

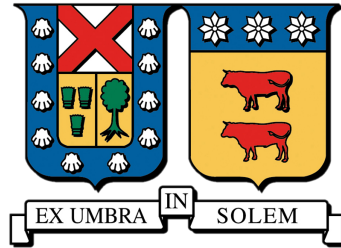
UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA MECÁNICA
VALPARAISO- CHILE

**”SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO
ENTRE PARTÍCULAS PREVIO A LA
COLISIÓN EN FLUIDO NEWTONIANO”**

Samuel Osvaldo Olivares Pinilla

Ingeniero Civil Mecánico

Diciembre - 2021



UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA MECÁNICA
VALPARAISO- CHILE

**”SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO ENTRE PARTÍCULAS
PREVIO A LA COLISIÓN EN FLUIDO NEWTONIANO”**

Memoria de grado presentada por:
Samuel Osvaldo Olivares Pinilla
como requisito parcial para optar al título de
Ingeniero Civil Mecánico

Profesor Guía
Dr. Ing. Romain Gers

Profesor Correferente
Dr. Ing. Olivier Skurtys

TÍTULO DE LA MEMORIA:

**”SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO ENTRE PARTÍCULAS
PREVIO A LA COLISIÓN EN FLUIDO NEWTONIANO”**

AUTOR:

Samuel Osvaldo Olivares Pinilla

TRABAJO DE MEMORIA, presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para el
Título de Ingeniero Civil Mecánico de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Dr. Ing. Romain Gers

Dr. Ing. Olivier Skurtys

VALPARAISO, CHILE, Diciembre - 2021

Agradecimientos

En me- moria
y agradecimiento a mi Fami-
lia, por su infinita paciencia
y cariño. En especial a Cris-
tina, Natividad y Anahís.

Esto es por y pa-
ra ustedes.



Índice general

Agradecimientos	7
1. Introducción	14
1.1. Descripción del Problema	15
1.2. Motivación del Trabajo	16
2. Estado del arte	17
2.1. Marco teórico	17
2.1.1. Hipótesis del Medio Continuo	17
2.1.2. Escalas de Tiempo, Distancia y Velocidad	18
2.1.3. Ecuaciones de Navier-Stokes	18
2.1.4. Adimensionalización de las ecuaciones de N-S	19
2.1.5. Suspensiones y Flujos Bifásicos	21
2.1.6. Colisiones en Fluidos Viscosos	23
2.2. Métodos Numéricos de Modelación	31
2.2.1. Particle-Resolved (DNS)	31
2.2.2. Lagrangian Point-Particle	32
2.2.3. Eulerian Methods	33
2.2.4. DNS con Point-Particle	34
2.3. Acoplamiento de las Ecuaciones	37
2.3.1. One-way Coupling	38
2.3.2. Two-way Coupling	39
2.3.3. Four-way Coupling	41

3. Software Implementado	46
3.1. Introducción ANSYS Fluent	46
3.2. Teoría sobre Modelos Utilizados	48
3.2.1. Modelo de Flujo Laminar	48
3.2.2. Modelo de Viscosidad	49
3.2.3. Malla Dinámica	49
3.2.4. User-Define Functions (UDFs)	50
3.2.5. Condición de Borde: Outflow	52
4. Desarrollo	53
4.1. Introducción	53
4.2. Caso 2D: Aproximación Frontal	56
4.2.1. Geometría	56
4.2.2. Mallado	58
4.2.3. Configuración de Parámetros	59
4.2.4. Resultados	60
4.3. Caso 3D: Aproximación Oblicua	65
4.3.1. Geometría	65
4.3.2. Mallado	67
4.3.3. Configuración de Parámetros	68
4.3.4. Resultados	69
5. Conclusiones	73
5.1. De la Investigación	73
5.2. Del Trabajo Realizado	74
A. Fuerza de Lubricación	76
Bibliografía	81

Índice de figuras

1.1.	<i>Esquema ilustrativo de una partícula sumergida en fluido.</i>	14
1.2.	<i>Esquema de configuración en el proceso de colisión, fuente (Gers et al., 2010).</i>	15
1.3.	<i>Esquema del dispositivo experimental, fuente (Gers et al., 2010).</i>	16
2.1.	<i>Mapa de los regímenes de interacción entre las partículas y la turbulencia.</i>	22
2.2.	<i>Colisión entre partículas (a) Velocidad relativa del centro de la partícula (b) Velocidad relativa de la superficie en el punto de contacto y velocidades angulares respectivas.</i>	24
2.3.	<i>Ilustración de las distintas fases durante una colisión normal contra una pared.</i>	30
2.4.	<i>Acoplamiento de las interacciones sólido-fluido.</i>	37
3.1.	<i>Secuencia de Trabajo para un modelo CDF en ANSYS Fluent.</i>	47
4.1.	<i>Inicialización de Software ANSYS Fluent mediante Prompt.</i>	54
4.2.	<i>User Define Function que detalla el movimiento de la esfera superior, programada en Language C++.</i>	55
4.3.	<i>Geometría de Simulación 2D.</i>	56
4.4.	<i>Mallado de Simulación 2D.</i>	58
4.5.	<i>Perfil Radial de Velocidad en $r = 0.44R$ cuando $\varepsilon = R/3$. Aproximación Frontal.</i>	61
4.6.	<i>Perfil Radial de Velocidad en $r = 0.44R$ cuando $\varepsilon = R/10$. Aproximación Frontal.</i>	62

4.7. Perfil Radial de Velocidad para $\varepsilon = R/3$ y $Re = 33$ cuando . Aproximación Frontal.	63
4.8. Perfil Radial de Velocidad para $\varepsilon = R/10$ y $Re = 10$ cuando . Aproximación Frontal.	64
4.9. Geometría de Modelo 3D.	65
4.10. Modelo en corte de Simulación 3D Plano $x - z$	66
4.11. Mallado de Simulación 3D.	67
4.12. Campo de Velocidad entre las esferas en $\varepsilon = R/10$ y $Re = 29$. Aproximación Frontal $\alpha = 0$	69
4.13. Campo de Velocidad entre las esferas en $\varepsilon = R/10$ y $Re = 29$. Aproximación Oblicua $\alpha = 1$	70
4.14. Campo de Velocidad entre las esferas en $\varepsilon = R/10$ y $Re = 29$. Aproximación Oblicua $\alpha = 1.5$	70
4.15. Campo de Velocidad entre las esferas en $\varepsilon = R/10$ y $Re = 29$. Aproximación Oblicua $\alpha = 2$	71
4.16. Comparación entre resultados obtenidos y (Gers et al., 2010).	72
A.1. Geometría para el modelamiento de la lubricación entre dos partículas.	76

Índice de cuadros

4.1. <i>Tabla de cálculo de tiempos requeridos para comparación de resultados.</i>	57
4.2. <i>Tabla de resultados de tiempos requeridos para comparación de resultados.</i>	66

Capítulo 1

Introducción

En el entendimiento de la dinámica de partículas esféricas se hace conveniente definir los parámetros $\phi_\mu = \frac{\mu_p}{\mu_f}$ y $\phi_\rho = \frac{\rho_p}{\rho_f}$, que definen la relación entre las viscosidades cinemáticas y densidades másicas de las partículas y la fase fluida, respectivamente. Y según estos números se pueden definir y explicar distintas situaciones de interacción partícula-fluido.

1. Si $\phi_\mu \rightarrow 0$ y $\phi_\rho \rightarrow 0$ puede ser el caso de una burbuja inmersa en fase líquida.
2. Si $\phi_\mu \gg 0$ y $\phi_\rho \gg 0$ puede ser el ejemplo de una gota de líquido en inmersa en fase gaseosa.
3. Si $\phi_\mu \rightarrow \infty$ y $\phi_\rho \gg 0$ es en general el modelo de una esfera sólida, siendo este el tema principal de interés.

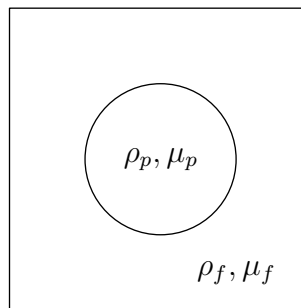


Figura 1.1: *Esquema ilustrativo de una partícula sumergida en fluido.*

El estudio del comportamiento dinámico en la colisión de dos esferas, inmersas en un fluido viscoso en reposo ha sido tema de investigación de muchos autores, en general los números de Reynolds tanto del fluido como de la partícula, son relativamente bajos 1-300.

1.1. Descripción del Problema

En la vida cotidiana, gran parte de la industria y variadas actividades naturales se pueden observar mediante el paradigma de la Mecánica de Fluidos. En el caso particular de este estudio dos esferas sólidas de radios arbitrarios se encuentran sumergidas en un fluido viscoso confinado con pequeñas partículas en suspensión. Dejando una esfera fija en algún punto específico del estanque, se desea que la esfera superior le impacte de forma controlada y de distintas maneras. Pudiendo ser la colisión vía frontal u oblicua, con o sin rotación.

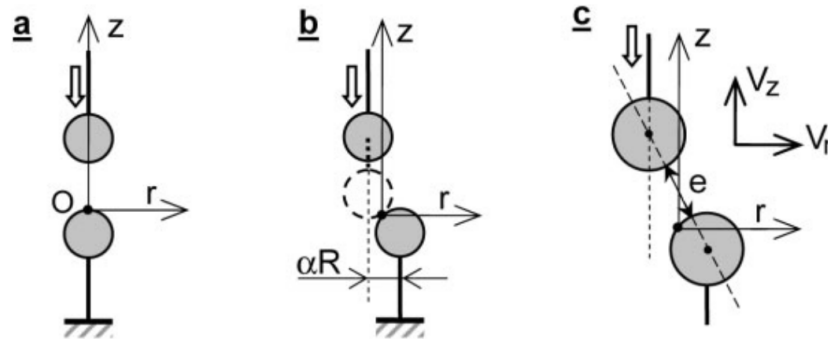


Figura 1.2: Esquema de configuración en el proceso de colisión, fuente (Gers et al., 2010).

A continuación se exhibe el detalle de la configuración y realización del experimento en (Gers et al., 2010).

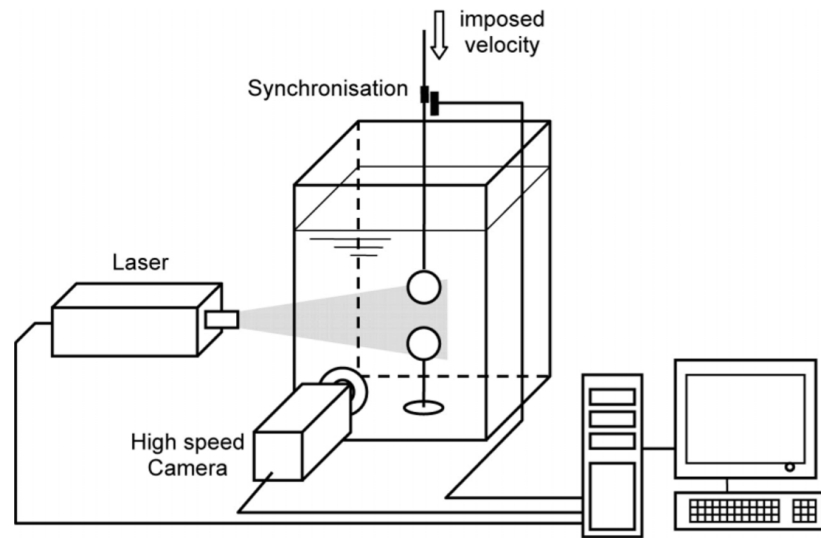


Figure 1. Scheme of the experimental device.

Activar Windows
Ve a Configuración para activar Windows

Figura 1.3: Esquema del dispositivo experimental, fuente (Gers et al., 2010).

1.2. Motivación del Trabajo

En las última décadas se ha reconocido que la molienda con agitación es un proceso efectivo en la producción de nanopartículas en suspensiones concentradas. Sin embargo, el mecanismo físico que conduce a la fragmentación en muchos dispositivos no es comprendido a cabalidad y el proceso de molienda resulta laborioso dada la gran cantidad de energía mecánica que se necesita. Un factor limitante está relacionado con la hidrodinámica al interior de la cámara de molienda, dado que existen dos escalas de longitud muy distintas en el proceso, la longitud de las partículas fragmentadas y las bolas de molienda. Las aplicaciones industriales que contemplan el siguiente estudio fenomenológico son:

- Aplicación en transporte de pulpas mediante tuberías, concentraductos mineros.
- Aplicación en Molinos de Minería, por ejemplo al interior de un SAG.
- Industria Farmacéutica, en la obtención de tamaños de partícula específicos de algunas sustancias.

Capítulo 2

Estado del arte

A continuación se realiza un recuento del Estado del Arte de la problemática descrita previamente. Destacando la teoría y ecuaciones gobernantes de la fenomenología. Se hace mención de los números adimensionales que están presentes en el estudio, las fuerzas de interacción y el acoplamiento de las ecuaciones.

2.1. Marco teórico

2.1.1. Hipótesis del Medio Continuo

A escalas moleculares un fluido está compuesto por partículas de naturaleza discreta, donde la distancia de separación entre ellas suele ser órdenes de magnitud mayor al tamaño mismo de la partícula, de manera práctica se establecen distintas escalas donde se puede ignorar la naturaleza discreta de la partícula fluida y ser considerada como un continuo. La separación de escalas viene dado por el número de **Knudsen**:

$$Kn = \frac{\lambda}{l} \quad (2.1)$$

Donde λ corresponde al *Mean Free Path*, o distancia libre media entre las partículas constituyentes, y l es la *menor* distancia de interés en la descripción fenomenológica. La hipótesis de continuo es en general aceptado para números $Kn \ll 1$.

2.1.2. Escalas de Tiempo, Distancia y Velocidad

Dada la diversidad de escalas que posee el fenómeno en particular, resulta necesario introducir el concepto de *cascada de energía*, según **Richardson**, la energía de los eventos que ocurren en las grandes escalas de longitud, disipan y entregan su energía a las estructuras más pequeñas. Nuevas incorporaciones indicadas por **Kolmogorov** proponen, que para números de Reynolds lo suficientemente altos, el concepto de *hipótesis de isotropía local*, donde los movimientos turbulentos en las escalas pequeñas son estadísticamente isotrópicos, es decir que una escala lo suficientemente pequeña existe similaridad en los movimientos de la partícula fluida. De lo anterior se rescata la idea de que el fundamento del movimiento en las escalas pequeñas se deben principalmente a dos factores, la viscosidad molecular ν y la disipación de energía cinética ϵ . Con los parámetros anteriores es posible entonces realizar un análisis dimensional del problema, y se construyen las denominadas escalas de *Kolmogorov*:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (2.2)$$

$$\tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (2.3)$$

$$u_\eta = (\nu\epsilon)^{1/4} \quad (2.4)$$

Donde η , τ_η y u_η son la escalas de longitud, tiempo y velocidad respectivamente.

2.1.3. Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes provienen de realizar balances de masa y momentum (2^{da} Ley de Newton) sobre una región Ω_f de fluido. En la primera se establece que la masa no se crea ni se destruye, sólo se conserva $D\mathbf{m}/Dt = 0$, y la segunda relaciona la aceleración o variación de momentum por unidad de masa del fluido $D\mathbf{u}/Dt$ con las fuerzas de superficie $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$ y fuerzas de cuerpo \mathbf{b} . Si el flujo es incompresible, es decir con densidad ρ constante, aplicando el **Teorema de Transporte de Reynolds** y el **Teorema de Gauss** sobre el volumen de control,

las ecuaciones se escriben:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} \quad (2.6)$$

Donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el tensor de esfuerzos, cuyo modelo constitutivo para fluidos Newtonianos e incompresibles viene dado por:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right)$$

Ahora considerando la viscosidad cinemática $\nu = \mu/\rho$, finalmente la ecuación de conservación de momentum se reescribe:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla \mathbf{u} = \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{b} \quad (2.7)$$

2.1.4. Adimensionalización de las ecuaciones de N-S

Reescribiendo las ecuaciones de conservación de momentum para un flujo incompresible y Newtoniano, considerando la gravedad, en notación indicial, se tiene:

$$\boxed{\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \rho g_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}}$$

Se definen las variables adimensionales con tamaños característicos respectivos como sigue:

$$t^* = \frac{t}{t_0}; \quad x_i^* = \frac{x_i}{L_0}; \quad u_i^* = \frac{u_i}{u_0}; \quad P^* = \frac{P}{\rho_0 u_0^2}$$

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}; \quad g_i^* = \frac{g_i}{g_0}; \quad \mu^* = \frac{\mu}{\mu_0}$$

Despejando y reemplazando las variables se llega a:

$$\rho_0 \frac{u_0}{t_0} \rho^* \frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + \rho_0 \frac{u_0^2}{L_0} \rho^* u_j^* \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j^*} =$$

$$\rho_0 g_0 \rho^* g_i^* - \rho_0 \frac{u_0^2}{L_0} \frac{\partial P^*}{\partial x_i^*} + \mu_0 \frac{u_0}{L_0^2} \mu^* \frac{\partial^2 u_i^*}{\partial x_j^{*2}}$$

Ahora multiplicando por el término $\frac{L_0}{\rho_0 u_0^2} \frac{1}{\rho^*}$, se obtiene:

$$\mathbf{St} \frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + u_j^* \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} = \frac{1}{\mathbf{Fr}^2} g_i^* - \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial P^*}{\partial x_i^*} + \frac{1}{\mathbf{Re}} \frac{\mu^*}{\rho^*} \frac{\partial^2 u_i^*}{\partial x_j^{*2}}$$

Donde **St** y **Fr** denotan el número de Strouhal y Froude, respectivamente. En lo particular estos números son prescindibles para nuestro estudio.

Número de Reynolds

El número de Reynolds (**Re**) es un número sin dimensiones, definido como:

$$\mathbf{Re} = \frac{\rho_0 u_0 L_o}{\mu_0} = \frac{u_0 L_o}{\nu_0} = \frac{\frac{u_0}{L_o}}{\frac{\nu_0}{L_o^2}} = \frac{\tau_{vis}}{\tau_{adv}}$$

Dichos tiempos característicos τ_{vis} y τ_{adv} , además, denotan el efecto del mecanismo preponderante en la ecuación de conservación de momentum.

- Si $\tau_{vis} \gg \tau_{adv} \Rightarrow \mathbf{Re} \rightarrow \infty$; el efecto viscoso tarda más en la influencia del fenómeno, a diferencia del efecto inercial, el cual al tener un tiempo más pequeño posee mayor incidencia. Aplicando esto a la ecuación adimensionalizada obtenemos la ecuación de **Euler**.
- Si $\tau_{vis} \ll \tau_{adv} \Rightarrow \mathbf{Re} \ll 1$; por tanto el efecto que tiene la viscosidad está por sobre el inercial, así este último mecanismo puede ser despreciado. Aplicando dicha consideración a la ecuación adimensionalizada obtenemos la ecuación de **Stokes**.

