumen de control se ubicaría aguas abajo de los chorros (Figura 6.1) y tendría un tamaño longitudinal δ tal que:

$$\delta = u_{p_{max}} \cdot \Delta t \tag{6.1}$$

donde $u_{p_{max}}$ es la velocidad máxima de las partículas y Δt es el paso de tiempo en que se ha almacenado la simulación. Este tamaño aseguraría que todas las partículas pasen el volumen de control sin saltarse éste. De esta forma, el gasto sólido volumétrico por unidad de ancho q_s se calcularía como:

$$q_s = \frac{n \cdot \frac{\pi d_p^2}{4}}{t} \tag{6.2}$$

donde n es el número de partículas que salen del volumen de control, d_p el diámetro de las partículas y t es el tiempo transcurrido en que salen las n partículas del volumen de control. Así, el gasto sólido de fondo adimensional sería finalmente calculado como:

$$q_s^* = \frac{q_s}{\sqrt{g \cdot R \cdot d_p^3}} = \frac{n\pi}{4t} \cdot \sqrt{\frac{d_p}{gR}}$$
(6.3)

Es importante destacar que las versiones del programa realizadas por https://www. openfoam.com/ como OpenFOAM v1806, por ejemplo, sí muestran las posiciones de las partículas en coordenadas cartesianas. Sin embargo, en estas versiones no está implementada la condición cíclica para las partículas, razón por la cual no se pudo utilizar este tipo de versiones para realizar las simulaciones.

Bibliografía

ANDREWS, M.J., O'ROURKE P.J. (1996). The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows, *International Journal of Multiphase Flow*, **22** (2), 379-402.

ASHIDA, K. & MICHIUE, M. (1972). Study on hydraulic resistance and bedload transport rate in alluvial streams. *Proceedings of the Japan Society of Civil Engineers*, **1972** (206), 59-69.

BENRA, F., DOHMEN H., PEI J., SCHUSTER S. & WAN B.(2011). A Comparison of one-way and two-way coupling methods for numerical analysis of fluid-structure interactions. *Journal of Applied Mathematics*, vol. 2011, Article ID 853560, 16 pages.

CUNDALL, P. & STRACK, O. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, **29**(1), 47-65.

DEY, S. (2014). Turbulence in Open-Channel Flows. In: Fluvial Hydrodynamics. Geo-Planet: Earth and Planetary Sciences. Springer, Berlin, Heidelberg

ENGELUND, F. & FREDSØE, J. (1976). A Sediment Transport Model for Straight Alluvial Channels. *Hydrology Research*, **7**(5), 293-306.

FERNANDEZ LUQUE, R. & VAN BEEK, R. (1976). Erosion And Transport Of Bed-Load. Journal of Hydraulic Research, 14(2), 127-144.

FERZIGER, J. H. AND PERIC, M. (2001), Computational Methods for Fluid Dynamics, 2nd ed., Springer. 423p.

GELDART, D. (1972). The effect of particle size and distribution on the behaviour of gas-fluidised bed. *Powder Technology*, 6(4), 201-215.

GELDART, D. (1973). Types of gas fluidization. Powder Technology, 7(5), 285-292.

GIDASPOW, D.(1994). Multiphase Flow and Fluidization. 9 - Kinetic Theory Approach. Academic Press. 239-296.

GREIFZU, F., KRATZSCH, C., FORGBER, T., LIDNER, F. & SCHWARZE, R. (2016). Assessment of particle-tracking models for dispersed particle-laden flows implemented in OpenFOAM and ANSYS FLUENT. Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics 10(1), 30-43.

GUANDALINI, R., AGATE, G., MANENTI, S., SIBILLA, S., & GALLATI, M. (2015). SPH based approach toward the simulation of non-cohesive sediment removal by an innovative technique using a controlled sequence of underwater micro-explosions. *IUTAM Symposium* on Particle Methods in Fluid Mechanics, **18**(2015) 28-39.

KUNII, D. & LEVENSPIEL, O. Fluidization Engineering, 2nd Edition. Boston, *Butterworth-Heinemann*, 1991. 491p.

LAUNDER, B.E & SPALDING, D.B (1974). The numerical computation of turbulent flows. . Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **3**(2), 269-289.

LINK, J., DEEN, N., KUIPERS., FAN, X., INGRAM, D., PARKER., WOOD, J. & SE-VILLE, J. (2008). PEPT and discrete particle simulation study of spout-fluid bed regimes. *AIChE Journal*, **54**(5), 1189-1202.

LI, L., LI, B. & LIU, Z.(2017). Modeling of spout-fluidized beds and investigation of drag closures using OpenFOAM. *Powder Technology*. **305**(0032-5910), 364-376.

LIU, X. & GARCÍA, M. (2008). Three-dimensional numerical model with free water surface and mesh deformation for local sediment scour. *Journal of Waterway, Port, Coastal and Ocean Engineering*, **134**(4), 203-217.