Número de Stokes

El número de Stokes (**Stk**) es un número adimensional que caracteriza el comportamiento de partículas suspendidas en un flujo de fluido. Se define como la razón entre el tiempo característico de la fase dispersa (partículas, gotas, burbujas) y un tiempo característico del fluido, o el cociente de la distancia de parada de una

partícula y la dimensión característica de un obstáculo:

$$\text{Stk} = \frac{\tau_p u_0}{L_0}$$

Donde τ_p es la constante de tiempo de disminución exponencial de la velocidad de la partícula debido a una resistencia (arrastre), u_0 es la velocidad del fluido lejos del obstáculo o de la corriente libre, y L_0 es la dimensión característica del obstáculo (en general, y para este estudio un diámetro d_p).

- Una partícula con pequeño número de Stokes, significa que el tiempo en el cual la partícula siente el efecto del fluido es tan bajo, que ésta prácticamente sigue las líneas de corriente del fluido. En dinámica de fluidos experimental, este número, es una medida trazadora del flujo, por ejemplo en la técnica **Particle Image Velocimetry**, se insertan pequeñas partículas en el fluido con bajo tiempo de relajación, y mediante un láser se determina la posición de las partículas, las que a su vez son las líneas de corriente del fluido. Para números de $Stk < 0,1$ el error de precisión en la utilización de partículas como trazadores es inferior al 1 %
- Si el número de Stokes es alto, la inercia de la partícula es dominante respecto del efecto del fluido, siguiendo su trayectoria inicial.

2.1.5. Suspensiones y Flujos Bifásicos

Una suspensión es una mezcla heterogénea formada por una fase sólida o partículas discretas y un medio líquido sobre la cual se dispersan los cuerpos sólidos. Para describir la mezcla es necesario cuantificar las fracciones correspondientes a cada una de las fases existentes. Para ello se define la fracción volumétrica de sólidos Φ_p y de fluido Φ_f

$$\Phi_p = \lim_{\Delta V \rightarrow \Delta V_0} \frac{\Delta V_p}{\Delta V} \quad (2.8)$$

$$\Phi_f = 1 - \Phi_p \quad (2.9)$$

Para distinguir entre los distintos tipos de flujos bifásicos que existen, (Elghobashi, 1994) elabora la siguiente clasificación:

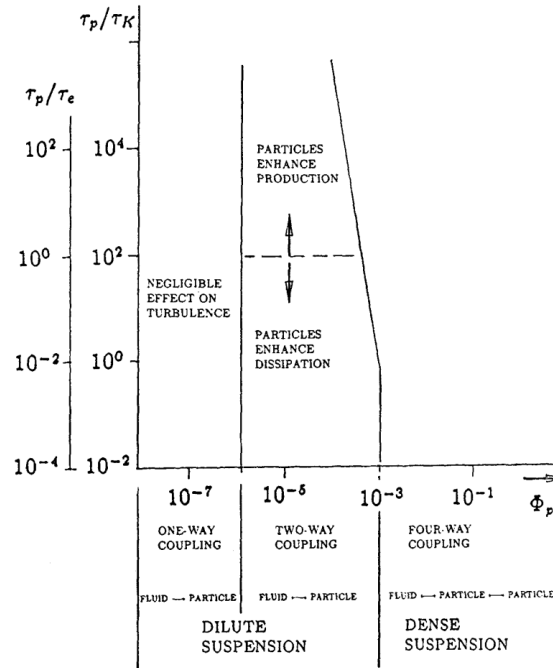


Figura 2.1: Mapa de los regímenes de interacción entre las partículas y la turbulencia.

Donde:

1. τ_p : es el tiempo de respuesta de la partícula $= \frac{\rho_p d^2}{18\rho_f \nu}$, en flujo de Stokes.
2. τ_e : es el tiempo característico de los vórtices de mayor escala.
3. $\tau_K = \tau_\eta$: es la escala de tiempo de Kolmogorov.
 - Para $\Phi_p \leq 10^{-6}$ los efectos de las partículas sobre el fluido son despreciables, denominado acoplamiento de una vía (one-way coupling)
 - Para $10^{-6} \leq \Phi_p \leq 10^{-3}$ el momentum e inercia de las partículas alteran las estructuras sobre el campo de fluido, denominado acoplamiento de dos vías (two-way coupling)

- Para $10^{-3} \leq \Phi_p$ el contenido de material sólido es tal que generan, adicionalmente a la influencia sobre el fluido, colisiones entre las partículas que no pueden ser despreciadas, denominado acoplamiento de cuatro vías (four-way coupling)

2.1.6. Colisiones en Fluidos Viscosos

En esta sección se detalla el proceso normal de colisión entre partículas inmersas en fluido viscoso, el cual está basado en (Kempe y Frohlich, 2012). El fenómeno completo de colisión puede ser dividida en tres fases:

- La **Fase de Aproximación**, en ella las fuerzas hidrodinámicas gobiernan la interacción. La presión en los frentes de las partículas incrementa debido al desplazamiento del fluido.
- La colisión misma toma lugar cuando los dos cuerpos se ponen en “contacto” (la existencia de contacto real entre las esferas es aún motivo de discusión por diversos investigadores). Su deformación, pudiendo ser elástica y/o plástica, es el mecanismo dominante en esta fase. Por tanto las ecuaciones gobernantes corresponden a las del sólido. El tiempo de contacto de la colisión es sustancialmente más pequeño que los tiempos característicos del fluido, es más, las fuerzas del fluido son comparablemente más pequeñas que las del contacto entre las partículas. Por lo tanto en esta fase, la colisión en un fluido viscoso es equivalente a una colisión sin un fluido circulante a su alrededor. Se introduce el término **Dry Collision** o **Colisión Seca** para definir esta fase de la colisión viscosa.
- La tercera y última parte corresponde a la **Fase de Rebote**, al igual que en la fase de aproximación la interacción fluido-partícula es la dominante.

Las fuerzas hidrodinámicas se vuelven bastante grandes en pequeñas separaciones. Además dado que la malla de simulación tiene un tamaño finito, no es posible determinar las fuerzas para distancias entre las superficies del orden o menores a la de un paso espacial de malla. Por tanto se utiliza un **Modelo de Lubricación** en la primera y tercera fase cuando la distancia entre las superficies es pequeña.

- Rapidez relativa normal:

$$g_{n,pq} = \mathbf{g}_{pq} \cdot \mathbf{n}_{pq}$$

- Velocidad relativa normal del centro de partícula:

$$\mathbf{g}_{n,pq} = g_{n,pq} \mathbf{n}_{pq}$$

- Velocidad relativa tangencial:

$$\mathbf{g}_{t,pq} = \mathbf{g}_{pq} - \mathbf{g}_{n,pq}$$

- Velocidad relativa de las superficies en el punto de contacto \mathbf{x}_{pq}^{cp} :

$$\mathbf{g}_{pq}^{cp} = \mathbf{g}_{pq} + R_p (\omega_p \times \mathbf{n}_{pq}) - R_q (\omega_q \times \mathbf{n}_{pq})$$

R_p , R_q , ω_p y ω_q son los radios y velocidades angulares respectivas de cada partícula.

- Si \mathbf{x}_{pq}^{cp} se encuentra alineado entre los centros de masa, la Velocidad relativa normal de las superficies en el punto de contacto:

$$\mathbf{g}_{n,pq}^{cp} = \mathbf{g}_{n,pq}$$

- la Velocidad relativa Tangencial de las superficies en el punto de contacto

$$\mathbf{g}_{t,pq}^{cp} = \mathbf{g}_{pq}^{cp} - \mathbf{g}_{n,pq}$$

- Vector tangente unitario en el punto de contacto:

$$\mathbf{t}_{pq}^{cp} = \frac{\mathbf{g}_{t,pq}^{cp}}{\|\mathbf{g}_{t,pq}^{cp}\|}$$

numéricamente si la componente tangencial es nula, la indeterminación se evade añadiendo un número pequeño en el denominador.

- La distancia normal entre las superficies que colisionan:

$$\zeta_{n,pq} = \|\mathbf{x}_q - \mathbf{x}_p\| - (R_p + R_q)$$

si las superficies son esféricas,

$$\zeta_{n,pw} = (\mathbf{x}_q - \mathbf{x}_w) \cdot \mathbf{n}_w - R_p$$

si es una esfera contra una pared, \mathbf{n}_w y \mathbf{x}_w , son el vector normal que apunta hacia el fluido y un punto arbitrario cualquiera en la pared.

Modelo Físico

De acuerdo a lo anteriormente mencionado la Fuerza sobre la partícula \mathbf{p} para ser modelada durante el proceso de colisión, puede ser descompuesta en:

$$\mathbf{F}_p = \sum_{q,q \neq p}^{N_p} (\mathbf{F}_{pq}^{lub} + \mathbf{F}_{n,pq}^{col} + \mathbf{F}_{t,pq}^{col})$$

Donde \mathbf{F}_n^{col} , \mathbf{F}_t^{col} es la fuerza normal y tangencial durante el contacto de las interfaces y \mathbf{F}^{lub} es el modelo de lubricación empleado en la aproximación y rebote.

El Torque en la partícula generado por las fuerzas tangenciales es:

$$\mathbf{M}_p = \sum_{q,q \neq p}^{N_p} R_p \mathbf{n}_{pq} \times (\mathbf{F}_{t,pq}^{lub} + \mathbf{F}_{t,pq}^{col})$$

Colisiones secas (Dry Collisions) Las colisiones normales en ausencia de fluido, suelen ser descritas mediante la teoría **Hertziana (1882)** de contacto. Que supone cuerpos elásticos y sin fricción en sus superficies. Hertz resuelve la ecuación de elasticidad lineal para cuerpos en contacto y establece la relación existente entre el desplazamiento de los cuerpos y su naturaleza constitutiva, para así obtener la fuerza en la Colisión:

$$\mathbf{F}_n^{col} = k_n (-\zeta_n)^{3/2}$$

en la ecuación anterior k_n corresponde a la rigidez equivalente:

$$k_n = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{R_p R_q}{R_p + R_q}} \left(\frac{1 - \nu_p^2}{E_p} + \frac{1 - \nu_q^2}{E_q} \right)^{-1}$$

Donde ν y E son los módulos de Poisson y Young de las partículas p y q respectivamente. Para determinar el tiempo de colisión T_c , Hertz resolvió la ecuación de movimiento basado en la velocidad relativa de las partículas $g_{n,pq}$. La velocidad de impacto \mathbf{u}_{in} y de rebote \mathbf{u}_{out} vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{in} &= g_{n,pq} \quad (\zeta_n = 0, t = 0); \\ \mathbf{u}_{out} &= g_{n,pq} \quad (\zeta_n = 0, t = T_c) \end{aligned}$$

El tiempo de contacto de acuerdo a la teoría es:

$$T_{c,H} = 3,218 \left(\frac{m_p m_q}{k_n (m_p + m_q)} \right)^{2/5} \mathbf{u}_{in}^{-1/5}$$

m_p y m_q son las respectivas masas de las partículas.

Durante el impacto parte de la energía cinética es disipada en forma de ondas elásticas y en consecuencia no es posible su recuperación en forma de energía cinética en el rebote. El **Coefficiente de Restitución** para colisiones secas se define como la razón entre la velocidad de rebote y de impacto:

$$e_{dry} = - \frac{\mathbf{u}_{out}}{\mathbf{u}_{in}}$$

Colisiones viscosas (Viscous Collisions) Las colisiones secas sólo se dan de manera teórica y en marcos ideales, en la realidad siempre hay un fluido viscoso entre medio de las superficies que impactan. Posteriormente autores como (Legendre et al., 2006) definen el Coeficiente de Restitución efectivo y lo relacionan con el número de Stokes como:

$$e = - \frac{\mathbf{u}_{out,0}}{\mathbf{u}_{in,0}} = e_{dry} \exp[-35/\text{Stk}]$$

donde $\mathbf{u}_{in,0}$ y $\mathbf{u}_{in,0}$ son la velocidades a la distancia $\zeta_{n,0}$ antes y después del rebote. Es importante destacar que por debajo de un Stokes crítico $\mathbf{Stk} \approx 10$ no existirá rebote, hecho predicho por (H. Davis et al., 1986) y ampliamente validado experimentalmente. (Legendre et al., 2006) propone una correlación simple para el tiempo de contacto, que toma en cuenta los efectos inerciales y viscosos del fluido:

$$T_c = T_{c,H} \left(\frac{\rho_p + c_M \rho_f}{\rho_p} \right)^{2/5} \frac{1}{1 - 0,85 \mathbf{Stk}^{-1/10}}$$

Donde $c_M \approx 0,73$ es el coeficiente de masa añadida para una esfera moviéndose hacia una pared en el momento de contacto. El modelo mejorado para el tiempo de colisión puede ser relacionado con el tiempo de relajación de la partícula τ_r , el cual caracteriza el tiempo necesario para que la partícula se adapte a una variación en el campo de velocidad en el fluido. (Legendre et al., 2006) usando la fórmula de **Schiller-Naumann** para el arrastre, estima el tiempo de relajación como sigue:

$$\tau_r = \frac{(\rho_p + c_M \rho_f) d_p^2}{18 \nu_f \rho_f (1 + 0,15 \mathbf{Re}_p^{0,687})}$$

Donde d_p es el diámetro de la partícula. El tiempo de colisión es varios órdenes menor que el tiempo de relajación, en muchos casos típicos $\tau_r / \mathbf{T}_c \sim 10^3$.

Modelos Clásicos de colisión En la literatura existen tres grandes modelos de colisión básicos, a partir de los cuales se construyen modelos más complejos. Estos modelos son los siguientes:

1. **Hard-sphere Model:**

De acuerdo a (F. Foerster et al., 1994) este modelo está basado en las ecuaciones de Newton. Las colisiones no son resueltas en el tiempo, las velocidades de traslación y rotación después de la colisión son obtenidas mediante las leyes de conservación en su forma integral. Consecuencia de lo anterior es que el modelo queda limitado al contacto de sólo dos partículas y el tiempo de contacto es infinitesimalmente pequeño. Posee además coeficientes de restitución para las velocidades normales y tangenciales, y coeficientes de roce en las superficies.

2. Soft-sphere Model:

Según (Cundall y Strack, 1979) el modelo está basado en la forma diferencial de las ecuaciones Newtonianas de movimiento de las partículas. Las colisiones están complemente resueltas en las escalas temporales, lo que permite que el modelo pueda ser empleado en colisiones múltiples. El momentum y desplazamiento de las partículas son obtenidos para tiempos arbitrarios mediante la resolución de ecuaciones diferenciales de movimiento normal y tangencial, para ello se emplea un sistema de **Resortes y Amortiguadores**. En el cálculo se permite que las partículas se superpongan unas con otras, y es en función de dicha penetración, es que se calcula una fuerza de repulsión.

3. Repulsive Potencial:

En fluidos viscosos, el modelo de Potencial Repulsivo propuesto por (Glowinski et al., 1999) es a menudo utilizado. Este modelo no está basado en un razonamiento físico estricto, pero intenta evitar la superposición y penetración de las superficies mediante una fuerza de repulsión normal, que se activa tras sobrepasar cierto umbral de distancia. La expresión de esta fuerza es:

$$\mathbf{F}_{n,pq}^{col} = \frac{1}{\epsilon}(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q) [\max(0, -(\zeta_{n,pq} - \mathcal{S}))]^2$$

Donde ϵ es una constante que depende del problema en estudio, por ejemplo, en el caso de sedimentación de una solución diluida

$$\epsilon = 8 \times 10^{-4} D_p / (\rho_f \mathbf{u}_\infty^2)$$

\mathcal{S} es el rango de la fuerza repulsiva, en general $\mathcal{S} = 2h$.

Modelo de Lubricación Para derivar un modelo analítico de lubricación los autores asumen que la fuerza de lubricación domina el movimiento de la esfera cerca de la pared reduciendo la velocidad en la aproximación y el rebote. En los artículos (Brenner, 1961) y (Cox y Brenner, 1967) obtienen y utilizan la siguiente relación:

$$\mathbf{F}_{pq}^{lub} = \begin{cases} 0, & 2h < \zeta_{n,pq} \\ -\frac{6\pi\nu_f\rho_f g_{n,pq}}{\zeta_{n,pq}} \left(\frac{R_p R_q}{R_p + R_q}\right)^2 \mathbf{n}_{pq} & \zeta_{min}^{lub} \leq \zeta_{n,pq} \leq 2h \\ 0, & \zeta_{n,pq} < \zeta_{min}^{lub} \end{cases}$$

Donde h es la unidad espacial de la malla. Una distancia de *cut-off* ζ_{min}^{lub} es utilizada para prevenir que la fuerza se dispare en la singularidad cuando su valor es cero. Dicha distancia corresponde a la rugosidad natural de la superficie:

$$\zeta_{min}^{lub} = \zeta_{n,c}$$

Ahora, para interacción partícula-pared, con $R_q \rightarrow \infty$ la ecuación anterior se reduce a:

$$\mathbf{F}_w^{lub} = \begin{cases} 0, & 2h < \zeta_{n,w} \\ -\frac{6\pi\nu_f\rho_f g_{n,w}}{\zeta_{n,w}} R_p^2 \mathbf{n}_w & \zeta_{min}^{lub} \leq \zeta_{n,w} \leq 2h \\ 0, & \zeta_{n,w} < \zeta_{min}^{lub} \end{cases}$$

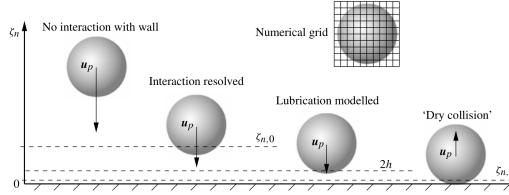


Figura 2.3: Ilustración de las distintas fases durante una colisión normal contra una pared.

En el **Apéndice A** se propone un ejemplo analítico de como obtener la fuerza de lubricación.

2.2. Métodos Numéricos de Modelación

El siguiente inciso sienta sus bases en el artículo científico propuesto por (Kuerten, 2016):

2.2.1. Particle-Resolved (DNS)

Estos métodos resuelven el flujo alrededor de cada partícula, el movimiento que siguen debido a las fuerzas externas y la fuerza hidrodinámica ejercida por el fluido circulante. Dada la necesidad de resolución del flujo en las inmediaciones de la partícula, este método de simulación es sólo posible si el espaciamiento de la malla computacional es comparable al tamaño de la partícula. Esto restringe su aplicación a partículas grandes comparadas con las escalas más pequeñas de la turbulencia y/o a un número pequeño de partículas. En uno de los múltiples métodos de simulación se utiliza una malla esférica adaptativa alrededor de la partícula, algunas veces inserta en un malla cartesiana para todo el dominio computacional. Este método ha sido probado para una sola partícula fija en decaimiento de turbulencia isotrópica y homogénea, ver (Bagchi y Balachandar, 2003) y (Burton y Eaton, 2005). Recientemente el método anterior ha sido aplicado para analizar la extenuación de flujo turbulento isotrópico homogéneo alrededor de un arreglo de 64 partículas fijas de tamaño igual al doble del largo de Kolmogorov y una fracción volumétrica de 10^{-3} , ver (Vreman, 2016). Una extensión de esta técnica para describir partículas en movimiento, no realiza directamente la colisión ocurrida, sino que es conducida por el traslape de la malla esférica de una partícula con otra.