LU, L., GOPALAN B. & BENYAHIA, S. (2017). Assessment of different discrete particle methods ability to predict gas-particle flow in a small-scale fluidized bed. *Industrial & Engineering Chemistry Research.* **56**(27), 7865-7876.

MARIĆ, T., HÖPKEN, J. & MOONEY, K. The OpenFOAM Technology Primer, 1st Edition, sourceFlux UG, 2017, 458p.

MEYER-PETER, E. & MÜLLER, R. (1948). Formulas for Bed-Load Transport, *Proceedings*, 2nd Congress I.A.H.R., Stockholm

MOUKALLED, F., MANGANI L. & DARWISH, M. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab, 1st Edition, Springer International Publishing Switzerland, 2016. 791p.

NIÑO, Y. (2013). Apuntes del Curso Transporte Hidráulico de Sólidos, Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile.

NIÑO, Y., & GARCÍA, M. (1998). Experiments on Saltation of Sand in Water. *Journal of Hydraulic Engineering*. **124**(10), 1014–1025.

PLESSIS, J.P. & MASLIYAH, J.H. (1991). Flow through isotropic granular porous media. *Transport in Porous Media.* **6**(3), 207 221. RAUDKIVI, A. (1990) Loose boundary hydraulics. 3rd edition. Pergamon Press, Headington Hill Hall.

SHILLER, L. AND NAUMANN, A. (1935). A Drag Coefficient Correlation. Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure, 77, 318-320.

SUN, R. & XIAO, H. (2016). SediFoam: A general-purpose, open-source CFD–DEM solver for particle-laden flow with emphasis on sediment transport, *Computers & Geosciences*, **0098-3004**(89), 207–219.

VINAYAK S., NIELS G., & KUIPERS J. (2013). Spout fluidized beds: Recent advances in experimental and numerical studies. *Chemical Engineering Science*, **86**(0009-2509), 124-136.

WONG, M. & PARKER, G. (2006). Reanalysis and Correction of Bed-Load Relation of Meyer-Peter and Müller Using Their Own Database. *Journal of Hydraulic Engineering*, **132**(11), 1159 - 1168.

Anexos

Anexo A

Ficheros del modelo en OpenFOAM

OpenFOAM sigue una estructura más o menos definida para todas sus librerías, ordenada por carpetas donde se pueden ingresar las condiciones de borde y los parámetros del modelo. En el caso de la librería DPMFoam, la estructura de carpetas y archivos se ve esquematizada en la Figura A.1.



Figura A.1: Estructura de carpetas y archivos del modelo

A continuación se muestran códigos de algunos archivos importantes para iniciar el modelo numérico.

A.1. Carpeta 0

La carpeta "0" contiene las condiciones iniciales y de borde del modelo.

A.1.1. Condición de borde de velocidad

La condición inicial y de borde de velocidad es ingresada en el archivo "U.water"

```
^{2}_{3}
                                           *- C++
                   F ield
                                       OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
 11
                   O peration
A nd
                                      Version:
                                                  5
                                     Web:
                                                  www.OpenFOAM.org
                   M anipulation
 8
    \*-
 9
   FoamFile
10
    {
                      2.0;
binary;
11
        version
12
        format
13
         class
                       volVectorField;
        location
14
                       "0":
                      U.water;
        object
16 }
17 /
                                               * * * * * * * * * * * * * * * * * * //
            * * *
   11
18
19 dimensions
                       [0 \ 1 \ -1 \ 0 \ 0 \ 0];
20
21
   internalField
                      uniform (0 0 0);
\frac{22}{23}
   boundaryField
24
25
    {
        top
26
        {
27 \\ 28
             type
                                zeroGradient;
        3
29
        bottom
30
        {
                                noSlip:
31
             type
32
        }
33
        walls
34
        ſ
35
             type
                                noSlip;
36
        3
37
        frontAndBack
38
        {
39
             type
                                empty;
40
        }
41
        inlet
42
        {
43
             type
                                cyclic;
44
        3
45
        outlet
46
        {
47
             type
                                cyclic;
48
        }
49
50
   /*
        chorro
51
        ſ
52
53
                               fixedValue;
uniform (0 0 0.1);
             type
             value
53
54
55 */
56 }
57
58
59
                                                    *****
   11
```

A.1.2. Condición de borde de presión

El archivo "p" contiene las condiciones iniciales y de borde de la presión dividida por la densidad del agua $\overline{p}=\frac{p}{\rho}$

```
----*- C++ -*------
2
3
     _____
 4
                 F ield
                                    OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox

  5
  6
  7

                                    Version:
                 0 peration
                                               5
                 A nd
M anipulation
                                  | Web:
                                               www.OpenFOAM.org
         \\/
8
   \*-
9
   FoamFile
10
   {
11
       version
                    2.0;
       format
                    ascii;
13
                     volScalarField;
        class
14
       object
                    p;
15 }
16
   // *
          * *
         ....
                                                                                    * //
17
18 dimensions
                     [0 2 -2 0 0 0 0];
19
```

```
20
21 internalField
                     uniform 0;
22
23
24
25
   boundaryField
        top
26
        {
27
28
            type
                              fixedValue;
                              $internalField;
            value
29
        }
30
        bottom
31
        {
32
                              fixedFluxPressure;
             type
\frac{33}{34}
            value
                              $internalField;
        }
35
        inlet
36
        {
37
            type
                              cyclic;
38
39
        }
        outlet
40
        {
41
42
                              cyclic;
            type
       }
        frontAndBack
43
44
        {
45
                              empty;
            type
46
       }
47 /*
48
        chorro
49
        ł
                              fixedFluxPressure;
50
             type
51
            value
                              $internalField;
51
52
53 */
54 }
55
56 //
        3
                                               *****
      *****
```

A.1.3. Condición de borde para la turbulencia

1

En el archivo "k.water" se ingresan las condiciones iniciales y de borde para la energía cinética turbulenta

```
2
 3
                                        ---*- C++ -*----
 \frac{4}{5}
                   F ield
                                      OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
      \mathbf{X}
 6
7
8
        1
                  0 peration
                                     | Version:
                                                  5
                   A nd
M anipulation
                                                  www.OpenFOAM.org
                                     Web:
          Ń
 9
   \*--
10 FoamFile
11
   {
                      2.0;
ascii;
        version
13
        format
14
        class
                      volScalarField;
        location
                       "0";
16
                      k;
        object
17 }
18 // * * * * * * * * * * * * *
                                            * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //
19
20~{\tt dimensions}
                      [0 \ 2 \ -2 \ 0 \ 0 \ 0];
21
22
   internalField
                      uniform 0.000704773;
23
24
   boundaryField
25
   {
   // Valores U.
26
27
        top
28
        {
            type
value
                               kgBWallFunction:
29
30
                                uniform 0.000704773;
31
        }
        bottom
32
33
        {
\frac{34}{35}
                               kqRWallFunction;
uniform 0.000704773;
             type
             value
36
        }
37
38
        frontAndBack
        {
39
            type
                                empty;
40
        }
41
        inlet
42
        {
                                cyclic;
43
            type
44
        }
45
        outlet
46
        {
47
                               cyclic;
            type
```

48 } 49 50 /* chorro 51 { 52fixedValue; type uniform 0.000704773; 53value 53 54 55 */ 56 57 } 58 59 3 ***** 60 11

En el archivo "epsilon.water" se ingresan las condiciones iniciales y de borde para la disipación de energía cinética turbulenta

```
2
                                     ---*- C++ -*---
 3
     _____
     \\
_\\
                 F ield
                                   OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
 \frac{4}{5}
             1
                 O peration
                                   Version:
                                              www.OpenFOAM.org
 \frac{6}{7}
        11
                 A nd
                                  Web:
                 M anipulation
   Т
         \\/
 8
 9
   FoamFile
10 {
11
       version
                    2.0;
12
       format
                    ascii;
volScalarField;
13
       class
       location
                    "0";
14
                    epsilon;
       object
16 }
17
   // *
                   * * *
                                                 * * * * * * * * * * * * * * * //
18
                    [0 2 -3 0 0 0 0];
19
   dimensions
20
                    uniform 0.000146398;
21
   internalField
22
23 boundaryField
24
25
   // U Boundaries
26
       top
{
27
28
                             epsilonWallFunction;
            type
29
           value
                             uniform 0.000146398;
30
       }
31
       bottom
32
       ł
33
                             epsilonWallFunction;
            type
\frac{34}{35}
            value
                             uniform 0.000146398;
       }
36
       frontAndBack
37
38
       {
            type
                             empty;
39
       }
40
       inlet
41
       {
42
                             cyclic;
            type
       }
43
44 /*
45
        chorro
46
       ſ
                             fixedValue;
47
            type
48
            value
                             uniform 0.000146398;
49
       }
50 */
51 \\ 52
       outlet
       {
53
                             cyclic;
            type
54 \\ 55
       }
   }
56
57
                               11
```

En el archivo "nut.water" se fijan las condiciones iniciales y de borde para la viscosidad cinemática del agua.

```
----*- C++ -*----------
2
     -----
3
     \mathbf{X}
                  F ield
                                     OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
              1
                 O peration
A nd
\frac{4}{5}
       11
              1
                                     Version:
                                                5
             1
                                    Web:
                                                www.OpenFOAM.org
   Т
        11
\frac{6}{7}
                  M anipulation
         \\/
   \*--
8
   FoamFile
9
   {
        version
10
                     2.0:
11
                      ascii;
        format
12
        class
                      volScalarField;
       location
                      "0";
```

```
14
       object
                    nut;
15 }
16 // * *
                                                       * * * * * * * * * * * * //
               * * *
17
18
   dimensions
                    [0 2 -1 0 0 0 0];
19
20 internalField
                    uniform 0.0000005;
21
   boundaryField
22
23
   {
\frac{24}{25}
        top
       ſ
26
                             nutkWallFunction;
            type
27
            value
                             uniform 0.0000005;
28
       }
        bottom
29
30
       {
31
                             nutkRoughWallFunction;
            type
32
            value
                             uniform 0;
33
                             uniform 0:
            Ks
34
            Cs
                             uniform 0.5;
35
       }
36
       inlet
37
       {
38
            type
                             cyclic;
39
       }
40
       outlet
41
       {
42
                             cvclic:
            type
43
       }
44 /*
45
       chorro
46
        £
                             calculated;
47
            type
48
                             uniform 0;
            value
49
       }
50 */
51
        frontAndBack
\frac{52}{53}
       ł
            tvpe
                             empty;
54
       }
55 }
56
57
58
                                           ******
   // ***********
```