Adicionalmete para burbujas en movimiento se han desarrollado los llamados **Front-Tracking Methods** que permiten simular cientos de burbujas. Para grandes números de partículas en flujo turbulento se ha conseguido simular mediante los **Immersed Boundary Methods**, método que se desarrolla sobre una malla cartesiana en todo el dominio computacional (Uhlmann, 2008). Existen muchas formas de aproximar las condiciones de borde en la superficie de la partícula, para que estas no coincidan con las líneas del mallado computacional.

En (Takagi et al., 2003) y (Zhang y Prosperetti, 2005) se presenta **Physalis** como otra manera de simular flujos con partículas, en la cual se utiliza una solución analítica

para el flujo alrededor de cada una de las partículas. Este método se ha empleado en la descripción de cientos de partículas en turbulencia homogénea.

Lattice-Boltzmann Method es otro ejemplo donde la malla es rectangular y no alineada con la forma de la partícula, también es utilizado para la reproducción de partículas con masa inmersas en fluido (Ladd y Verberg, 2001).

2.2.2. Lagrangian Point-Particle

Todos los métodos anteriormente mencionados están limitados en la modelación de un número bastante pequeño de partículas, que no son pequeñas comparado con la escala de Kolmogorov. Una aproximación estándar utilizada en la simulación de gran número de partícula es llamada **Point Particle Approach**. Donde si el tamaño de la partícula es pequeña comparada con el largo de Kolmogorov, ésta se puede considerar como una partícula puntal, y su desarrollo se remite a la resolución de ecuaciones para cada partícula. Una magnitud de gran importancia en estos métodos es el tiempo de relajación de la partícula, que es el tiempo que le toma a la partícula en ajustarse de manera local al flujo instantáneo. Para tiempos pequeños de relajación una buena aproximación para la velocidad de la partícula es la velocidad local del flujo, en este marco se dice que las partículas actúan como trazadores. Para valores más grandes de tiempo de relajación, las partículas no pueden seguir exactamente el flujo y además de resolver una ecuación cinemática para la posición, se requiere resolver una ecuación de movimiento basada en la segunda ley de Newton para determinar la velocidad de la partícula. Los métodos Lagrangianos poseen distinto nivel de detalle con respecto al movimiento del fluido. Si aparte del flujo alrededor de cada partícula, se resuelven todas las escalas del movimiento de fluido hasta la escala de Kolmogorov, hablamos de Point-Particle Direct Numerical Simulation (DNS). Cabe destacar que en algunas aplicaciones las escalas no resueltas de la velocidad del fluido tiene un efecto sustancial en el movimiento de la partícula, entonces aparte de la implementación de un modelo de sub-malla en las ecuaciones gobernantes del fluido, otra submalla también es requerida para las ecuaciones de movimiento de las partículas. Además, para un flujo donde interviene una sola fase, se puede emplear una descripción estadística de las ecuaciones de Navier-Stokes, las denominadas RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes). Con ellas los esfuerzos

computacionales se reducen considerablemente en el caso donde la turbulencia en el flujo se encuentra estadísticamente desarrollada, esto porque las cantidades asociadas al flujo principal se calculan una sola vez. Las ecuaciones que describen el movimiento de la partícula son resueltas en un paso posterior. Sin embargo para simular el efecto de la turbulencia en las partículas un modelo adicional es necesario, para cuantificar dicho efecto se requiere de un modelo de dispersión de turbulencia estocástico, que usan la información de las soluciones RANS, como el tensor de Reynolds o la energía cinética turbulenta (Burry y Bergeles, 1993) y (Graham y James, 1996). Existen modelos de dispersión estocásticos que se basan en funciones de densidad de probabilidad (Pozorski y Minier, 1999) y (Taniere y Arcen, 2014). Los métodos lagrangianos se distinguen por el nivel de acoplamiento de las partículas con el fluido. Donde si por ejemplo, la fracción volumétrica de partículas es muy pequeña, cada una de las partículas prácticamente no tienen influencia sobre el flujo, esta es la denominada *one-way coupling*. Las otras formas o vías de acoplamiento se tratarán posteriormente.

2.2.3. Eulerian Methods

La aproximación Lagrangiana partícula-puntual se aplica para cuerpos que no son más pequeños comparadas a la escala de Kolmogorov, a pesar de su dudosa validez en este caso. Teóricamente, la única aproximación para simulaciones con alto número de grandes o pequeñas partículas, es mediante un método Euler-Euler. En esta aproximación las partículas no son tratadas de manera individual, sino mediante la concentración y el campo de velocidad. Aparte de las ecuaciones de la fase fluida, se requiere resolver además una ecuación diferencial parcial para la concentración de partículas y la velocidad. La interacción entre el fluido y las partículas tienen que ser tomadas en cuenta mediante dos ecuaciones de momentum (Schwarzkopf et al., 2011). Si las partículas poseen distinto tamaño e interactúan de forma diferenciada en el fluido, se necesita entonces un set de ecuaciones para cada clase de tamaño de partícula. El método Euler-Euler es a menudo utilizado en la simulación de burbujas o lechos fluidizados. Las aproximaciones Eulerianas se desarrollan tanto en DNS como en LES. Euler-Euler DNS ha sido recientemente aplicado por (Masi et al., 2014), quien desarrolló este método para la turbulencia

en flujo con cizalle y partículas con números de Stokes grandes. También existen los métodos de clausura algebraicos basados en momentos estadísticos, que se basan en el formalismo mesoscópico Euleriano, en la cual se divide el campo de velocidad en dos contribuciones. La primera es un campo velocidad Euleriano mesoscópico de la partícula. Y la segunda corresponde a una distribución aleatoria de movimiento de las partículas, Cuasi-Browniano. Especialmente para soluciones diluidas la modelación de esta última contribución resulta crucial para la simulación mediante el método Euleriano. Existe un gran número de papers de simulación numérica bifásica, que usan otras aproximaciones, esta revisión se centra en métodos Point-Particle. Ejemplos de resúmenes que emplean otra forma de aproximación en la simulación multifásica turbulenta se han llevado a cabo por (Balachandar y Eaton, 2010), (Tenneti y Subramaniam, 2014) y también (Toschi y Bodenschatz, 2009) entre otros.

2.2.4. DNS con Point-Particle

Ecuaciones de movimiento de la partícula

La base para casi todas las aplicaciones partícula-puntual son las ecuaciones de (Maxey y Riley, 1983), que son las ecuaciones que describen el movimiento de una partícula esférica dentro de un fluido. Si x_p determina la posición de la partícula p y v_p su velocidad, la ecuación cinemática es:

$$\frac{dx_p(t)}{dt} = v_p$$

Para partículas pasivas $v_p = u(x_p(t), t)$, donde $u(x, t)$ es la velocidad del fluido. Las partículas inerciales satisfacen la ecuación:

$$m_p \frac{dv_p(t)}{dt} = \sum F_p$$

m_p representa la masa de la partícula p , y en el lado derecho de la ecuación todas las fuerzas que interactúan con la partícula. Las ecuaciones de **Maxey-Riley** se escriben:

$$m_p \frac{dv_p(t)}{dt} = \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_T + \mathbf{F}_{AM} + \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_{hist}$$

Donde los términos en el lado derecho de la última ecuación corresponden respectivamente a la Fuerza de **Flotación**, Fuerza de **Tchen** o fuerza de Campo de Velocidad no perturbado, Fuerza de **Masa Anadida**, Fuerza de **Arrastre Viscoso** y la Fuerza Histórica o de **Basset-Boussinesq**.

Maxey-Riley obtuvieron las expresiones para cada una de las fuerzas antes mencionadas, las que fueron validadas para números de Reynolds bajos y tamaños de partículas pequeños comparado con el largo de Kolmogorov. Cabe mencionar que mediante la corrección de **Faxén** se toma en cuenta el efecto del tamaño finito de las partículas, en (Homann y Bec, 2010) muestran que el efecto de la corrección es significativa para partículas grandes y despreciable para partículas cuyo diámetro es menor o igual al largo de Kolmogorov. Además, dependiente del caso, se puede incluir aparte de las fuerzas antes mencionadas la fuerza de **Sustentación** y distintas correlaciones para el efecto del **Arrastre** con números de Reynolds más altos. La fuerza de **Flotación** se escribe:

$$\mathbf{F}_B = (\rho_p - \rho_f)V_p\mathbf{g}$$

con \mathbf{g} , aceleración gravitacional, ρ_p y ρ_f las densidades máxicas de la partícula p y del fluido, y V_p el volumen que ocupa la partícula.

La fuerza de **Tchen** o de Campo de Velocidad no Perturbado se define:

$$\mathbf{F}_T = m_{f,p} \left. \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \right|_p$$

Donde:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla$$

representa el operador derivada marterial evaluada en la posición del centro de la partícula p .

Ahora, sin el efecto del tamaño finito de la partícula, la Fuerza de **Masa Añadida** se anota:

$$\mathbf{F}_{AM} = \frac{1}{2}\rho_f V_i \left(\left. \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \right|_p - \frac{dv_p(t)}{dt} \right)$$

En muchos papers la fuerza de arrastre la definen y utilizan como:

$$\mathbf{F}_D = m_p \frac{u(x_p(t), t) - v_p}{\tau_p} (1 + 0.15 \mathbf{Re}_p^{0.687})$$

en esta expresión se ignora el efecto del tamaño de la partícula y se aplica la correlación de **Schiller-Naumann**, válida para $0 < Re_p < 1000$, (Clift et al., 2005).

Para esta última ecuación τ_p corresponde al tiempo de relajación de la partícula:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu}$$

y Re_p es el número de Reynolds de la partícula, dado por:

$$\mathbf{Re}_p = \frac{\rho_f d_p |u(x_p(t), t) - v_p|}{\mu}$$

donde d_p es el diámetro de cada partícula p y μ determina la viscosidad dinámica del fluido. El último término de la ecuación es la fuerza de historia o memoria, donde una vez más se desprecia el efecto del tamaño finito de la partícula:

$$\mathbf{F}_{hist} = \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi \rho_f \mu} \int_0^t \frac{\frac{d}{d\tau} [u_p(t) - v_p(t)]}{\sqrt{t - \tau}} d\tau$$

En muchos otros estudios incluyen además la fuerza de sustentación. Donde la descomponen como contribución de dos mecanismos. Uno causado por la rotación de la partícula, la **Slip-Rotation Lift Force** o fuerza de **Magnus** (Rubinow y Keller, 1961). Y la otra causada por el esfuerzo de corte en la velocidad del fluido, la **Shear-Induced Force** o fuerza de sustentación de **Saffman** (Auton, 1987).

Podemos además separar los flujos según la densidad de ambas fases, donde la relevancia de cada una de las fuerza se torna dependiente de la relación existente entre las densidades. Por ejemplo en (Armenio y Fiorotto, 2001) se observa que para partículas pequeñas y pesadas, donde $\rho_p \gg \rho_f$, la fuerza de gradiente de Presión, Masa Añadida y Fuerza de Historia son menos signifiantes que la fuerza de Arrastre Viscoso. Para partículas livianas, en particular para burbujas en líquido,

las tres fuerzas antes despreciadas se vuelven importantes. Lo mismo ocurre para la consideración de la fuerza de sustentación, donde su efecto es de mayor importancia en partículas ligeras. El costo computacional para calcular la integral sobre la historia de la partícula es elevado, es por ello que a menudo esta fuerza no es tomada en cuenta. Recientemente un nuevo método ha sido desarrollado para sobrellevar este problema (Van Hinsberg et al., 2011).

2.3. Acoplamiento de las Ecuaciones

Según las distintas geometrías, configuraciones y consideraciones. La forma en la que pueden interactuar las distintas fases entre ellas, conforme a la teoría actual son:

- (a) One-way \Leftrightarrow La fase fluida ejerce efecto sobre la fase dispersa $F_f \Rightarrow F_s$.
- (b) Two-way \Leftrightarrow Existe fuerzas de interacción entre ambas fases $F_f \Leftrightarrow F_s$.
- (c) Four-way \Leftrightarrow Existe fuerza de interacción entre ambas fases y se considera además la interacción de la fase dispersa consigo misma $F_f \Leftrightarrow F_s$ y $F_s \Leftrightarrow F_s$.

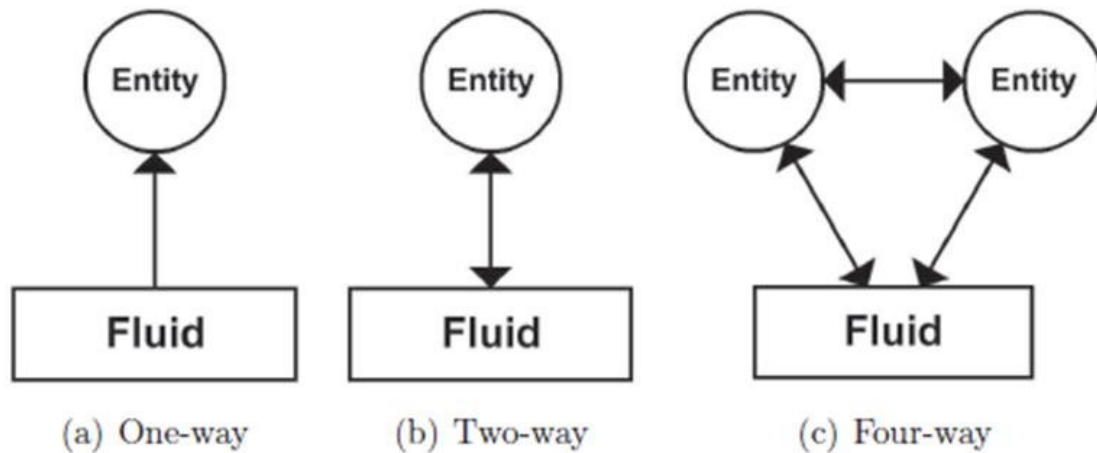


Figura 2.4: Acoplamiento de las interacciones sólido-fluido.

2.3.1. One-way Coupling

El paper más antiguo que trata esta vía de acoplamiento es (Riley y Patterson Jr, 1974). En dicho estudio incluyen partículas pasivas e inerciales, en turbulencia isotrópica con decaimiento homogéneo. Dado lo modesto de los recursos computacionales de esos años el número de Reynolds era bajo $\mathbf{Re} < 35$, la malla tenía 32^3 nodos y 432 partículas fueron simuladas. La ecuación de movimiento de las partículas inerciales contenían sólo una fuerza Lineal de arrastre.

En (Balachandar y Maxey, 1989) y también en (Yeung y Pope, 1988) se estudia la precisión de varios métodos para la interpolación de la velocidad del fluido con la posición de la partícula en DNS. Describen estos métodos desde la interpolación lineal a interpolaciones Hermitiana y Lagrangiana de Mayor Orden, también usando **Splines**. La precisión de la interpolación no sólo queda determinada por el método de interpolación sino también por la resolución del DNS. En general un método de tercer orden se requiere para predecir la estadística de la velocidad Lagrangiana con suficiente precisión. (McLaughlin, 1989) fue probablemente el primero en desarrollar el acoplamiento en una dirección con Point-Particle DNS en un canal turbulento. Considerando un Reynolds de 2000 y estudiando la depositación de partículas en aerosol. Dado que la razón de las densidades másica es $\rho_p > \rho_f$, sólo considera la acción de las fuerzas de Arrastre Viscoso y sustentación de **Saffman**. Dichas contribuciones se tornan importantes en la subcapa viscosa, y mejoran la depositación y acumulación de partículas.

(Kontomaris et al., 1992) estudian la dispersión de partículas pasivas en DNS en canal turbulento con $Re = 9048$, basado en dos veces el ancho del canal y la velocidad del flujo medio. En esta investigación aplican un método pseudo-espectral de Fourier-Chebyshev, con una resolución bastante gruesa en relación a trabajos posteriores. Se enfocaron principalmente en la precisión de varios métodos de interpolación entre la posición de la partícula y la velocidad del fluido . Existen bastantes reportes de one-way coupling, para distintos tipos de flujos: flujo en canal, sin rotación, flujo con rotación en cañerías, flujo en turbulencia isotrópica homogénea, y en decaimiento. (Elghobashi y Truesdell, 1992) simulan partículas inerciales en decaimiento de turbulencia isotrópica homogénea, tomando en cuenta todos los términos de las ecuaciones de Maxey-Riley, con un número de Reynolds inicial de

25. En su experimento la razón cuadrática media del desplazamiento de la partícula acordaba bien con los resultados medidos, pero el número de Reynolds difería siendo tres veces más grande.

En flujos confinados en parades, por ejemplo en canales y tuberías, la concentración preferencial que tienen las partículas juegan un rol fundamental. En turbulencia isotrópica homogénea, puede que localmente la concentración de las partículas sea no uniforme, pero el promedio de esta concentración es constante y uniforme a lo largo del tiempo. En flujos turbulentos no homogéneos, las partículas tienden a desplazarse hacia los lugares donde la energía cinética turbulenta es menor. El fenómeno antes mencionado se llama **Turbophoresis**, y resulta en grandes concentraciones de partículas cerca de las paredes del canal o de la tubería (Reeks, 1983).

2.3.2. Two-way Coupling

El acoplamiento de una vía es sólo aplicable en flujos diluidos, donde localmente la fracción volumétrica es inferior a 10^{-5} . Para razones volumétricas mayores los efectos de las partículas en la turbulencia no pueden ser despreciados y una fuerza de reacción de las partículas sobre el fluido debe ser tomado en cuenta. Para este acoplamiento se requiere la solución a dos problemas. El primero son todas las expresiones de las fuerzas hidrodinámicas sobre la partícula, antes mencionadas, que requieren el conocimiento del campo de velocidad no perturbado en la posición de la partícula. Si el efecto de las partículas es tomada en cuenta, el campo de velocidad no perturbado no es directamente conocido. La diferencia entre el campo perturbado y el no perturbado es pequeña si el diámetro de la partícula es minúsculo comparado con el ancho de la malla. Ya que en DNS el tamaño del mallado es casi siempre más grande que el largo de Kolmogorov y el diámetro de la partícula tiene que ser más pequeño que el largo de Kolmogorov para que la aproximación de partícula-puntual pueda ser aplicada.

El segundo problema es que el término del acoplamiento en dos vías, por ejemplo, la fuerza ejercida por la partícula sobre el fluido está localizada en la posición de la partícula, y puede así ser representada por una **Función Delta de Dirac**. En el caso de un número relativamente pequeño de partículas, tiene como resultados una distribución bastante errática de esta fuerza sobre el dominio computacional.

Por lo tanto, usualmente el término de acoplamiento en dos vías se distribuye sobre una serie de puntos vecinos en el mallado, esto se hace mediante un método con operadores de proyección o asignando y localizando la malla en el lugar donde se encuentra la partícula.

(Eaton, 2009) también trata muchos problemas relacionados a "two-way coupling". El primer reparo es que las partículas son más grandes que espacio intermallado, por tanto no pueden ser representadas como puntos. Como ya se ha señalado anteriormente, en casi todos los métodos de simulación numérica, el tamaño de la malla, es más grande que el largo de Kolmogorov y si las partículas son más pequeñas que el largo de Kolmogorov, se cumple con certeza que la partícula es mas pequeña que el espaciamiento del mallado. El segundo yerro radica que en los flujos diluidos, el término de acoplamiento aparece como "manchas", dado que en la mayoría de las celdas no hay partículas. La condición de que la fuerza de acoplamiento en dos vías no sea suave no trae problemas en la simulación numérica. Incluso, resultados estadísticos de simulación, promediados en un tiempo largo, no parecen ser afectados por la no-suavidad de la fuerza.

(Boivin et al., 1998) estudia la influencia de partículas, con distintas masas, sobre la energía cinética turbulenta y su disipación en turbulencia isotrópica homogénea. Notificaron que ambas cantidades disminuyen con el aumento de la carga másica de las partículas y con el incremento del tamaño de la partícula (número de Stokes). Ahora considerando el espectro de energía, observan que el espectro de densidad de la turbulencia se atenúa con la presencia de grandes partículas y aumenta con las pequeñas.

(Pan y Banerjee, 1996) desarrollan DNS con acoplamiento en dos vías en un canal con flujo turbulento. En sus simulaciones ocupan una fracción volumétrica cercana a 10^{-4} desprecian los términos de masa añadida y de historia, pero incluyen la fuerza asociada al gradiente de presión. Donde usan la función de Green primaria del flujo de Stokes, denominada **Stokeslet**, para la fuerza de acoplamiento en dos vías. Observan que en general que las partículas más pequeñas que la longitud característica de Kolmogorov suprime la turbulencia, mientras que las más grandes producen una mejora en la turbulencia.

(Zhao et al., 2010) desarrolla "two-way coupled point-particle DNS" para un canal de

flujo turbulento con un Reynolds de fricción igual a 180. Un resultado llamativo es que las partículas reducen el arrastre, provocando una mayor tasa de flujo medio para el mismo número de Reynolds comparado a un flujo sin partículas. Tal como en (Boivin et al., 1998) se observa que las fluctuaciones del campo de velocidad del fluido en la dirección de las líneas de corriente se acentúan por la presencia de partículas, mientras que las cantidades en las otras dos direcciones y las componentes del tensor de esfuerzos de Reynolds son considerablemente disminuidas. También estudian el efecto de las partículas en la formación de estructuras coherentes, reportando en ellas un aumento de su tamaño.

(Lee y Lee, 2015) toman en cuenta la fuerza de arrastre no-lineal que ejerce el fluido sobre las partículas. Consideran distintos números de Stokes para las partículas, manteniendo constante la carga másica y enfocado en los efectos de las partículas sobre la turbulencia. Lo fundamental de la experiencia realizada es que las partículas con números de Stokes bajos incrementan: la intensidad de la turbulencia, la disipación viscosa, el estrés de Reynolds y la aceleración estadística del fluido, en cambio las partículas con altos números de Stokes suprimen la intensidad de la turbulencia. Explican estos resultados mediante la interacción de las partículas con sus barridos y expulsiones cerca de la pared. Cabe mencionar que la fracción volumétrica de partículas para el caso del menor número de Stokes es muy alto del orden 10^{-3} , es por ello que se pone en duda la desconsideración de la colisión entre las partículas.

2.3.3. Four-way Coupling

Para fracciones volumétricas altas las partículas no sólo se ven influenciadas por la fase continua, también la interacción entre ellas se torna cada vez más importante. De acuerdo al diagrama de (Elghobashi, 1994), la colisión entre las partículas tienen efecto significativo en los resultados si el orden de la concentración de partículas es superior a 10^{-3} . Las simulaciones en la cual se toma en cuenta el efecto de colisión entre las partículas son llamadas, en general, *four-way coupled simulation*. La colisión entre partículas requiere adicionalmente dos elementos en la simulación: un algoritmo que busque la existencia de colisión y un método que determine el resultado de la colisión. En general se ha asumido que el tiempo de colisión y la fracción volumétrica

son lo suficientemente pequeños para considerar sólo colisiones duales. En esta sección sólo se consideran partículas esféricas. En (Zhao et al., 2015) se pueden encontrar algoritmos para partículas con forma elipsoidal y en (Siewert et al., 2014) se estudian y desarrollan simulaciones para partículas no-esféricas.

Algoritmos para la búsqueda de colisión pueden ser separados en estocásticos y determinísticos. El algoritmo determinístico más simple para la búsqueda de colisión considera todos los pares de partículas, mas el costo de este procedimiento es proporcional al cuadrado del número de partículas simuladas y se vuelve prohibitivamente costoso computacionalmente. Algoritmos de búsqueda más eficientes han sido desarrollado en base a listas de vecinos cercanos (nearest-neighbor lists) o a descomposición del dominio. Nearest-neighbor lists son también empleados en simulación de dinámica molecular. Ya que en un paso de tiempo Δt la distancia entre dos partículas no puede cambiar más de $2v\Delta t$, donde v es la magnitud máxima de la velocidad de la partícula, sólo los pares de partículas dentro de este rango son considerados. Ahora, si N_p denota el número de partículas, el resultado de la consideración anterior reduce el coste computacional al orden $N_p \log N_p$. Una alternativa para reducir el costo computacional del algoritmo de búsqueda de colisión en pares de partículas es la utilización de modelos estocásticos de colisión , usados por ejemplo en (Oesterle y Petitjean, 1993). En este método cada partícula es seguida durante todo intervalo de tiempo, la fracción de partículas que colisiona se determina mediante una distribución de probabilidad de ocurrencia. La anterior distribución de ocurrencia de colisión involucra el área de sección transversal del par de partículas, la velocidad relativa del par, la densidad de partículas y una función radial de distribución, ver (Sundaram y Collins, 1997). Dada la depositación y concentración de las partículas en ciertos lugares preferenciales es que la función radial de distribución no es fácil de determinar. Además, la velocidad relativa de dos partículas que colisionan se ve fuertemente influenciada por la correlación que hay entre dos partículas inerciales cuando se encuentran a corta distancia. El otro elemento a considerar en el acoplamiento en 4 vías es el algoritmo propio de colisión, el cual entrega los resultados posteriores al choque. Básicamente y en general se pueden encontrar dos modelos: **hard-sphere** y **soft-sphere models**. En el primer modelo, esfera rígida, las dos partículas sólo se sienten en el momento que se tocan

y la colisión ocurre de manera instantánea. Mientras que en la aproximación de esfera blanda el movimiento relativo de las partículas en colisión es gobernado por una ecuación de movimiento que consta de una fuerza de contacto entre las dos partículas. Para la fuerza de contacto se puede usar un modelo lineal de Resorte y Amortiguamiento (*Spring-Dash-Pot Models*) (Tsuji et al., 1993). Para suspensiones muy densas el hard sphere model no puede ser utilizado ya que conduce a valores de velocidad relativa pequeños y confinaciones muy cercanas, pudiendo resultar en el traslape de las partículas. La principal ventaja de usar este modelo es que posterior al choque las velocidades pueden ser calculadas de forma analítica como resultado de las ecuaciones de conservación de energía y momentum. Cabe mencionar que no necesariamente la energía debe conservarse, para choques inelásticos en la que parte de la energía cinética del movimiento relativo de las dos partículas puede ser disipado en forma de calor, para cuantificar ello es posible incorporar un algoritmo de manera sencilla.

En muchas simulaciones que utilizan four-way coupling no sólo toman en cuenta el momentum lineal de los cuerpos, también se considera la rotación de la partícula. Durante el proceso de colisión existe intercambio de momentum lineal y angular, de tal manera que la suma del momento angular y lineal del par que colisiona debe ser conservada. En colisiones inelásticas se puede incorporar un coeficiente de restitución normal, el cual reduce la componente normal de velocidad relativa durante la colisión. Si la componente tangencial de la velocidad relativa está por debajo de cierto umbral las partículas se someten a una colisión frontal (*sticking collision*), por el contrario si la velocidad supera el valor umbral hablamos de una colisión deslizante (*sliding collision*), (Lun y Liu, 1997). Un gran número de investigadores han desarrollado el acoplamiento en cuatro vías con DNS para flujos turbulentos en tuberías. (Vreman, 2007) estudió el efecto de pequeñas partículas pesadas en un tubo vertical con aire como fase continua, con un amplio radio de variación de carga másica, entre los 0.1 y 30. Incorpora en su investigación un modelo de rugosidad para las paredes y concluye que los efectos de esta consideración son más categóricos que los efectos de cambio en el modelo de partícula, tales como la inclusión de la fuerza de sustentación y la modificación de los parámetros de colisión. Considerar la pared como un cuerpo con rugosidad se vuelve necesario para tener acuerdos con los resultados experimentales,

la intensidad de la turbulencia del aire se reduce fuertemente con la carga másica de partículas. Resultados similares se encuentran en (Dritselis y Vlachos, 2008) donde el rango de carga varía entre 0.2 y 2. En este caso las partículas inhiben la transferencia de energía entre la componente principal del flujo (*streamwise*) hacia la otra dirección transversal (*spanwise*) y a la componente de velocidad normal de pared, lo cual provoca un incremento de la anisotropía de la turbulencia.

(Vreman, 2015) modela un flujo gas-sólido descendente en canal vertical con carga másica de 0.8 y con un número de Reynolds de fricción de $Re_\tau = 642$. En su simulación considera dos casos para el efecto de la pared en la tubería, pared lisa y rugosa, donde el efecto rugoso es caracterizado mediante un arreglo de pequeñas partículas esféricas sobre las paredes. El efecto de rugosidad realiza la atenuación de la turbulencia causada por las partículas sólidas libres. Además, descompone la fuerza ejercida por las partículas sobre el gas, como una contribución de tres fuentes: Un promedio espacial de la fuerza principal, la parte fluctuante de la fuerza principal y la contribución no uniforme de esta fuerza. Concluye que es la tercera contribución la que causa la disminución del efecto turbulento. Un concepto importante y frecuentemente estudiado es la frecuencia de colisión, cantidad importante en la modelación mediante algoritmos estocásticos. Dado que las partículas inerciales cercanas están correlacionadas, la frecuencia de colisión difiere de la formulación teórica que puede ser derivada de la teoría cinética de gases. (Sundaram y Collins, 1997) derivan un estimador para la frecuencia de colisión, el número de colisiones por unidad de volumen y tiempo, para partículas inerciales mono-dispersas en flujo turbulento basado en el barrido cilíndrico de realizado por una partícula por unidad de tiempo. El estimador depende de la velocidad relativa de dos partículas justo antes del choque, sus densidades y la distribución radial de partículas en contacto. En las simulaciones realizadas calculan la frecuencia de colisión de partículas para distintos números de Stokes, dada la pequeña fracción volumétrica de partículas en el flujo es que ignoran el efecto de las partículas sobre el fluido, pero llevan a cabo el fenómeno de colisión. (Wang et al., 2000) realiza una estimación de la frecuencia de colisión mediante una formulación esférica, acuerdo a lo que plantea (Saffman y Turner, 1956), donde la frecuencia de colisión se basa en el flujo neto entrante a una esfera alrededor de una partícula, esfera cuyo radio igual al diámetro d_p . Para

pequeños números de Stokes las partículas se comportan en acuerdo con la predicción en (Saffman y Turner, 1956), mientras que para números de Stokes mayores la teoría cinética es la que concuerda con los resultados. En un rango intermedio se observa un comportamiento más complejo, como consecuencia del orden preferente que tienen las partículas, por ejemplo cerca de las paredes, y de la reducción de las correlaciones de las partículas vecinas. Independientemente estos fenómenos traen un aumento de la tasa de colisión. En (Wang et al., 2000) calculan la frecuencia de colisión sin la implementación de la posición y velocidad de las partículas posterior a la colisión, en estos términos se permite que las partículas se traslapen. De esta manera evitan la repetida colisión artificial, que puede ocurrir si las partículas en suspensión que colisionan lo hacen a baja velocidad y si el campo de fluido circundante empuja las partículas una hacia la otra después de la colisión. Determinan la frecuencia de colisión, la función de distribución radial de partículas en contacto y la velocidad relativa de los cuerpos en colisión, ello para distintos números de Stokes estudiando por separado los efectos de concentración preferente y velocidad relativa en la frecuencia de colisión. Concluyen que cuando la concentración de partículas ha alcanzado un estado estacionario la frecuencia de colisión con formulación esférica es más precisa que la cilíndrica. En flujos turbulentos no homogéneos, la velocidad relativa media, la función de distribución radial y la densidad de partículas son fuertemente dependiente de la coordenada donde la turbulencia es homogénea, en este caso corresponde a la coordenada normal a la pared. Producto de la Turbophoresis, la densidad de partículas cerca de las paredes es más grande que en centro del canal. El efecto de ella en la frecuencia de colisión es favorecido por la mayor velocidad relativa media cerca de las paredes, la concentración preferencial de las partículas no sólo se da en las cercanías de la pared, tanto en la en el centro del canal como cerca de la pared la aglomeración de partículas juegan un rol importante. Cerca de las paredes la agrupación de éstas están en líneas de baja velocidad.

Capítulo 3

Software Implementado



3.1. Introducción ANSYS Fluent

Este capítulo está basado en la información oficial proporcionada por los desarrolladores del software (ANSYS Fluent Theory Guide, 2009), (ANSYS Fluent User's Guide, 2009) y (ANSYS Fluent UDF Manual, 2009).

¿Qué es la Dinámica de Fluidos Computacional?

La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) es una de las ramas de la mecánica de fluidos que utiliza métodos numéricos y algoritmos para resolver y analizar problemas sobre el flujo de fluidos. Los computadores son usados para realizar miles de cálculos requeridos para simular la interacción de los líquidos y/o gases con superficies complejas proyectadas en contextos ingenieriles. Aún con ecuaciones

simplificadas y supercomputadores de alto rendimiento, en muchos casos sólo se alcanzan resultados aproximados. La verificación de los datos obtenidos por CDF se realiza mediante modelos físicos o mediciones experimentales, en determinadas ocasiones se puede validar con resultados de modelos matemáticos similares. El método consiste en discretizar una región del espacio, dividiéndola en pequeños volúmenes de control. Luego se resuelve en cada uno de ellos las ecuaciones de conservación discretizadas, de forma que en realidad se resuelve una matriz algebraica en cada celda de manera iterativa hasta que el error residual es suficientemente pequeño.

ANSYS Fluent es un poderoso software para realizar CFD, ayudando de manera rápida y profunda el desempeño de muchas aplicaciones en ingeniería. Fluent posee modelos bien validados con la capacidad de llegar a resultados acertados de manera rápida en una amplia gama de situaciones de la Dinámica de Fluidos Computacional. Un Software de CDF requiere normalmente de realizar tres pasos fundamentales:

- Pre-procesamiento: Consiste en establecer y discretizar el sistema, además de establecer todas las condiciones necesarias para realizar el cálculo.
- Procesamiento: Se establecen las ecuaciones gobernantes y se resuelven las mismas.
- Post-procesamiento: Es el análisis de los resultados obtenidos, en este paso se realizan decisiones de la simulación, es decir, se evalúa si son correctos los resultados o si se debe repetir algún paso del proceso.

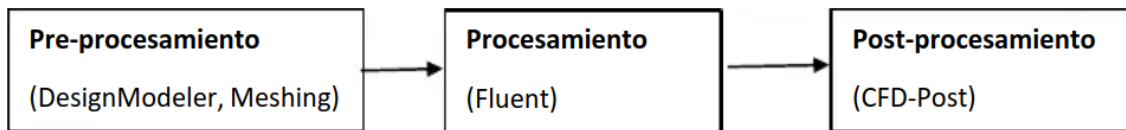


Figura 3.1: *Secuencia de Trabajo para un modelo CDF en ANSYS Fluent.*

3.2. Teoría sobre Modelos Utilizados

3.2.1. Modelo de Flujo Laminar

Para todos los flujos ANSYS Fluent resuelve las ecuaciones de conservación de masa y momentum. En esta sección, se presentan las ecuaciones de conservación para un flujo laminar en un marco inercial de referencia (no acelerado).

Ecuación de Conservación de la Masa

La ecuación de conservación de la masa, o ecuación de continuidad, para fluidos puede ser escrita como sigue:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m$$

La ecuación anterior es la forma general de la ecuación de conservación de la masa y es válida para flujos compresibles e incompresibles. El término S_m es una fuente de masa desde la fase dispersa hacia la fase continua (ej. producto de la vaporización de gotas de aguas). Para este caso en particular el flujo es incompresible y no existe cambio de fase ($S_m = 0$).

Ecuación de Conservación de Momentum

La ecuación de conservación de momentum en un marco de referencia inercial no acelerado viene descrita por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}}) + \rho \vec{g} + \vec{F}$$

Donde p es la presión hidrostática, $\bar{\bar{\tau}}$ es el tensor de esfuerzos, $\rho \vec{g}$ y \vec{F} son la fuerzas de cuerpo gravitacional y externas respectivamente (ej. la fuerza que surge debido a la interacción con la fase dispersa).

El tensor de esfuerzos se escribe:

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right]$$

Con μ la viscosidad molecular, I la matriz identidad o tensor unitario y el segundo término del lado derecho de la ecuación es el efecto de la dilatación o contracción volumétrica.

3.2.2. Modelo de Viscosidad

Newtoniano

Para fluidos Newtonianos incompresibles, esfuerzo de corte es proporcional al tensor tasa de deformación $\overline{\overline{D}}$:

$$\overline{\overline{\tau}} = \mu \overline{\overline{D}}$$

Dónde $\overline{\overline{D}}$ se define:

$$\overline{\overline{D}} = \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

3.2.3. Malla Dinámica

Esta sección describe el trasfondo teórico de modelos de malla dinámica que tiene ANSYS Fluent utilizados en su módulos de simulación, que a continuación se presenta.

El modelo de malla dinámica usa el solver de ANSYS Fluent para mover contornos y/o objetos, adaptando la forma de la malla acorde a algún patrón esperado. El modelo se utiliza cuando contornos se trasladan o rotan como sólido rígido respecto de otra condición.

Ecuaciones de conservación

Con respecto a las mallas dinámicas, la forma integral de la ecuación conservación de una función escalar ϕ , en un volumen general V cuya frontera se desplaza, puede ser escrita como:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV + \int_{\partial V} \rho \phi (\vec{u} - \vec{u}_g) \cdot d\vec{A} = \int_{\partial V} \Gamma \nabla \phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV$$

Donde ρ es la densidad del fluido, \vec{u} el vector velocidad del flujo, \vec{u}_g es la velocidad de la malla, Γ es el coeficiente de difusión. En la ecuación ∂V es usado para denominar

la frontera del volumen de control V . El primer término de la ecuación (3.2.3) puede ser escrito como una diferencia finita de primer orden hacia adelante:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV = \frac{(\rho \phi V)^{n+1} - (\rho \phi V)^n}{\Delta t}$$

Donde n y $n + 1$ denotan la cantidad respectiva en el momento presente y al tiempo siguiente, respectivamente. El $(n + 1)$ -ésimo volumen V^{n+1} se resuelve de:

$$V^{n+1} = V^n + \frac{dV}{dt} \Delta t$$

Aquí dV/dt es la derivada temporal del volumen de control. En orden de satisfacer las leyes de conservación en la malla, la derivada temporal del volumen de calcula de:

$$\frac{dV}{dt} = \int_{\partial V} \vec{u}_g \cdot d\vec{A} = \sum_j^{n_f} \vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j$$

Acá n_f denota el número de caras en volumen de control y \vec{A}_j es vector de la área j . El producto escalar $\vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j$ en cada cara del volumen de control es calculado como:

$$\vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j = \frac{\delta V_j}{\Delta t}$$

Donde δV_j es el barrido de la cara del volumen de contro j sobre el paso de tiempo Δt .