A.2. Carpeta constant

A.2.1. Parámetros del modelo DPM

En el archivo "kinematicCloudProperties" se fijan las propiedades de las partículas para el modelo DPM.

```
*- C++
2
   Т
     -----
3
                  F ield
                                     OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
   Т
     \mathbf{N}
       \mathbf{X}
                  O peration
                                    Version:

    \begin{array}{c}
      4 \\
      5 \\
      6 \\
      7 \\
      8
    \end{array}

              1
                                               5
                                               www.OpenFOAM.org
                  A nd
M anipulation
                                    Web:
   1
        11
   \*--
   FoamFile
9
   ł
                     2.0;
ascii;
        version
11
       format
12
        class
                     dictionary;
       location
13
                     "constant":
14
        object
                     particleProperties;
15 }
           16 // *
17
18 solution
19
   {
20
        active
                          true;
21
        coupled
                         true; //true = two way coupling, false = one way coupling
22
       transient
                         ves:
23
        cellValueSourceCorrection off;
24
25
       maxCo
                         1.0;
26
       interpolationSchemes
27
28
       {
29
            rho.water
                              cell;
30
                              cellPoint:
            U.water
31
            mu.water
                              cell;
32
            DUCDt
                               cellPoint;
            curlUcDt
                              cellPoint:
33
34
       }
```

```
35
 36
         averagingMethod dual;
 37
 38
         integrationSchemes
 39
         {
            U
                                Euler:
 40
 41
         }
 42
 43
         sourceTerms
 44
         {
 45
              schemes
 46
             {
 47
                  U
                                semiImplicit 1;
 48
             }
 49
         }
 50 }
51 \\ 52
    constantProperties
53 {
54
                            2650;// Densidad de las particulas
         rho0
 55
         alphaMax
                            0.99;
 56
57
         rhoMin
                           1e-15;
1e-15;
         minParcelMass
 58
         youngsModulus
                            1e8;// Modulo de young
         poissonsRatio
 59
                            0.35;
 60
 61
         constantVolume false;
62 }
 63
 64
    phaseProperties
65 {
 66
         phaseType
                           liquid;
 67 }
68
 69 subModels
 70 {
         particleForces
 71
72
 73 \\ 74
             PlessisMasliyahDrag
              ſ
 75
                  alphac alpha.water; //Coeficiente de arrastre de la fraccion solida
 \frac{76}{77}
             3
             gravity;
 78
79
    // /*
              pressureGradient
 80
              ſ
 81
                  U U.water; //Gradiente de presiones
 82
             3
 83
              virtualMass
 84
              ł
 85
                  Cvm 0.5; //Constante de masa agregada
 86
              }
              SaffmanMeiLiftForce
87
 88
             {
 89
                  U U.water;//Fuerza de sustentacion hidrodinamica
             3
90
 91 // */
92
         }
93
 94
         injectionModels
 95
         {
             model1
96
 97
              {
98
99
                  type
massTotal
                                     manualInjection;
                                     0;
100
                  parcelBasisType fixed;
                   .
nParticle
                                     1;
102
                  SOI
                                     0;
                  positionsFile
U0
103
                                     "kinematicCloudPositions";
104
                                     (0 \ 0 \ 0);
105
                  sizeDistribution
106
                   ł
107
                                    fixedValue:
                       type
108
                       fixedValueDistribution
109
                       ł
                           value 0.001; //diametro de las particulas
110
111
                       }
112
                  }
             }
113
114
         }
\begin{array}{c} 115 \\ 116 \end{array}
         dispersionModel none;
117
         patchInteractionModel localInteraction;
118
119
120
         localInteractionCoeffs
121
         ſ
122
              patches
123
124
                  top
125
                  {
                       type rebound;
e 0.97; //Coeficiente de restitucion (Sun y Xiao)
mu 0.1; // Coeficiente de friccion (Sun y Xiao)
126
127
128
129
                  3
130
```