3.2.4. User-Define Functions (UDFs)

Una User-Defined Function o UDF, es una función programada por el usuario que puede ser cargada de manera dinámica en el Solver de ANSYS Fluent para mejorar las características del código. Por ejemplo se puede utilizar una UDF para definir las condiciones de borde de un problema, propiedades de los materiales, añadir términos fuentes en el flujo, especificar parámetros en distintos modelos presentes (ej. DPM, modelos multifásicos), inicializar soluciones o mejorar el postprocesamiento de datos.

Las UDFs están escritas en el lenguaje de programación **C** usando cualquier

editor de texto, el archivo de código fuente tiene extensión **.c** (ej. **myudf.c**). Un archivo fuente puede contener una solo UDF o múltiples UDFs, pudiéndose definir varios archivos fuentes.

Las UDFs se definen utilizando la macros **DEFINE** proporcionada por ANSYS Fluent. Éstas además se codifican mediante macros y existen funciones adicionales también provistas por ANSYS Fluent que acceden a los datos del Solver de ANSYS Fluent para realizar otras tareas.

Cada UDF debe contener la sentencia para incluir archivos **udf.h** (**#include "udf.h"**) al comienzo del archivo de código fuente, ello permite que las definiciones de macros **DEFINE** y otras funciones proporcionadas por ANSYS Fluent se incluyan durante el proceso de compilación. Los valores que de una UDF pasan al Solver o que el Solver devuelve a una UDF se especifican en unidades SI.

Los archivos que contienen UDFs se pueden interpretar o compilar en ANSYS Fluent. Para las UDF interpretadas, los archivos de origen se interpretan y cargan directamente en tiempo de ejecución, en un proceso de un solo paso. Para las UDFs compiladas, el proceso implica dos pasos separados. Primero se crea una biblioteca de código de objeto compartido y luego se carga en ANSYS Fluent. Después de ser interpretadas o compiladas, las UDFs se volverán visibles y seleccionables en los cuadros de diálogo ANSYS Fluent, y se pueden conectar a un Solver eligiendo el nombre de la función en el cuadro de diálogo correspondiente.

En resumen, las UDF:

- Están escritos en el lenguaje de programación C.
- Debe tener una declaración de inclusión para el archivo **udf.h**.
- Debe definirse utilizando las macros **DEFINE** proporcionadas por ANSYS Fluent.
- Se ejecutan como funciones interpretadas o compiladas.
- Están conectados al Solver de ANSYS Fluent mediante un cuadro de diálogo de interfaz gráfica.

- Deben utilizar y devolver valores especificados en unidades SI.

3.2.5. Condición de Borde: Outflow

Las condiciones de borde de **Flujo que Sale** o **Outflow** en ANSYS Fluent se utilizan para modelar salidas de fluido donde los detalles de la velocidad y la presión del flujo se desconocen antes de resolver el problema. No define ninguna condición en los límites del flujo que sale (a menos que se esté modelando transferencia de calor radiativa, una fase discreta de partículas o un flujo másico dividido), ANSYS Fluent extrapola la información requerida desde el interior.

Las condiciones de contorno utilizadas por ANSYS Fluent en los bordes del flujo que sale son las siguientes:

- Un flujo de difusión nulo para todas las variables de flujo.
- Una corrección general del balance de masa.

La condición de flujo de difusión cero aplicada en las celdas de flujo de salida significa que las condiciones del plano de flujo de salida se extrapolan desde dentro del dominio y no tienen impacto en el flujo de aguas arriba. El procedimiento de extrapolación utilizado por ANSYS Fluent actualiza la velocidad y la presión del flujo de salida de una manera consistente con un supuesto de flujo completamente desarrollado (ej. cuando no hay cambios de área en los bordes del fluido que sale). Los flujos completamente desarrollados son flujos en los que el perfil de velocidad del fluido no cambia en la dirección del flujo. Es importante tener en cuenta que pueden existir gradientes en la dirección transversal a la corriente. ANSYS Fluent sólo supone que los flujos de difusión en la dirección normal al plano de salida son cero.

Capítulo 4

Desarrollo

4.1. Introducción

En esta sección se detalla el procedimiento realizado mediante el software ANSYS Fluent en la replicación de los resultados de (Gers et al., 2010) para el modelo Newtoniano de colisión frontal y oblicuo.

El fluido de trabajo es Agua, con viscosidad dinámica $\mu = 0.001[Pa \cdot s]$.

El marco referencial de las simulaciones están en coordenadas Cartesianas. La simulación de aproximación frontal se realiza en 2D dada la simetría axial del problema, en cambio la aproximación oblicua es en 3D.

Las esferas poseen un radio $R = 30[mm]$.

En base a lo mencionado en el paper las velocidades de acercamiento V_a de la esfera superior del experimento se calculan acorde a los distintos números de Reynolds mediante,

$$Re = \frac{\varepsilon V_a}{\nu_f}$$

además

$$|\varepsilon| = \sqrt{x_{CG}^2 + y_{CG}^2} - 2R$$

los valores calculados son los siguientes:

$$V_a = \{1, 2, 3.5, 7, 10\} \left[\frac{mm}{s} \right]$$

Para la inicialización y posterior carga de la UDF programada es menester que el entorno sea configurado en language C++, para ello resulta práctico realizarlo mediante Visual Studio de Windows con la plataforma Prompt. A continuación la serie de comandos utilizado en la terminal de Windows.

```
** Visual Studio 2017 Developer Command Prompt v15.0.26430.14
** Copyright (c) 2017 Microsoft Corporation
*****
[vcvarsall.bat] Environment initialized for: 'x86_x64'

C:\Program Files (x86)\Microsoft Visual Studio\2017\Community>cd..
C:\Program Files (x86)\Microsoft Visual Studio\2017>cd..
C:\Program Files (x86)\Microsoft Visual Studio>cd..
C:\Program Files (x86)>cd..
C:\>cd program files
C:\Program Files>cd ansys inc
C:\Program Files\ANSYS Inc>cd v180
C:\Program Files\ANSYS Inc\v180>cd fluent
C:\Program Files\ANSYS Inc\v180\fluent>cd ntbin
C:\Program Files\ANSYS Inc\v180\fluent\ntbin>cd win64
C:\Program Files\ANSYS Inc\v180\fluent\ntbin\win64>fluent
```

Figura 4.1: *Inicialización de Software ANSYS Fluent mediante Prompt.*

Una vez iniciado el programa se procede a cargar la UDF en la interfaz de ANSYS Fluent, correspondiente al movimiento del centro de masas de la esfera superior. Dónde para cada uno de los casos se define la posición y velocidad vertical de aproximación del centro de masas.

```
#include "udf.h"

static real vel_Y = 0.0;

DEFINE_CG_MOTION(sph,dt,vel,omega,time,dtime)
{
    NV_S(vel, =, 0.0);
    NV_S(omega, =, 0.0);
    vel_Y = -0.01;
    vel[1] = vel_Y;

    Message("time = %f, vel Y = %f, CG X = %f, CG Y = %f, CG Z = %f\n", time, vel[1], DT_CG(dt)[0], DT_CG(dt)[1], DT_CG(dt)[2]);

    FILE * fp;

    fp = fopen ("Motion.txt", "a");
    fprintf (fp,"%f %f %f %f\n", time, DT_CG(dt)[0], DT_CG(dt)[1], DT_CG(dt)[2]);
    fclose (fp);
}
```

Figura 4.2: User Define Function que detalla el movimiento de la esfera superior, programada en Language C++.

La geometría en las figuras de las simulaciones que se detallará posteriormente fueron realizadas mediante el lenguaje de gráficos vectoriales descriptivo: ".Asymptote". Los resultados y gráficos del modelo 2D y 3D, se realizan con la herramienta GNUPlot y Post-Processing de manera respectiva.

Es muy importante indicar que la simulación acaba cuando las esferas se traslapan.

4.2. Caso 2D: Aproximación Frontal

4.2.1. Geometría

A continuación se ilustra la geometría empleada en la simulación bidimensional de colisión frontal. La geometría en la interfaz de ANSYS Fluent se desarrolla en el entorno de SpaceClaim. Las esferas son consideradas como sólidos rígidos con condición de pared, es decir que no están constituidas con ningún material en particular.

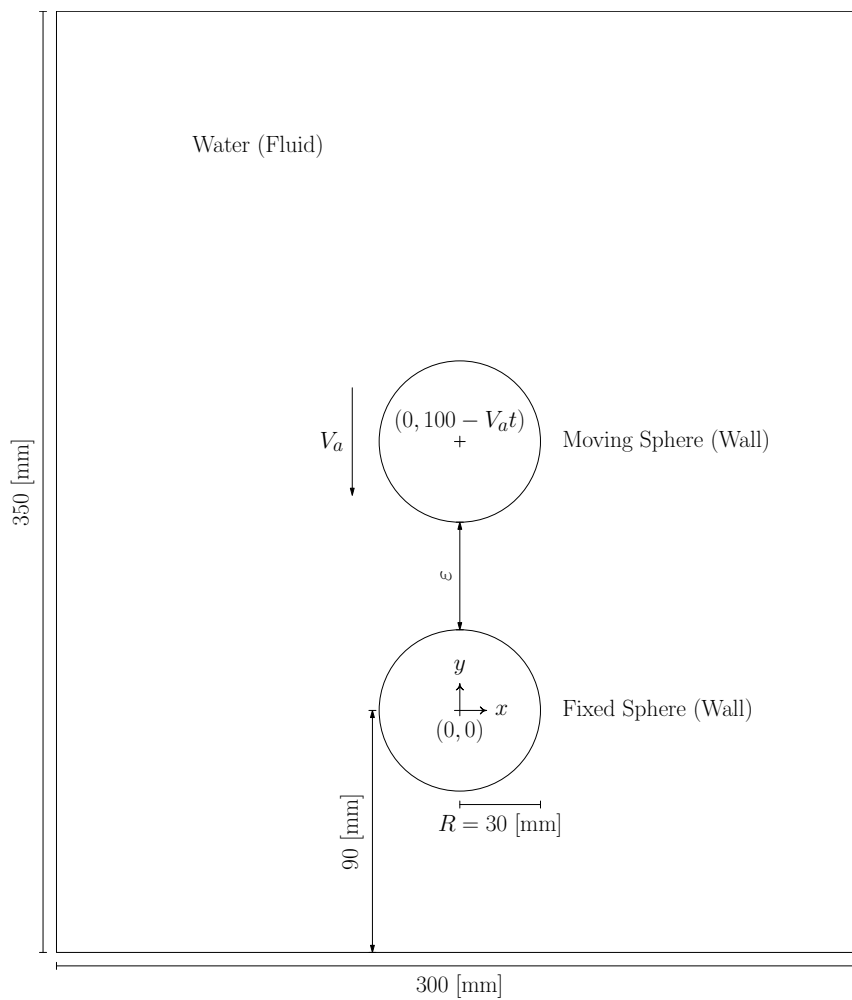


Figura 4.3: Geometría de Simulación 2D.

, dónde

$$\varepsilon = \sqrt{0^2 + (100 - V_at)^2} - 2R$$

corresponde a la magnitud de la distancia entre las esferas que colisionan.

Para calcular los tiempos en la simulación, correspondientes a cada una de las imágenes del paper, se realiza la tabla que se exhibe posteriormente. Dónde se resuelve la ecuación de los distintos números de Reynolds evaluados en la distancia entre las esferas en función del tiempo. Una vez resuelta la ecuación de segundo orden se obtienen los tiempos correspondientes en la simulación que contienen la información de las imágenes presentadas en el paper.

Figura	Loc [mm]	Gap [mm]	Re	V [mm/s]	Ycm [mm]	T [s]
Fig 3	0.44R	R/3	9	1	70	30
			21	2		15
			33	3.5		8.57
			65	7		4.29
			93	10		3
Fig 4	0.44R	R/10	3	1	63	37
			7	2		18.5
			10	3.5		10.57
			20	7		5.29
			29	10		3.7
Fig 5	0.1R	R/3	33	3.5	70	8.57
	0.21R					
	0.32R					
	0.44R					
Fig 6	0.1R	R/10	10	3.5	63	10.57
	0.21R					
	0.32R					
	0.44R					

Cuadro 4.1: *Tabla de cálculo de tiempos requeridos para comparación de resultados.*

4.2.2. Mallado

El mallado de la geometría se realiza de forma automática con la herramienta Meshing de ANSYS Fluent, la serie de comandos y arreglos realizados se detallan a continuación:

1. Se utilizan sólo elementos triangulares de segundo orden para aumentar la precisión y estabilidad de la solución.
2. Se realiza un Refinamiento de Malla Adaptativo y Dinámico de tres veces en el entorno de la esfera móvil.
3. Se realiza un Refinamiento de Malla sobre una esfera de influencia de radio $R = 45[mm]$ desde el punto de tangencia.

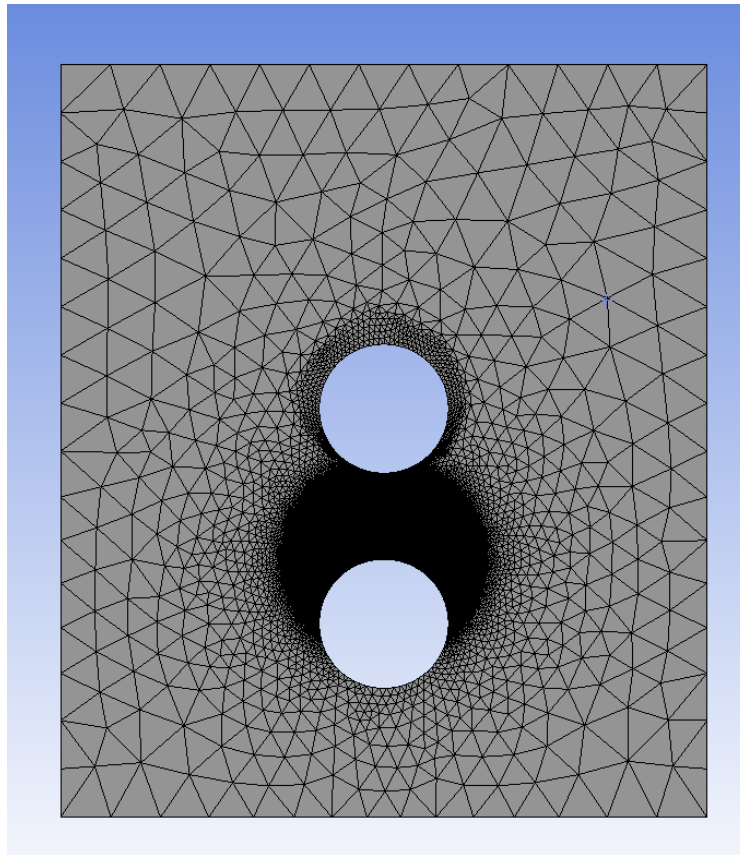


Figura 4.4: *Mallado de Simulación 2D.*

El número de nodos y elementos respectivos de la simulación 2D son:

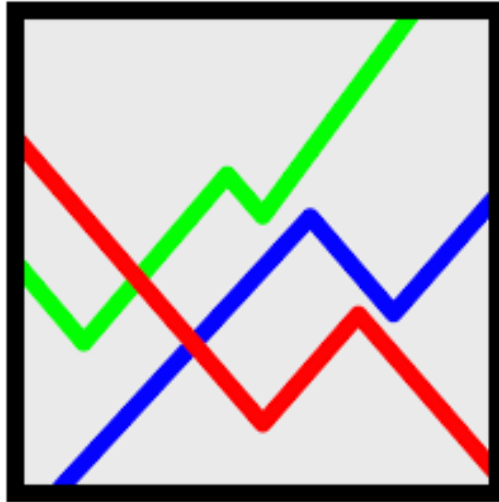
Nodos	Elementos
227.214	113.105

4.2.3. Configuración de Parámetros

Una vez cargado el archivo de la malla anterior en el solver de Fluent, se procede a configurar la simulación bajo los siguientes criterios:

- Modelo: Se selecciona el modelo de Viscosidad Laminar.
- Materiales: Se determina que el cuerpo de la malla sea el medio fluido, quedando definido como Agua Líquida.
- Condiciones de Borde:
 1. Esfera Móvil: Condición de Pared.
 2. Esfera Fija: Condición de Pared.
 3. Interior del Dominio: Fluido.
 4. Bordes del Dominio: Condición de Flujo que Sale (Outflow).
- Malla Dinámica: Se eligen las opciones de remallado y suavizado sobre los límites de la esfera móvil. Además se define el movimiento de la esfera mediante la UDF.
- Metodo de Solución:
 1. Acoplamiento Presión-Velocidad: Algoritmo SIMPLE.
 2. Formulación Transiente: Implícito de Primer Orden, con factor de relajación $\alpha = 0.75$.
- Inicialización de Solución: Híbrida.
- Paso de tiempo: $t = 0.001[s]$

4.2.4. Resultados



Una vez obtenidos los resultados de la simulación se traspa la información a la herramienta Post-Processing de ANSYS Fluent. En ella se dibujan las líneas verticales desplazadas desde el origen de la esfera fija, que luego son situadas y ajustadas entre las esferas, los desplazamientos son:

$$l_i = \begin{pmatrix} 0.1R \\ 0.21R \\ 0.32R \\ 0.44R \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

En seguida para cada tiempo correspondiente se ubican los valores calculados de presión y velocidad en las líneas, luego dichos valores se exportan a un archivo .csv (comma separated values) y finalmente son graficados con la herramienta GNUPlot desde la terminal de Linux.

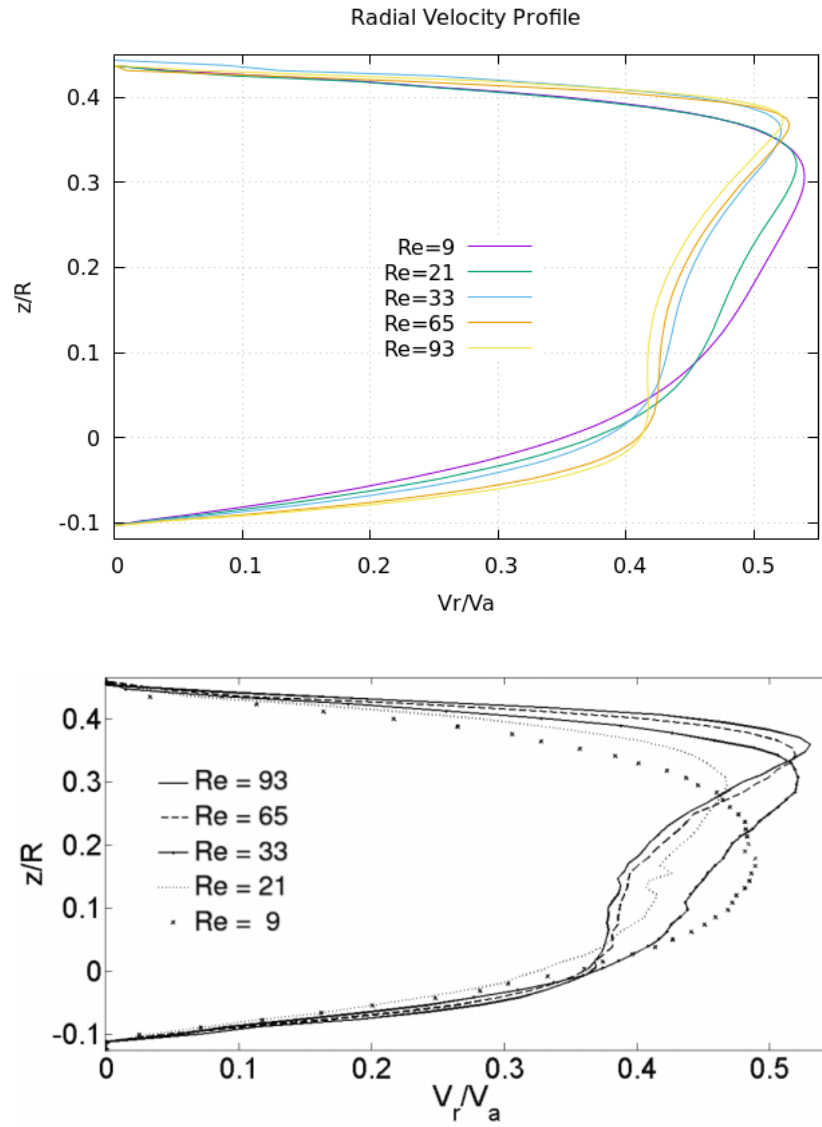


Figura 4.5: Perfil Radial de Velocidad en $r = 0.44R$ cuando $\varepsilon = R/3$. Aproximación Frontal.

En el resultado anterior, se puede apreciar que las curvas simuladas se ajustan bastante bien a las experimentales. Salvo para $Re = 9$, donde el comportamiento de la curva experimental es prácticamente parabólico, a diferencia de la gráfica obtenida por la simulación que presenta asimetría desplazada hacia la esfera superior.

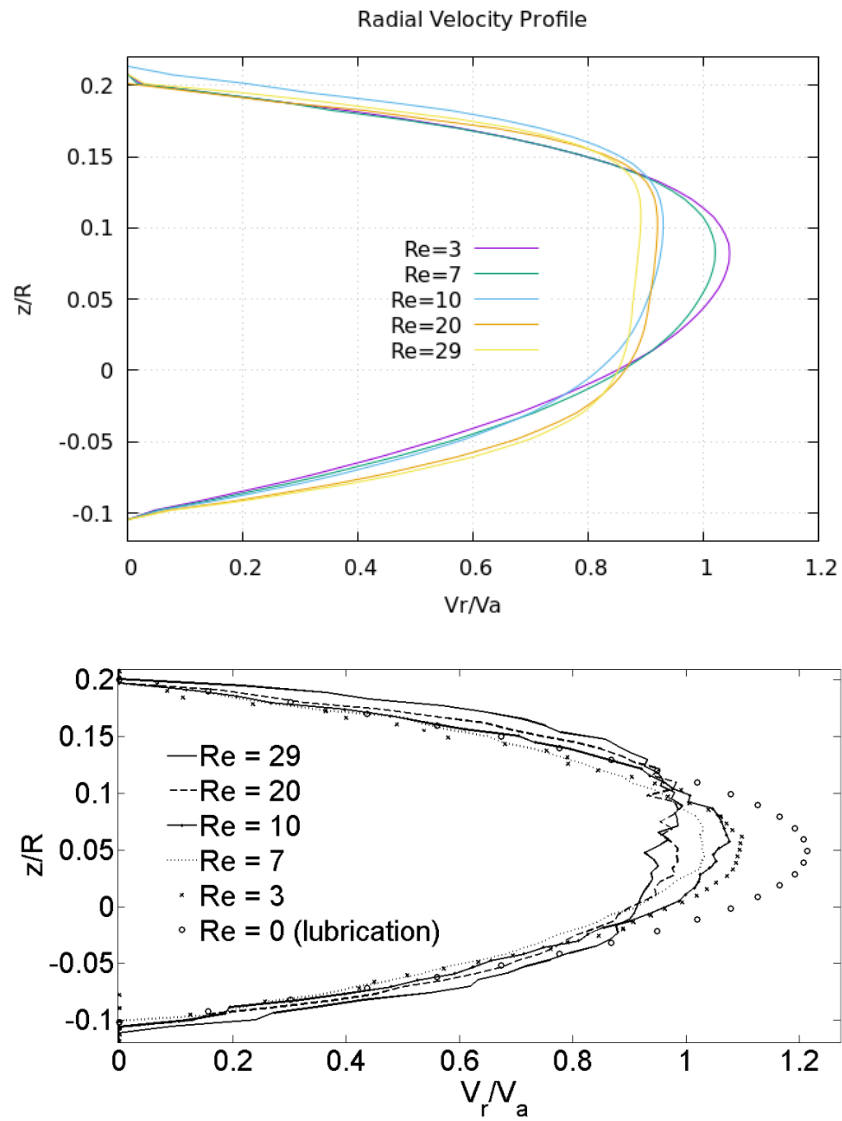


Figura 4.6: Perfil Radial de Velocidad en $r = 0.44R$ cuando $\varepsilon = R/10$. Aproximación Frontal.

Las curvas simuladas alcanzan valores un poco inferiores, pero en general, se parecen a las entregadas por el paper. La principal diferencia radica en que la simulación no indica la curva curva teórica de lubricación para $Re = 0$.

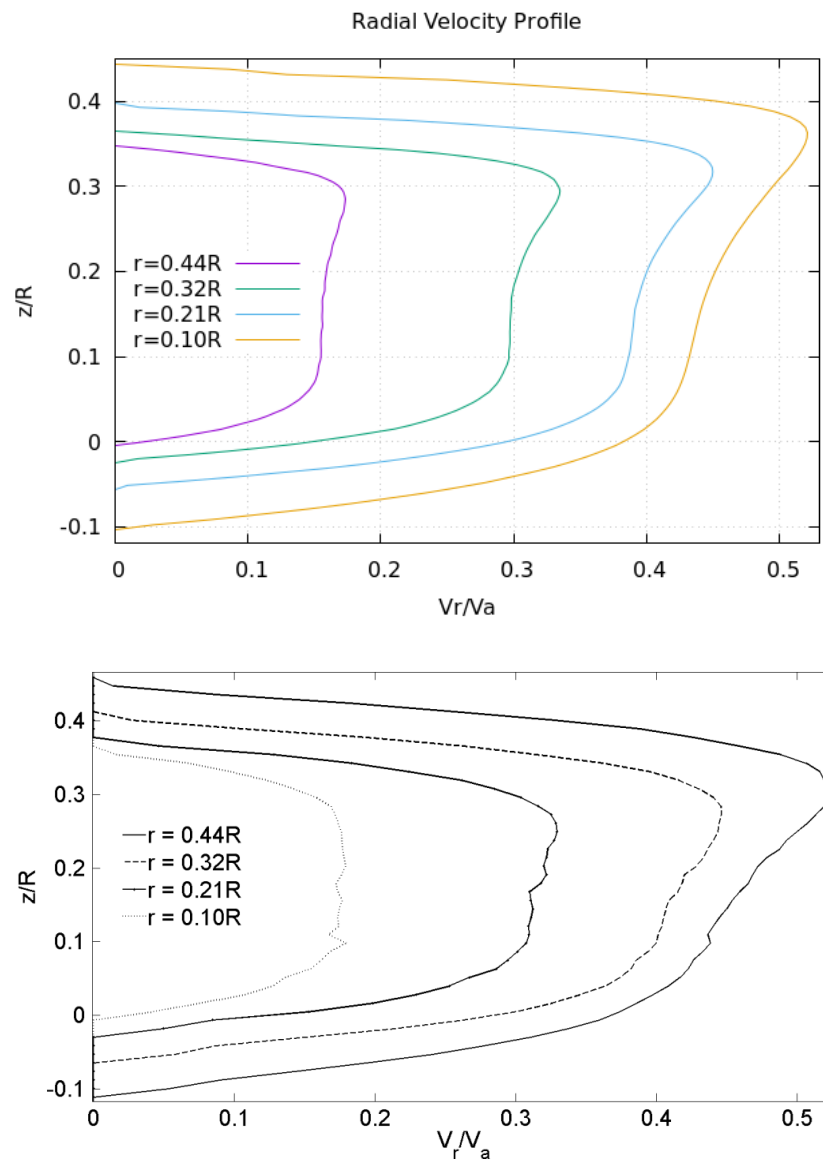


Figura 4.7: Perfil Radial de Velocidad para $\varepsilon = R/3$ y $Re = 33$ cuando . Aproximación Frontal.

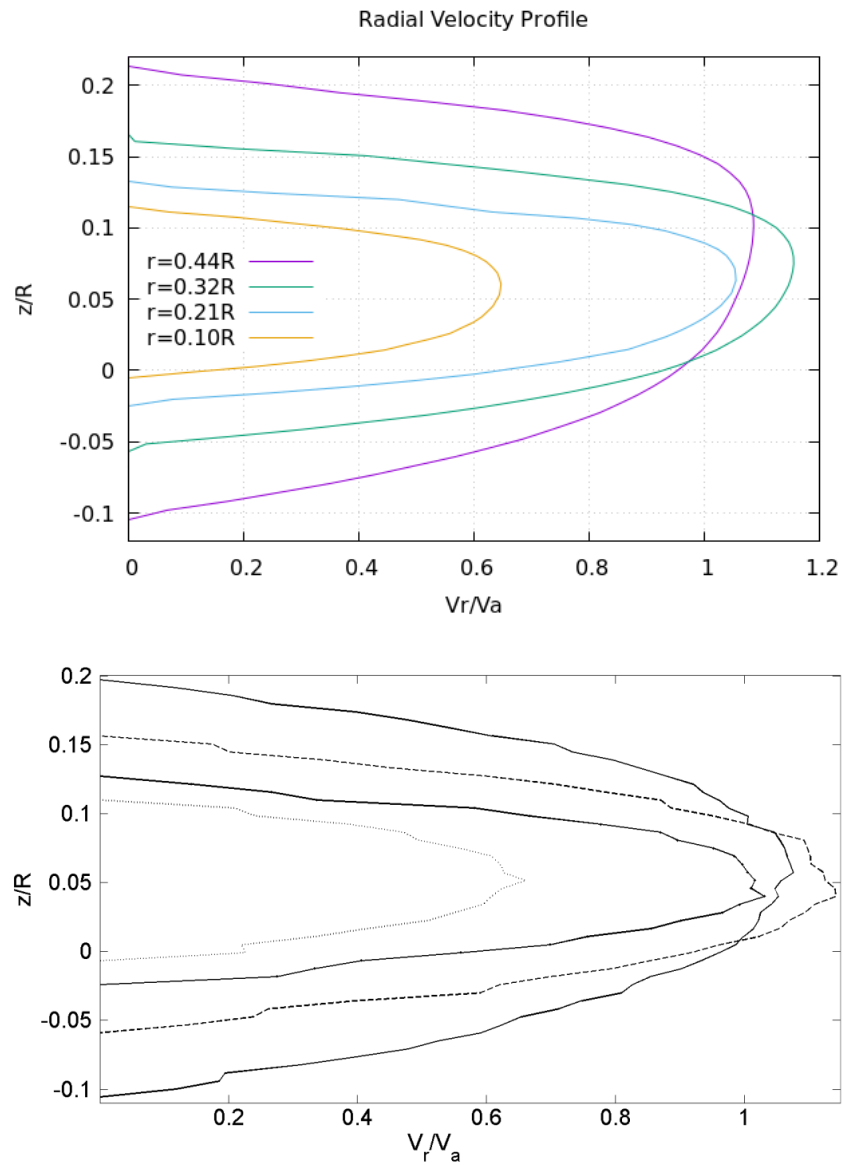


Figura 4.8: Perfil Radial de Velocidad para $\varepsilon = R/10$ y $Re = 10$ cuando . Aproximación Frontal.

En las dos últimas imágenes las comparaciones resultan semejantes a las presentadas por el experimento, sólo se aprecia que las simuladas son más suaves que las otras.

4.3. Caso 3D: Aproximación Oblicua

4.3.1. Geometría

En seguida se exhibe la geometría utilizada en la simulación tridimensional de aproximación frontal. La geometría en la interfaz de ANSYS Fluent se desarrolla en el entorno de Design Modeler. Las esferas son tratadas como sólidos rígidos con condición de pared, es decir que no están hechas de ningún material en particular.

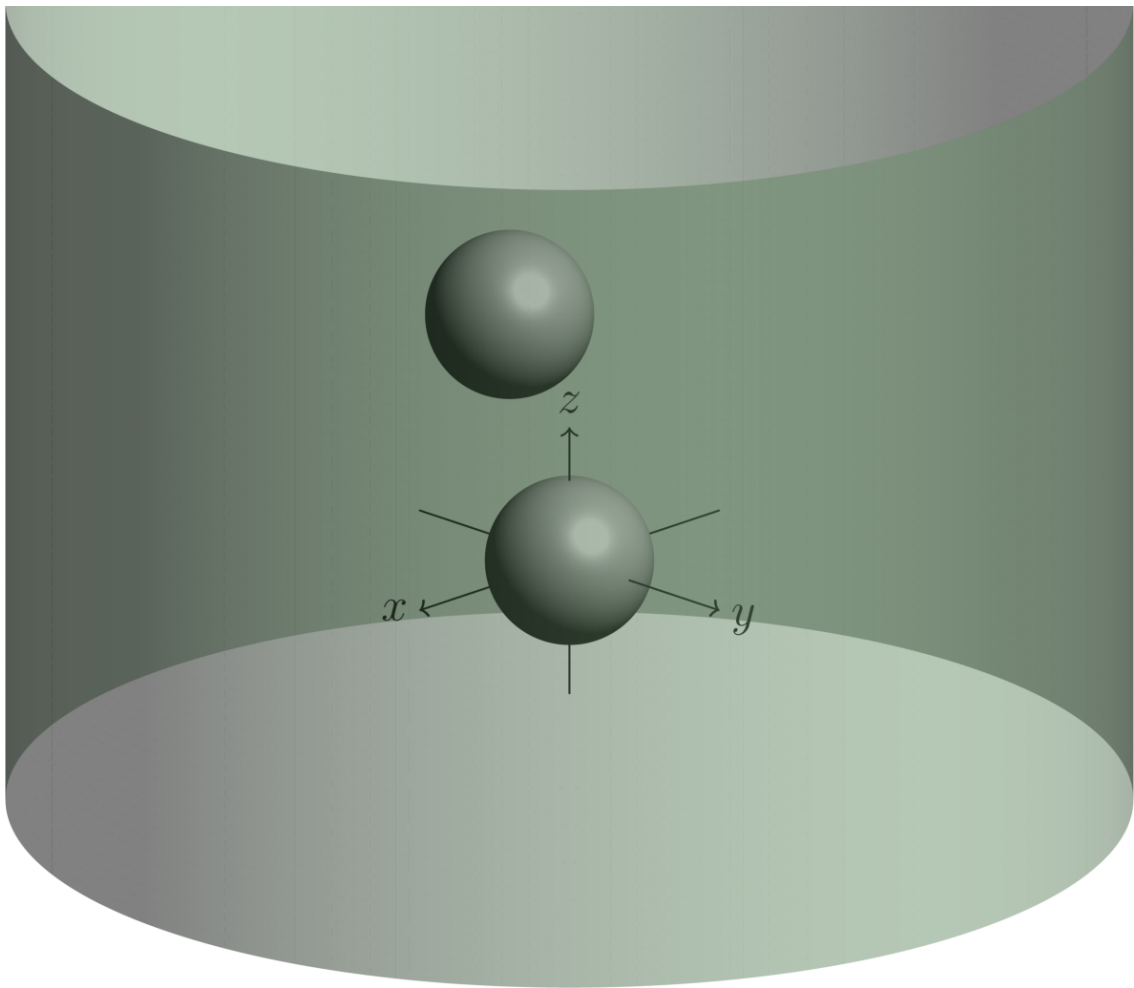


Figura 4.9: Geometría de Modelo 3D.

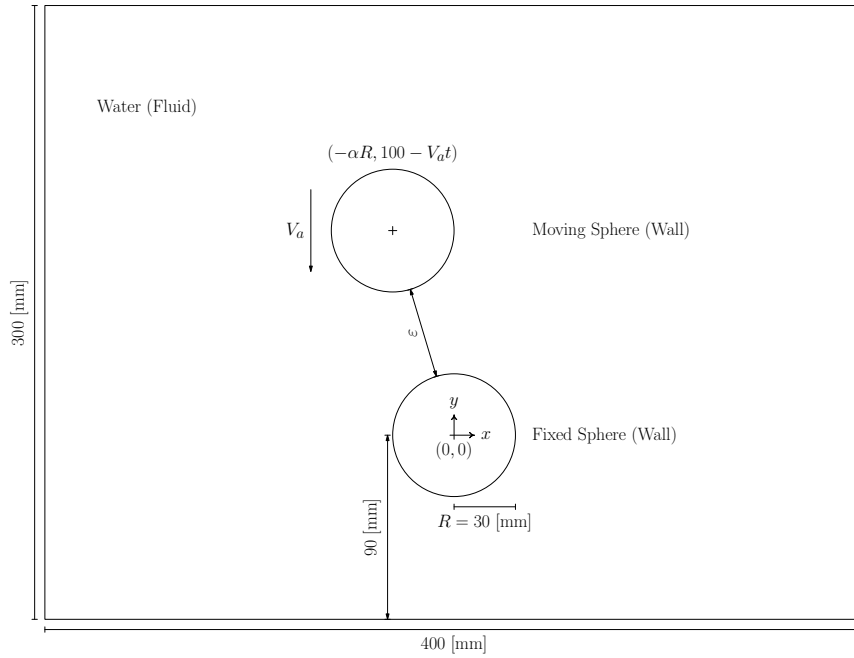


Figura 4.10: Modelo en corte de Simulación 3D Plano $x - z$.

, dónde

$$\varepsilon = \sqrt{(-\alpha R)^2 + (100 - V_a t)^2} - 2R$$

Luego se procede en la resolución de la ecuación de segundo grado generada anteriormente, para los distintos valores de α . Se escogen los valores temporales más pequeños, ya que los otros tiempos corresponden cuando la esfera superior primeramente traslapa la otra esfera y después se sitúa en el lugar de espaciamiento deseado.

Alpha [-]	Tiempo [s]
0	3.7
1	4.46
1.5	5.59
2	8.07

Cuadro 4.2: Tabla de resultados de tiempos requeridos para comparación de resultados.

4.3.2. Mallado

La Malla de la geometría se hace de forma automática con la herramienta Meshing de ANSYS Fluent, la serie de arreglos y comandos realizados se explican a continuación:

1. Se utilizan sólo elementos tetrahédricos de segundo orden para aumentar la precisión y estabilidad de la solución.
2. Se hace un Refinamiento de Mallado Adaptativo y Dinámico de tres veces en el entorno de la esfera móvil.
3. Se hace un Refinamiento de Mallado sobre una esfera de influencia de radio $R = 45[mm]$ desde el punto de tangencia.