bottom

```
131
132
                      type rebound; //Se puede elegir entre rebote (rebound), adherida (stick) o escape
133
                      е
                           0.97:
                      mu 0.1;
134
135
                  3
                  frontAndBack
136
137
                  {
138
                      type rebound;
139
                           0.97;
                      е
                      mu 0.1;
140
141
                  3
142
                  inlet
143
                  {
\begin{array}{c} 144 \\ 145 \end{array}
                      type escape;
                  }
146
                  outlet
147
                  {
148
                      type escape;
149
                 }
150
            );
151
        }
152
153
         StandardWallInteractionCoeffs
154
         {
155
156
             type rebound;
                  0.97:
             е
157
             mu 0.1;
158
         3
159
160
         heatTransferModel none;
161
         surfaceFilmModel none;
162
163
164
165
         dampingModel none; //relaxation;
166
         relaxationCoeffs
167
168
         {
169 \\ 170
             timeScaleModel
             ſ
171
                  type nonEquilibrium;
172 \\ 173
                  alphaPacked 0.65;
                  e 0.9;
174
175
176
            }
         }
177 \\ 178
         collisionModel pairCollision;
179
         pairCollisionCoeffs
180
181
         ſ
182
             maxInteractionDistance 0.001;
183
184
             writeReferredParticleCloud no;
185
             pairModel pairSpringSliderDashpot;
186
187
188
             pairSpringSliderDashpotCoeffs
189
190
                  useEquivalentSize
                                        no;
                  alpha
b
191
                                        0.02;
192
                                        1.5;
193
                  mu
                                        0.7;
194 \\ 195
                  cohesionEnergyDensity 0;
                  collisionResolutionSteps 12;
196
             };
197
198
             wallModel wallSpringSliderDashpot;
199
200
             wallSpringSliderDashpotCoeffs
201
             {
202
                  useEquivalentSize no;
203
                  collisionResolutionSteps 12;
204
                  youngsModulus
                                   1e8;
205
                  poissonsRatio
                                  0.23;
206
                                   0.01:
                  alpha
207
                  b
                                   1.5;
208
                  mu
                                   0.7;
209
                  cohesionEnergyDensity 0;
210
             };
211
             U
                   U.water;
213
         }
214
         isotropyModel stochastic;
216
217
         stochasticCoeffs
218
         {
219
             timeScaleModel
220
             ſ
221
                  type isotropic;
                  alphaPacked 0.65;
223
                  e 0.9:
224
            }
225
        }
```