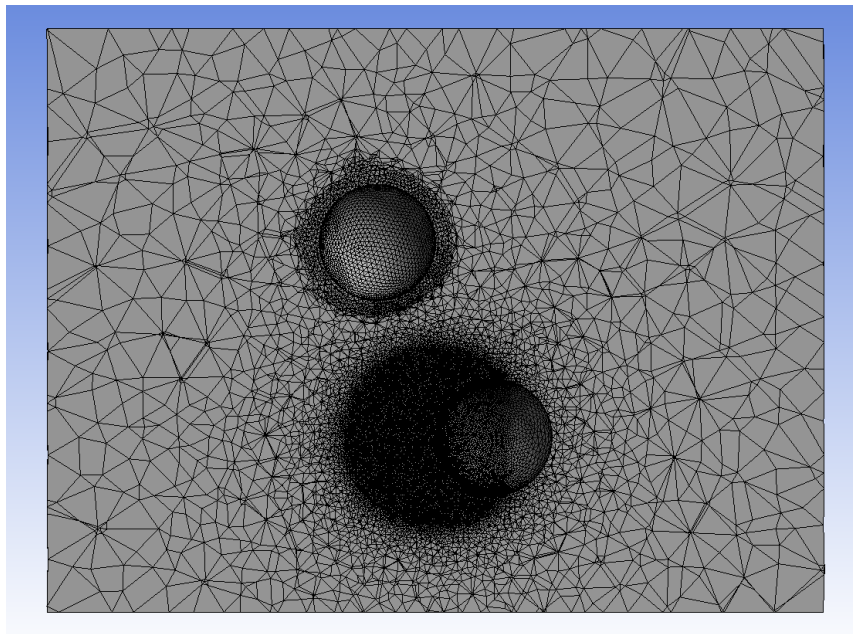


Figura 4.11: *Mallado de Simulación 3D.*

El número de nodos y elementos respectivos de la simulación 3D son:

Nodos	Elementos
543.296	3.202.192

4.3.3. Configuración de Parámetros

Se procede a cargar el archivo de la malla anterior en el solver de Fluent, luego se configura la simulación bajo los siguientes parámetros:

- Modelo: Se selecciona el modelo de Viscosidad Laminar.
- Materiales: Se determina que el cuerpo de la malla sea el medio fluido, quedando definido como Agua Líquida.
- Condiciones de Borde:
 1. Esfera Móvil: Condición de Pared.
 2. Esfera Fija: Condición de Pared.
 3. Interior del Dominio: Fluido.
 4. Bordes del Dominio: Condición de Flujo que Sale (Outflow).
- Malla Dinámica: Se eligen las opciones de remallado y suavizado sobre los límites de la esfera móvil. Además se define el movimiento de la esfera mediante la UDF.
- Metodo de Solución:
 1. Acoplamiento Presión-Velocidad: Algoritmo SIMPLE.
 2. Formulación Transiente: Implícito de Primer Orden, con factor de relajación $\alpha = 0.75$.
- Inicialización de Solución: Híbrida.
- Paso de tiempo: $t = 0.001[s]$

4.3.4. Resultados

Luego de haber obtenido los resultados de la simulación se traspassa la información a la herramienta Post-Procesing de ANSYS Fluent. En ella se dibujan las líneas verticales y horizontales correspondientes a las imágenes presentadas en el paper, que posteriormente son situadas y ajustadas entre las esferas. A continuación, para cada tiempo correspondiente se ubican los valores calculados de presión y velocidad en las líneas, y son graficadas en la misma interfaz del programa. Las imágenes creadas se muestran a continuación.

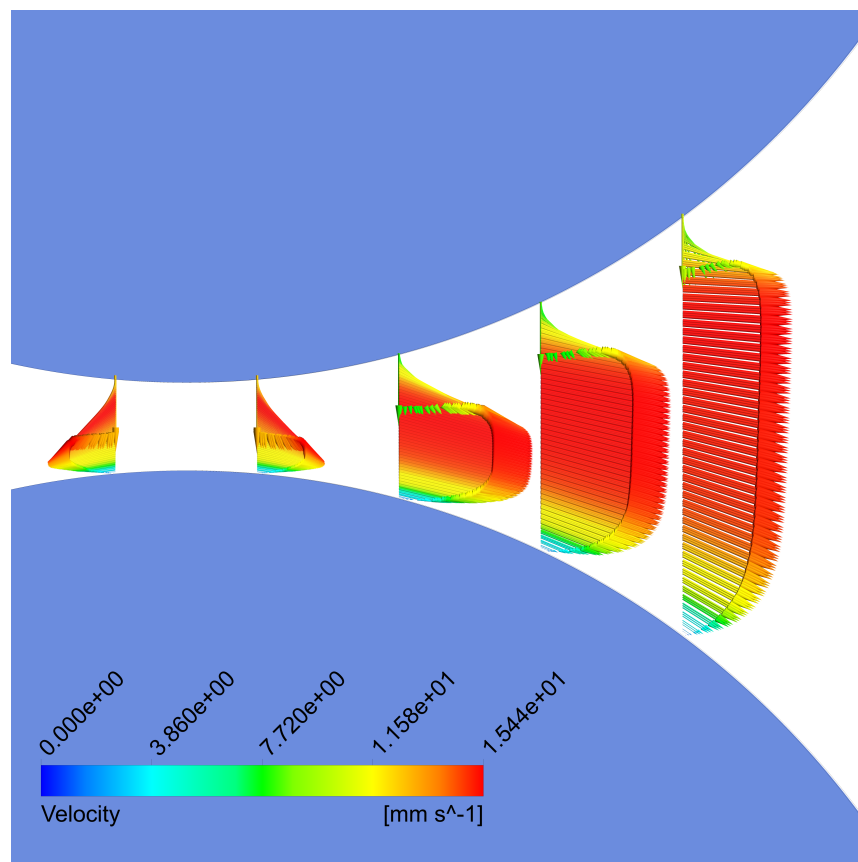


Figura 4.12: *Campo de Velocidad entre las esferas en $\varepsilon = R/10$ y $Re = 29$. Aproximación Frontal $\alpha = 0$.*

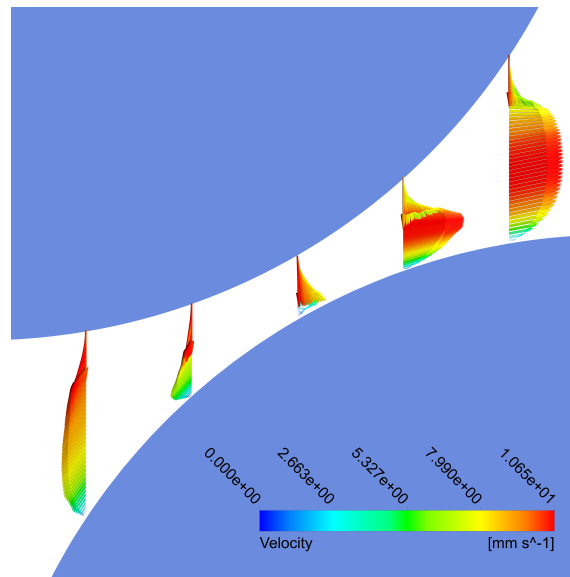


Figura 4.13: *Campo de Velocidad entre las esferas en $\varepsilon = R/10$ y $Re = 29$. Aproximación Oblicua $\alpha = 1$.*

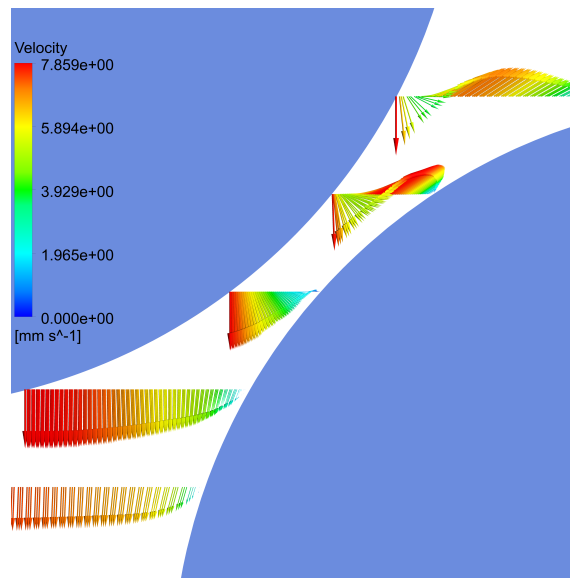


Figura 4.14: *Campo de Velocidad entre las esferas en $\varepsilon = R/10$ y $Re = 29$. Aproximación Oblicua $\alpha = 1.5$.*

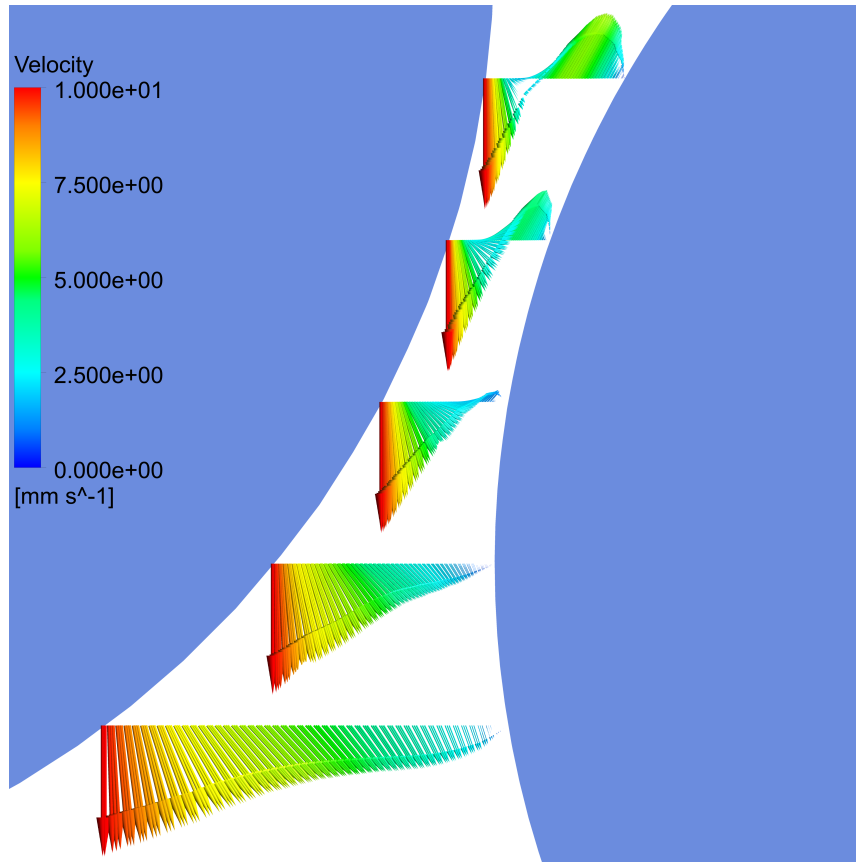


Figura 4.15: *Campo de Velocidad entre las esferas en $\varepsilon = R/10$ y $Re = 29$. Aproximación Oblicua $\alpha = 2$.*

Los resultados de la simulación 3D son los esperados. Los valores de la velocidad del campo de fluido circundante de la esfera móvil están en el orden de la velocidad impuesta V_a . En las imágenes $\alpha = 0$ y $\alpha = 1$, donde se puede apreciar una verdadera compresión del fluido entre las esferas, se observa que la velocidad aumenta entre un 5% y 50%. Mientras que en los gráficos $\alpha = 1.5$ y $\alpha = 2$ se aprecian puntos de inflexión e inversión de los valores en las componentes del campo de velocidad.

Finalmente se realiza un cuadro comparativo entre los resultados obtenidos y los resultados expuestos por el paper para el modelo de aproximación oblicua. Es menester mencionar que el paper no menciona valores reales a diferencia de los resultados de la simulación realizada. Por ende la comparación de resultados será sólo de manera cualitativa. A continuación el cuadro de semejanza con las figuras:

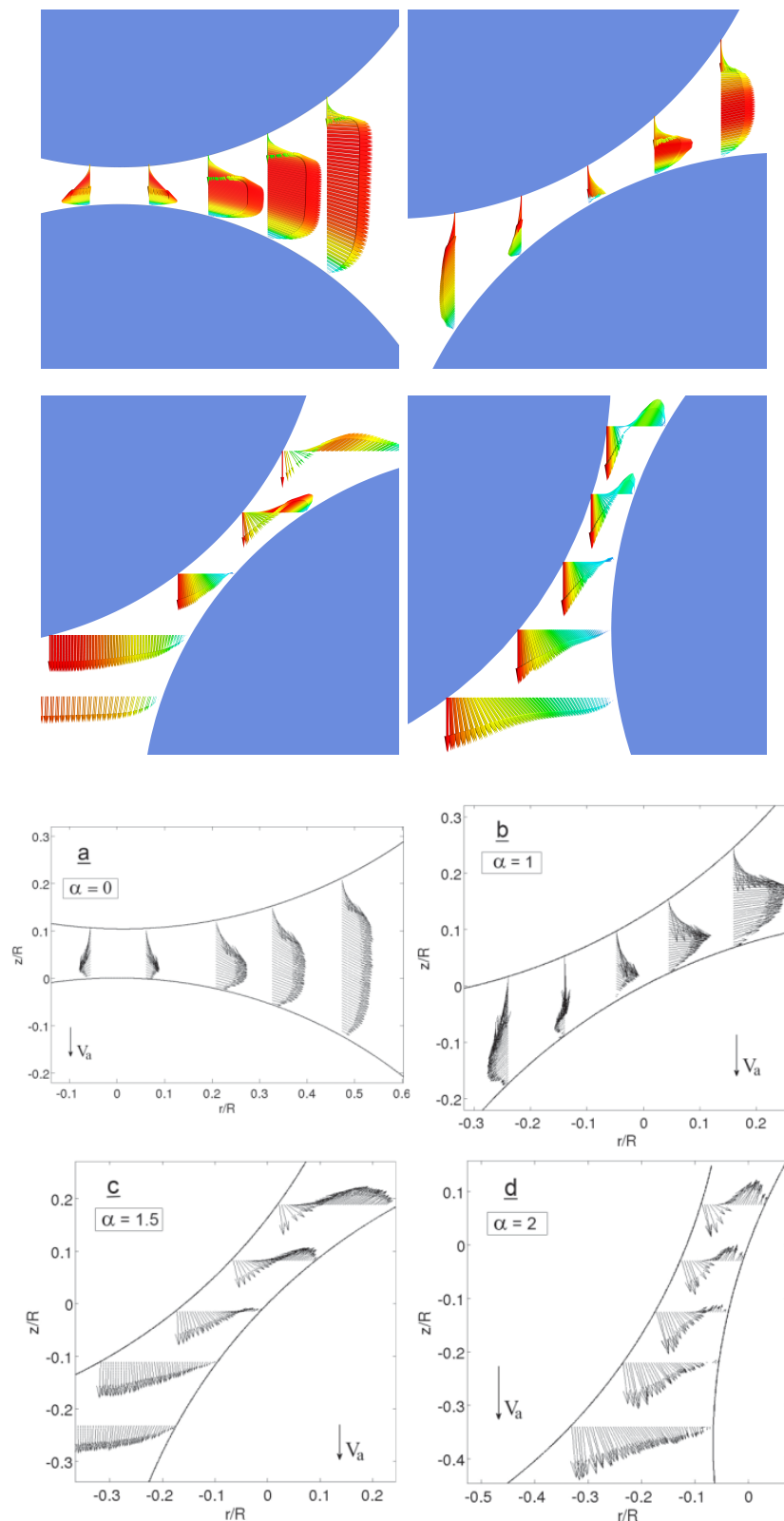


Figura 4.16: Comparación entre resultados obtenidos y (Gers et al., 2010).

Capítulo 5

Conclusiones

5.1. De la Investigación

En las últimas tres décadas se ha visto un crecimiento muy rápido en la cantidad de papers y artículos de investigación relacionados con la simulación de partículas. El objetivo y hacia donde apuntan las investigaciones redundan en el incremento de los conocimientos fundamentales de este tipo de flujos y las soluciones a problemáticas en la industria. De acuerdo a los métodos Lagrangianos, el método más común sigue siendo el **Point-Particle DNS**, sin embargo esas aproximaciones requieren del conocimiento de las fuerzas ejercidas por el fluido circulante alrededor de la partícula. Para partículas pequeñas las expresiones de las fuerzas son bien conocidas, pero restan algunos problemas. El más importante de ellos son los que están basados en el Campo no Perturbado de Velocidad en la posición de la partícula, ya que no es accesible de manera experimental. Para partículas más grandes, expresiones precisas para las fuerzas no son bien determinadas. Por tanto queda algo incierto hasta dónde es el alcance del Point-Particle Approach.

Soluciones para ambos casos pueden ser obtenidos mediante **Particle-Resolved Simulation**, en la cual el flujo alrededor de cada partícula es resuelta en detalle. Este modelo es posible solamente para una simulación con un número relativamente pequeño de partículas. Particle-resolved direct numerical simulation tiene la capacidad de estudiar las fuerzas sobre una partícula en flujo turbulento y entrega

la dirección de la forma como puede ser abordada bajo la modelación Point-particle, preferentemente sin la consideración de la fuerza de **Tchen**.

Dado la enorme diferencia en la cantidad de partículas que pueden ser tratadas con ambos métodos, el método point-particle jugará necesariamente un rol importante en la industria. La combinación de las dos técnicas puede ser un gran avance y descubrimiento en la capacidad predictiva de las futuras simulaciones.

Sin embargo DNS sigue siendo un método muy demandante en tiempo de cálculo para aplicaciones reales. Incluso para simulaciones de flujo de una fase, se espera que **RANS** y **LES** sean más famosos y utilizados en los años venideros. Por lo tanto, existe una necesidad de progreso en los métodos **Euler-Euler**, **RANS** y **LES** para la simulación de partículas con peso.

5.2. Del Trabajo Realizado

La simulación realizada en este trabajo pretende reproducir los resultados del paper (Gers et al., 2010). En líneas generales la simulación resultó ser exitosa y la fenomenología recreada tiene bastante similitud con la experimental. Respecto de los resultados obtenidos en la simulación numérica podemos decir que el tiempo empleado en ellas es acorde al número de nodos y elementos presentes. En la simulación 2D se ha utilizado un tiempo aproximado promedio de 30 minutos y en la simulación 3D un tiempo aproximado promedio de 1 hora y 45 minutos. Es menester mencionar que el experimento tomó varios meses de trabajo en su instalación, medición y procesamiento de datos, acumulando más de 2.5 Tb de información.

Las curvas de simulación 2D son bastante semejantes a las del paper, salvo en aquellas donde el número de Reynolds es inferior a 29, esto se puede deber a que existe mayor dispersión de energía cinética entre las partículas y el fluido. Cabe recordar que el experimento del paper es realizado en fluido con inyección de miles de partículas pequeñas, que mediante un láser se realiza el seguimiento

de cada partícula en la suspensión. La principal consideración en el experimento es la suposición de *One Way Coupling*, en la cual las partículas no inciden en la trayectoria del campo de fluido siguiendo de manera perfecta sus líneas de corriente. En las simulación 3D los resultados son bastante similares a los del paper, pese a que el paralelo entre ellos se realiza sólo de manera cualitativa.