{

226

A.3. Carpeta system

A.3.1. Herramienta blockMesh

Esta herramienta permite crear una malla a través de hexaedros. A partir de ésta se pueden crear mallas incluso circulares. A continuación se presenta el código del archivo "block-MeshDict" para el caso de la malla con cuñas presentada anteriormente.

```
----*- C++ -*-----
2
       -----
 3
       \mathbf{X}
                         F ield
                                                  OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
                    1
                       O peration
A nd
 4
         11
                  1
                                                  Version:
 5
                                                | Web:
                                                                  www.OpenFOAM.org
           11
                 1
 \frac{6}{7}
             \\/
                         M anipulation
    \ * - - ·
 8
    FoamFile
 9
    ł
           version
                             2.0:
                             ascii;
11
           format
           class
                             dictionary;
          object
                             blockMeshDict;
    }
14
15
    17
    convertToMeters 1;
18
19
    vertices
20
    (
21
           (-0.001 - 0.45 0)//0
          ( -0.001 -0.45 0 )//0
( 0.001 -0.45 0 )//1
( 0.001 -0.305 0 )//2
( -0.001 -0.305 0 )//3
( -0.001 -0.45 0.01 )//4
( 0.001 -0.45 0.01 )//5
22
23
24
25
26
27
          ( -0.001 -0.305 0.01 )//7
( -0.001 -0.45 0.3 )//8
28
29
          ( -0.001 -0.45 0.3 )//8
( 0.001 -0.45 0.3 )//9
( 0.001 -0.305 0.3 )//10
( -0.001 -0.305 0.3 )//11
( -0.001 -0.295 0 )//12
30
31
32
33
          (-0.001 - 0.295 0)//12

(0.001 - 0.295 0)//13

(0.001 - 0.095 0)//13

(-0.001 - 0.005 0)//14

(-0.001 - 0.295 0.01)//16

(0.001 - 0.295 0.01)//17

(0.001 - 0.095 0.01)//17
34
35
36
37
38
39
          ( -0.001 -0.005 0.01 )//19
( -0.001 -0.295 0.3 )//20
40
          ( 0.001 -0.295 0.3 )//21
( 0.001 -0.005 0.3 )//22
( -0.001 -0.005 0.3 )//23
42
43
44
45
           ( -0.001 0.005 0 )//24
46
           (0.001 \ 0.005 \ 0)//25
           ( 0.001 0.295 0 )//26
47
          ( -0.001 0.295 0 )//27
( -0.001 0.005 0.01 )//28
48
49
           ( 0.001 0.005 0.01 )//29
50
51
          ( 0.001 0.295 0.01 )//30
( -0.001 0.295 0.01 )//31
           ( -0.001 0.005 0.3 )//32
53
          ( 0.001 0.005 0.3 )//33
( 0.001 0.295 0.3 )//34
55
56
           ( -0.001 0.295 0.3 )//35
          ( -0.001 0.305 0 )//36
( 0.001 0.305 0 )//37
58
59
           ( 0.001 0.45 0 )//38
          ( -0.001 0.45 0 )//39
( -0.001 0.305 0.01 )//40
60
61
62
          ( 0.001 0.305 0.01 )//41
( 0.001 0.45 0.01 )//42
63
           ( -0.001 0.45 0.01 )//43
           ( -0.001 0.305 0.3 )//44
65
          ( 0.001 0.305 0.3 )//45
66
           ( 0.001 0.45 0.3 )//46
67
68
           ( -0.001 0.45 0.3 )//47
```

```
70
 71 blocks
72 (
73 hez
74 hez
75 hez
76 hez
               hex (0 1 2 3 4 5 6 7) ( 1 73 5 ) simpleGrading (1 1 1)//0
hex (4 5 6 7 8 9 10 11) ( 1 73 145 ) simpleGrading (1 1 1)//1
hex (7 6 17 16 11 10 21 20) ( 1 5 145 ) simpleGrading (1 1 1)//2
hex (12 13 14 15 16 17 18 19) ( 1 145 5 ) simpleGrading (1 1 1)//3
hex (16 17 18 19 20 21 22 23) ( 1 145 145 ) simpleGrading (1 1 1)//3
hex (16 17 18 29 28 23 22 33 32) ( 1 5 145 ) simpleGrading (1 1 1)//5
hex (24 25 26 27 28 29 30 31) ( 1 145 5 ) simpleGrading (1 1 1)//5
hex (28 29 30 31 32 33 34 35) ( 1 145 145 ) simpleGrading (1 1 1)//6
hex (36 37 38 39 40 41 42 43) ( 1 73 5 ) simpleGrading (1 1 1)//8
hex (40 41 42 43 44 45 46 47) ( 1 73 145 ) simpleGrading (1 1 1)//10
  77
78
  79
 80
  81
 82
 83
 84 );
 85
 86
        edges
 87
88
        (
       );
 89
 90 boundary
91 (
 92
                top
 93
                {
 94
                        type wall;
 95
                        faces
 96
                        (
 97
                                //(8 9 46 47)
                                (8 9 10 11)
 98
                                (11 10 21 20)
(20 21 22 23)
 99
100
101
                                (23 22 33 32)
                                (32 33 34 35)
103
                                (35 34 45 44)
104
                                (44 45 46 47)
                      );
106
                }
                bottom
108
                ſ
109
                        type wall;
                       faces
(
110
111
112
                                (0 \ 1 \ 2 \ 3)
(3 \ 2 \ 6 \ 7)
113
                                (7 6 17 16)
114
                                (16 17 13 12)
(12 13 14 15)
115
116
                                (15 14 18 19)
117
                                (19 18 29 28)
(28 29 25 24)
118
119
120
                                (24 25 26 27)
121
                                (27 26 30 31)
                                (31 30 41 40)
123
                                (40 41 37 36)
                                (36 37 38 39)
124
125
                       );
126
                }
                inlet
128
                {
129
                        type cyclic; //Condicion ciclica entre inlet y outlet
130
                       neighbourPatch outlet;
131
                        faces
132
                        (
                                (0 1 5 4)
134
                                (4 5 9 8)
                       );
135
136
                }
137
                outlet
138
                {
139
                        type cyclic;
140
                        neighbourPatch inlet;
141
                       faces
142
                       (
                              (39 38 42 43)
(43 42 46 47)
143
144
145
                       );
146
                3
                frontAndBack
147
148
                {
\begin{array}{c} 149 \\ 150 \end{array}
                        type empty;
                        faces
151
                        (
                                (1 2 6 5)//0
(5 6 10 9)//1
153
                                (6 17 21 10)//2
(13 14 18 17)//3
(17 18 22 21)//4
154
156
                                (18 29 33 22)//5
(25 26 30 29)//6
157 \\ 158
159
                                (29 30 34 33)//7
160
                                (30 41 45 34)//8
161
                                (37 38 42 41)//9
                                (41 42 46 45)//10
(0 3 7 4)//0
(4 7 11 8)//1
162
164
```

69**);**

```
(7 \ 16 \ 20 \ 11)//2
166
                   (12 15 19 16)//3
167
                   (16 \ 19 \ 23 \ 20)//4
                   (19 28 32 23)//5
168
169
                   (24 27 31 28)//6
                   (28 \ 31 \ 35 \ 32)//7
170
171
                   (31 40 44 35)//8
172
                   (36 39 43 40)//9
                   (40 43 47 44)//10
173
174
              );
175
         }
176 ):
177
178 mergePatchPairs
179 (
180 );
181
    11
182
```

A.3.2. Herramienta topoSet

Esta herramienta sirve para poder definir una zona que posteriormente será un subparche, dentro de un parche ya creado en el módulo "blockMesh". Esto se realiza creando un "box" que contenga todas las celdas donde quieres crear tu subparche. A continuación se presenta un ejemplo de cómo se creó un subparche para utilizarlo para los chorros y poder asignarle condiciones de borde.

```
----*- C++ -*-----
2
     _____
3
               F ield
                              OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
     11
 4
      ١١
              O peration
                              Version:
                                       5
                                       www.OpenFOAM.org
5
               A nd
                             Web:
 6
               M anipulation
\frac{7}{8}
   \*--
                             _____
  FoamFile
9
   {
      version
                 2.0;
                 ascii;
      format
                 dictionary;
12
       class
      object
                 topoSetDict;
  }
14
15
  11
                      16
17
18
  actions
19
20
   /*
        £
          name injectorHorizontal; //Nombre nuevo parche
22
          aution new; //options: new, add (si es que quiero agregarlo a este "patch")
23
          source boxToFace; //sphereToCell, boxToCell, boxToFace
25
26
          sourceInfo
          £
28
              box (-0.0076 -0.076 -0.001)(0.0076 -0.073 0.449);
29
              //box (-0.0076 -0.076 -0.001)(0.0076 -0.065 0.449);
30
          7
31
      }
32
33
  */
      ſ
34
          name injectorVertical; //Nombre nuevo parche
35
          type faceSet; //Tipo: faceSet, cellSet
36
          action new;
37
          source boxToFace; //sphereToCell, boxToCell, boxToFace
          sourceInfo
38
39
          ſ
40
              box (-0.018 -0.0186 -0.012)(0.018 0.0186 0.0024);
          }
41
42
      }
43 );
44
45
46
   11
                                        ******
```

A.3.3. Herramienta createPatch

Permite convertir en un parche a partir de la zona definida en el módulo topoSet. Acá se asigna el nombre de tu parche al cual se le asignará condiciones de borde. A continuación se presenta un ejemplo de ello.

```
-*- C++
1
2
    -----
3
              F ield
                              OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
   Т
    \mathbf{\Lambda}
            1
4
           1
              0 peration
     \mathbf{N}
                              Version: 5
5
          1
               And
                             | Web:
                                        www.OpenFOAM.org
      \mathbf{V}
              M anipulation
\frac{6}{7}
   Т
       \\/
                             1
  \*-
8
  FoamFile
9
  ſ
10
      version
                 2.0;
11
      format
                 ascii;
12
      class
                 dictionary:
13
                 createPatchDict;
      object
14 }
15 // * * *
                    16
17
  pointSync false;
18
  patches
19
20
21
      {
22
          // Name of new patch
23
          name chorro:
24
25
          // Dictionary to construct new patch from
26
          patchInfo
          ł
27
28
              type patch;
29
          }
30
31
          // How to construct: either from 'patches' or 'set'
32
          constructFrom set;
33
34
          // If constructFrom = set : name of faceSet
35
          set injectorVertical;
36
      }
37
38 );
39
     *****
40 //
```

A.3.4. Herramienta setFields

Esta herramienta permite fijar condiciones iniciales a celdas encerradas dentro de un "box". Esto sirve, por ejemplo, para poder colocar condición inicial un perfil de velocidades ya generado.

```
2
\frac{3}{4}
             F ield
                           | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
    \backslash 
             0 peration
     11
                            Version: 5
5
              A nd
                           Web:
                                    www.OpenFOAM.org
\frac{6}{7}
       \\/
             M anipulation
8
9
  FoamFile
  {
10
      version
                2.0;
                ascii;
11
      format
      class
                dictionary;
      location
13
                 system
14
      object
                setFieldsDict;
15 }
16 // * * * * * * * *
                   17
18 defaultFieldValues
19
  (
      volVectorFieldValue U.water (0 0 0)
20
21 );
23 regions
24
  (
25
      boxToCell
26
      ſ
27
         box (-0.00166 -1.05066 0.002) (0.00166 1.03066 0.004);//box que contiene las celdas
28
         fieldValues
29
         (
30
             volVectorFieldValue U.water (0 0.00279665125 0) //Valor asignado
31
32
             \\al conjunto de celdas contenidas en el box
         );
33
      }
      boxToCell
34
35
      {
36
         fieldValues
38
         (
39
             volVectorFieldValue U.water (0 0.0055856 0)
         ):
40
41
      }
42
      boxToCell
```

```
\begin{array}{r} 43\\ 44\\ 45\\ 46\\ 47\\ 48\\ 49\\ 50\\ 51\\ 52\\ 53\\ 54\\ 55\\ 56\\ 57\\ 58\\ 59\\ 60\\ \end{array}
  {
       (
         volVectorFieldValue U.water (0 0.00711948333333 0)
       );
    }
    boxToCell
    {
       fieldValues
       (
         volVectorFieldValue U.water (0 0.0102951857143 0)
      );
    }
    boxToCell
    {
       61
62
       fieldValues
      (
volVectorFieldValue U.water (0 0.0140517142857 0)
);
63
64
65
    }//sigue ...
```

Anexo B

Escalamiento del modelo

En el presente Anexo, se muestra el comportamiento del modelo en simulaciones en paralelo con distintas cantidades de procesadores. A este concepto se le denomina escalamiento. Dentro de las métricas más conocidas del escalamiento de aplicaciones se encuentran el speedup y la eficiencia del modelo. El speedup permite cuantificar la mejora que se tiene aumentando la cantidad de procesadores trabajando en paralelo y se calcula como el cuociente entre el tiempo con un núcleo respecto al tiempo aumentando la cantidad de procesadores, tal como se muestra en la siguiente ecuación:

$$Speedup = \frac{T_{original}}{T_{mejora}}$$
(B.1)

Por otro lado, la eficiencia corresponde al cuociente del speedup con la cantidad de núcleos.

Las simulaciones de prueba fueron realizadas con el clúster del National Laboratory for High Performance Computing (NLHPC) del Centro de Modelamiento Matemático. Se simuló el canal especificado en el Capítulo 4 y fue simulado con 1, 2, 4, 6 y 8 núcleos, respectivamente para una simulación de duración 1 segundo. Los resultados de las pruebas de escalamiento del modelo se pueden observar en la Figura B.1



Figura B.1: Speedup (en rojo) y eficiencia (en azul) del modelo para simulaciones con distintas cantidades de procesadores trabajando en paralelo.

De acuerdo a la wiki del NLHPC (http://usuarios.nlhpc.cl/index.php/Escalamiento_ de_Aplicaciones), la cantidad de procesadores adecuada corresponde a cuando se obtiene una eficiencia sobre 0.5. Según lo mostrado por la Figura B.1, se concluye que la cantidad óptima de núcleos en paralelo a utilizar son 6.

En las cuentas otorgadas por el NLHPC se cuentan con 40 núcleos de procesamiento, por lo que con una cuenta se podrían simular a la vez 6 simulaciones con 6 núcleos.

Respecto al tiempo de cómputo del modelo se presentará el resultado de procesamiento para la Simulación 8. En este caso, para modelar 60 segundos de flujo en el canal, se tomó un tiempo de cómputo de aproximadamente 11 días con un espesor del lecho de 2.5 cm. En el caso de un lecho de 5 cm el tiempo de cómputo era mucho mayor, casi dos veces el tiempo de cómputo de la configuración anterior. Estos hechos evidencian que este tipo de modelos demandan muchos recursos computacionales.

Anexo C

Tipos de condiciones de borde en OpenFOAM

En OpenFOAM, las condiciones iniciales y de borde del problema se encuentran en la carpeta "0", e incluyen condiciones para la velocidad, la presión y la turbulencia.

Los principales tipos de condiciones de borde en OpenFOAM, pueden ser encontradas en la guía de usuario del software: https://www.openfoam.com/documentation/user-guide/ standard-boundaryconditions.php. Las condiciones de borde utilizadas en el modelo se describen a continuación:

- zeroGradient: Aplica un gradiente de cero desde el centro a la cara externa del volumen.
- noSlip: Es la condición de borde de no deslizamiento, fija velocidad nula en las paredes.
- fixedValue: Mantiene fijo un cierto valor especificado.
- empty: Permite reducir el problema de 3 dimensiones a 2D o 1D.
- fixedFluxPressure: Toma un valor de gradiente de presiones, de tal forma que se mantenga el valor del flujo especificado en la condición de borde de velocidades.
- kqRWallFunction: Fija un valor para la energía cinética turbulenta en las paredes para el modelo $k \epsilon$.
- epsilonWallFunction:Fija un valor para la disipación turbulenta para el modelo $k \epsilon$.
- nutkRoughWallFunction: Condición de borde para la viscosidad cinemática turbulenta para paredes hidrodinámicamente rugosas en el modelo $k \epsilon$. Se debe fijar un tamaño de rugosidad k_s y un coeficiente de rugosidad C_s
- cyclic: Impone una condición cíclica entre un par de bordes de la geometría.

Anexo D

Simulaciones de gasto sólido de fondo

En el presente Anexo, se presentan las velocidades de las partículas de las simulaciones realizadas. Las vistas mostradas son del programa Paraview, el cual permite realizar un postprocesamiento de las simulaciones obtenidas en OpenFOAM cuando ya estaban en régimen permanente.


Figura D.1: Situación del lecho para: (a) $\tau_* = 0,08$, (b) $\tau_* = 10^{-1}$, (c) $\tau_* = 10^{-0.5}$, (d) $\tau_* = 10^{-0.3}$.



Figura D.2: Situación del lecho para: (a) $\tau_* = 1$, (b) $\tau_* = 10^{0,1}$, (c) $\tau_* = 10^{0,2}$, (d) $\tau_* = 10^{0,3}$.



Figura D.3: Situación del lecho para: (a) $\tau_* = 10^{0,4}$, (b) $\tau_* = 10^{0,5}$.



Figura D.4: Zoom de la situación del lecho para: (a) $\tau_* = 1$, (b) $\tau_* = 10^{0,1}$, (c) $\tau_* = 10^{0,2}$, (d) $\tau_* = 10^{0,3}$.



Figura D.5: Zoom de la situación del lecho para: (a) $\tau_* = 10^{0,4}$, (b) $\tau_* = 10^{0,5}$.