La problemática simulación de flujos con partículas dista mucho de ser un problema acabado ya que aún se desconoce la física exacta asociada en ella. Existen varias preguntas que se pueden realizar que aún no tienen respuesta, entre ellas: ¿Existe contacto real entre las esferas cuando supuestamente chocan? ¿Quedará alguna capa fluida entre ellas que impidan que realmente se toquen? ¿Hasta qué nivel geométrico es posible diferenciar un esfera de un punto? ¿Hasta qué escala métrica aplica todo lo anterior... nanométrica?... planetaria?. En fin es un tema cuyo horizonte aún se encuentra en definición.

Apéndice A

Fuerza de Lubricación

El siguiente anexo está basado en el Apéndice de (Wagner et al., 2003). La Fuerza de Lubricación es la fuerza resultante y producida por el fluido cuando una partícula se acerca hacia una pared. Puede ser calculada como la presión, que posee el fluido que escurre entre las superficies, integrada en el área de la partícula.

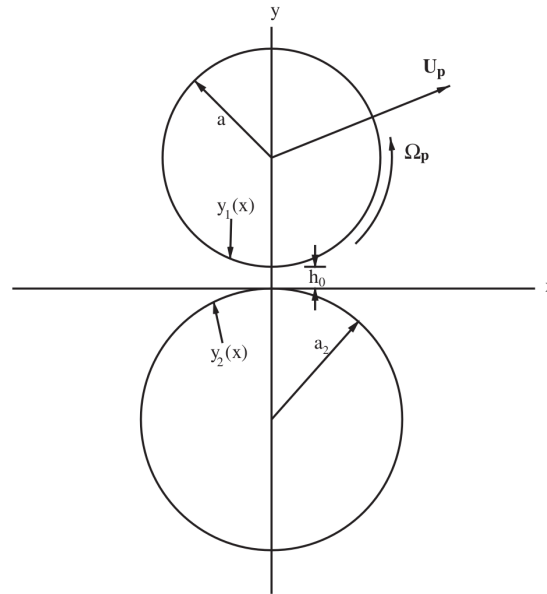


Figura A.1: Geometría para el modelado de la lubricación entre dos partículas.

En la representación anterior se consideran dos partículas inmersas en fluido Newtoniano de densidad ρ y viscosidad μ . El sistema coordenado se mueve con la

partícula de abajo, por tanto sobre este marco de referencia la partícula inferior permanece estacionaria, mientras que la partícula de arriba se traslada a velocidad $\vec{u}_p = U_p e_x + V_p e_y$ y rota a velocidad $\vec{\omega}_p = \Omega_p e_z$. El radio de la partícula superior e inferior son a y a_2 , respectivamente. Su distancia de separación más angosta es h_0 . Ahora, definiendo la razón $\gamma = a/a_2$, se aprecia que existen dos casos límites de interés:

1. Si $\gamma = 1$ el problema denota dos partículas de igual radio.
2. Si $\gamma = 0$ el problema se transforma en una partícula acercándose a una pared plana.

Se procede a utilizar el análisis de lubricación para calcular el flujo entre la separación de las partículas. Las superficies de los cuerpos situados en la separación vienen dados por:

$$\begin{aligned} y_1(x) &= a(1 + \varepsilon) - (a^2 - x^2)^{1/2} \\ y_2(x) &= -a_2 + (a_2^2 - x^2)^{1/2} \end{aligned}$$

Donde $\varepsilon = h_0/a$ es el parámetro pequeño sobre el cual realizaremos la expansión asintótica. Las variables independientes son escaladas, siendo ξ y η números sin dimensión:

$$\begin{aligned} x &= a\varepsilon^{1/2}\xi \\ y &= a\varepsilon\eta \end{aligned}$$

Luego de expandir en términos de ε , las superficies se reescriben como:

$$\begin{aligned} \eta_1(\xi) &= 1 + \frac{1}{2}\xi^2 + \frac{1}{8}\varepsilon\xi^4 + O(\varepsilon^2) \\ \eta_2(\xi) &= -\frac{1}{2}\gamma\xi^2 - \frac{1}{8}\gamma^3\varepsilon\xi^4 + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Los términos relevantes en la ecuación de Navier-Stokes ya adimensionalizada están balanceados si las variables dependientes son escaladas como sigue; $v/u \sim \varepsilon^{1/2}$ y

$p/u \sim \varepsilon^{-3/2}$. Expandiendo en ε se tiene:

$$\begin{aligned} u(x, y) &= \frac{\nu}{a} [U_0(\xi, \eta) + \varepsilon U_1(\xi, \eta) + \dots] \\ y(x, y) &= \frac{\nu}{a} \varepsilon^{1/2} [V_0(\xi, \eta) + \varepsilon V_1(\xi, \eta) + \dots] \\ p(x, y) &= \frac{\rho \nu^2}{a^2} \varepsilon^{-3/2} [P_0(\xi, \eta) + \varepsilon P_1(\xi, \eta) + \dots] \end{aligned}$$

La velocidad de la partícula superior puede ser adimensionalizadas de manera similar que las variables dependientes:

$$U_p = \frac{\nu}{a} \hat{U}_p; \quad V_p = \frac{\nu}{a} \varepsilon^{1/2} \hat{V}_p; \quad \Omega_p = \frac{\nu}{a^2} \hat{\Omega}_p$$

Resultando:

$$\begin{aligned} u(x, y_1) &= U_p + \Omega_p \times r \\ &= [U_p e_x + V_p e_y] + [\Omega_p e_z] \times [x e_x - (a^2 - x^2)^{1/2} e_y] \end{aligned}$$

Luego, expandiendo en ε y reescalando, las componentes de la velocidad en la superficie son:

$$\begin{aligned} U(\xi, \eta_1) &= \hat{U}_p + \hat{\Omega}_p (1 - \frac{1}{2} \varepsilon \xi^2 + \dots) \\ V(\xi, \eta_1) &= \hat{V}_p + \hat{\Omega}_p \xi \end{aligned}$$

La partícula inferior permanece estacionaria

$$U(\xi, \eta_2) = V(\xi, \eta_2) = 0$$

Se debe considerar que podría haber algún caudal volumétrico distinto de cero entre la partícula y la pared. Definiendo la cantidad \hat{Q} como el caudal adimensionalizado debido a un gradiente de presión externo, se puede derivar la condición de flujo a través de un volumen constante:

$$\hat{V}_p \xi - \hat{U}_p \eta_1(\xi) + \int_{\eta_2(\xi)}^{\eta_1(\xi)} U d\eta = -\frac{1}{2} \hat{U}_p + \frac{1}{2} \hat{\Omega}_p + \hat{Q}$$

Sustituyendo las expansiones de u, v y p en las ecuaciones de balance de masa y momentum, al primer orden de ε :

$$\begin{aligned}\frac{\partial U_0}{\partial \xi} + \frac{\partial V_0}{\partial \eta} &= 0 \\ \frac{\partial P_0}{\partial \xi} &= \frac{\partial^2 U_0}{\partial \eta^2} \\ \frac{\partial P_0}{\partial \eta} &= 0\end{aligned}$$

Las condiciones de borde y las de flujo son expresadas más fácil escribiendo las ecuaciones de las superficies de las partículas como sigue:

$$\begin{aligned}\eta_1(\xi) &= \eta_{1,0}(\xi) + \varepsilon \eta_{1,1}(\xi) + \dots \\ \eta_2(\xi) &= \eta_{2,0}(\xi) + \varepsilon \eta_{2,1}(\xi) + \dots\end{aligned}$$

Donde

$$\begin{aligned}\eta_{1,0}(\xi) &= 1 + \frac{1}{2}\xi^2 ; \eta_{1,1}(\xi) = \frac{1}{8}\xi^4 \\ \eta_{2,0}(\xi) &= -\frac{1}{2}\gamma\xi^2 ; \eta_{2,1}(\xi) = -\frac{1}{8}\gamma^3\xi^4\end{aligned}$$

Ahora podemos resolver las ecuaciones para el campo de velocidades y el gradiente de presión:

$$\begin{aligned}U_0 &= \frac{1}{2} \frac{dP_0}{d\xi} (\eta - \eta_{1,0})(\eta - \eta_{2,0}) + \frac{\eta - \eta_{2,0}}{\eta_{1,0} - \eta_{2,0}} (\hat{U}_p + \hat{\Omega}_p) \\ V_0 &= -\frac{1}{12} \frac{d^2 P_0}{d\xi^2} (\eta - \eta_{1,0})(2\eta + \eta_{2,0} - 3\eta_{1,0}) \\ &+ \frac{1}{4} \frac{dP_0}{d\xi} (\eta - \eta_{2,0})(\eta'_{1,0}(\eta - \eta_{2,0}) + \eta'_{2,0}(\eta - 2\eta_{1,0} + \eta_{2,0})) \\ &+ \frac{\hat{U}_p + \hat{\Omega}_p}{(\eta_{1,0} - \eta_{2,0})^2} \left(\frac{1}{2} (\eta^2 - \eta_{2,0}^2) (\eta'_{1,0} - \eta'_{2,0}) \right. \\ &\left. + (\eta - \eta_{2,0})(\eta_{1,0}\eta'_{2,0} - \eta'_{1,0}\eta_{2,0}) \right) \\ \frac{dP_0}{d\xi} &= (\eta_{1,0} - \eta_{2,0})^{-3} \left[12\hat{V}_p\xi + 6(\hat{U} + \hat{\Omega})(\eta_{1,0} - \eta_{2,0}) + 6(\hat{U} - \hat{\Omega}) - 12\hat{U}_p\eta_{1,0} - 12\hat{Q} \right]\end{aligned}$$

La presión al primer orden queda determinada por una constante, y es obtenida integrando la ec. (26) en ξ . El resultado es complicado, pero puede ser simplificado considerablemente dependiendo del valor de γ :

- Si $\gamma = 1$ (partículas de igual radio)

$$P_0(\xi) = \frac{3}{4(1 + \xi^2)^2} \left([6\xi^3 + 10\xi + 6(1 + \xi^2)^2 \arctan(\xi)] \hat{Q} - 3\hat{V}_p + [\xi^3 - \xi + (1 + \xi^2)^2 \arctan(\xi)] \hat{\Omega}_p \right)$$

- Si $\gamma = 0$ (partícula cerca de pared)

$$P_0(\xi) = \left(\frac{-3}{2\sqrt{2}} \arctan\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) - \frac{3\xi}{2(2 + \xi^2)} + \frac{6\xi}{(2 + \xi^2)^2} \right) \hat{U}_p + \left(-\frac{9\xi}{2 + \xi^2} - \frac{9}{\sqrt{2}} \arctan\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) - \frac{12\xi}{(2 + \xi^2)^2} \right) \hat{Q} + \left(-\frac{6\xi}{(2 + \xi^2)^2} - \frac{3}{2\sqrt{2}} \arctan\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) + \frac{3\xi}{2(2 + \xi^2)} \right) \hat{\Omega}_p - \frac{24}{(2 + \xi^2)^2} \hat{V}_p$$

Así, todo el flujo queda definido en términos de sólo cuatro grados de libertad: La velocidad y rotación de la partícula superior (\hat{U}_p, \hat{V}_p y $\hat{\Omega}_p$), el caudal producido por un gradiente de presión externo (\hat{Q}).

Es posible superponer en esta la solución el caso donde la partícula superior queda estacionaria y la partícula inferior se mueve. Esto añade tres grados de libertad adicional en el problema (las velocidades en x e y y la rotación de la partícula de abajo), esto da un total de 7 grados de libertad al problema que definen la velocidad y la presión de fluido en la región de lubricación.

Bibliografía

Release 12.0 ANSYS Fluent Theory Guide. 2009. URL https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/main_pre.htm.

Release 12.0 ANSYS Fluent UDF Manual. 2009. URL https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/udf/main_pre.htm.

Release 12.0 ANSYS Fluent User's Guide. 2009. URL https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/ug/main_pre.htm.

Vincenzo Armenio y Virgilio Fiorotto. The importance of the forces acting on particles in turbulent flows. *Physics of Fluids*, 13(8):2437–2440, 2001.

TR Auton. The lift force on a spherical body in a rotational flow. *Journal of fluid Mechanics*, 183:199–218, 1987.

Prosenjit Bagchi y S Balachandar. Effect of turbulence on the drag and lift of a particle. *Physics of fluids*, 15(11):3496–3513, 2003.

S Balachandar y John K Eaton. Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual review of fluid mechanics*, 42:111–133, 2010.

S Balachandar y MR Maxey. Methods for evaluating fluid velocities in spectral simulations of turbulence. *Journal of Computational Physics*, 83(1):96–125, 1989.

Marc Boivin, Olivier Simonin, y Kyle D Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 375:235–263, 1998.

- Howard Brenner. The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface. *Chemical Engineering Science*, 16(3):242 – 251, 1961. ISSN 0009-2509. doi:[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(61\)80035-3](https://doi.org/10.1016/0009-2509(61)80035-3).
- D Burry y G Bergeles. Dispersion of particles in anisotropic turbulent flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 19(4):651–664, 1993.
- Tristan M Burton y John K Eaton. Fully resolved simulations of particle-turbulence interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 545:67–111, 2005.
- Roland Clift, John R Grace, y Martin E Weber. *Bubbles, drops, and particles*. Courier Corporation, 2005.
- Raymond G Cox y Howard Brenner. The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface ii small gap widths, including inertial effects. *Chemical Engineering Science*, 22(12):1753–1777, 1967.
- P. A. Cundall y O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1):47–65, 1979. doi:10.1680/geot.1979.29.1.47.
- Chris D Dritselis y Nicholas S Vlachos. Numerical study of educed coherent structures in the near-wall region of a particle-laden channel flow. *Physics of Fluids*, 20(5):055103, 2008.
- John K Eaton. Two-way coupled turbulence simulations of gas-particle flows using point-particle tracking. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(9):792–800, 2009.
- S. Elghobashi. On predicting particle-laden turbulent flows. *Applied Scientific Research*, 52(4):309–329, 1994. ISSN 1573-1987. doi:10.1007/BF00936835.
- S Elghobashi y GC Truesdell. Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 242:655–700, 1992.
- Samuel F. Foerster, Michel Louge, Hongder Chang, y Khedidja Allia. Measurements of the collision properties of small spheres. *Physics of Fluids - PHYS FLUIDS*, 6:1108–1115, 1994. doi:10.1063/1.868282.

- Romain Gers, Dominique Anne-Archard, Eric Climent, Dominique Legendre, y Christine Frances. Two colliding grinding beads: Experimental flow fields and particle capture efficiency. *Chemical Engineering & Technology*, 33(9):1438–1446, 2010.
- R. Glowinski, T.-W. Pan, T.I. Hesla, y D.D. Joseph. A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(5):755 – 794, 1999. ISSN 0301-9322. doi:[https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(98\)00048-2](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(98)00048-2).
- DI Graham y PW James. Turbulent dispersion of particles using eddy interaction models. *International Journal of Multiphase Flow*, 22(1):157–175, 1996.
- Robert H. Davis, Jean-Marc Serayssol, y E J. Hinch. The elastohydrodynamic collision of two spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 163:479 – 497, 1986. doi:10.1017/S0022112086002392.
- Holger Homann y Jeremie Bec. Finite-size effects in the dynamics of neutrally buoyant particles in turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 651:81–91, 2010.
- Tobias Kempe y Jochen Frohlich. Collision modelling for the interface-resolved simulation of spherical particles in viscous fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 709:445, 2012. doi:10.1017/jfm.2012.343.
- K Kontomaris, TJ Hanratty, y JB McLaughlin. An algorithm for tracking fluid particles in a spectral simulation of turbulent channel flow. *Journal of Computational Physics*, 103(2):231–242, 1992.
- Johannes GM Kuerten. Point-particle dns and les of particle-laden turbulent flow—a state-of-the-art review. *Flow, turbulence and combustion*, 97(3):689–713, 2016.
- AJC Ladd y R Verberg. Lattice-boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. *Journal of statistical physics*, 104(5-6):1191–1251, 2001.
- Junghoon Lee y Changhoon Lee. Modification of particle-laden near-wall turbulence: effect of stokes number. *Physics of Fluids*, 27(2):023303, 2015.

- Dominique Legendre, Roberto Zenit, Claude Daniel, y Pascal Guiraud. A note on the modelling of the bouncing of spherical drops or solid spheres on a wall in viscous fluid. *Chemical Engineering Science*, 61(11):3543 – 3549, 2006. ISSN 0009-2509. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.12.028>.
- CKK Lun y HS Liu. Numerical simulation of dilute turbulent gas-solid flows in horizontal channels. *International Journal of Multiphase Flow*, 23(3):575–605, 1997.
- Enrica Masi, Olivier Simonin, Eleonore Riber, P Sierra, y Laurent YM Gicquel. Development of an algebraic-closure-based moment method for unsteady eulerian simulations of particle-laden turbulent flows in very dilute regime. *International Journal of Multiphase Flow*, 58:257–278, 2014.
- Martin R Maxey y James J Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *The Physics of Fluids*, 26(4):883–889, 1983.
- John B McLaughlin. Aerosol particle deposition in numerically simulated channel flow. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 1(7):1211–1224, 1989.
- B Oesterle y A Petitjean. Simulation of particle-to-particle interactions in gas solid flows. *International journal of multiphase flow*, 19(1):199–211, 1993.
- Y Pan y S Banerjee. Numerical simulation of particle interactions with wall turbulence. *Physics of Fluids*, 8(10):2733–2755, 1996.
- Jacek Pozorski y Jean-Pierre Minier. Probability density function modeling of dispersed two-phase turbulent flows. *Physical Review E*, 59(1):855, 1999.
- MW Reeks. The transport of discrete particles in inhomogeneous turbulence. *Journal of aerosol science*, 14(6):729–739, 1983.
- James J Riley y GS Patterson Jr. Diffusion experiments with numerically integrated isotropic turbulence. *The Physics of Fluids*, 17(2):292–297, 1974.
- SI Rubinow y Joseph B Keller. The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 11(3):447–459, 1961.

- PGF Saffman y JS Turner. On the collision of drops in turbulent clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, 1(1):16–30, 1956.
- John D Schwarzkopf, Martin Sommerfeld, Clayton T Crowe, y Yutaka Tsuji. *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC press, 2011.
- C Siewert, RPJ Kunnen, y Wolfgang Schröder. Collision rates of small ellipsoids settling in turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 758:686–701, 2014.
- Shivshankar Sundaram y Lance R Collins. Collision statistics in an isotropic particle-laden turbulent suspension. part 1. direct numerical simulations. *Journal of Fluid Mechanics*, 335:75–109, 1997.
- S Takagi, HN Oguz, Z Zhang, y Andrea Prosperetti. Physalis: A new method for particle simulation: Part ii: Two-dimensional navier–stokes flow around cylinders. *Journal of Computational Physics*, 187(2):371–390, 2003.
- Anne Taniere y Boris Arcen. Prediction of a particle-laden turbulent channel flow: Examination of two classes of stochastic dispersion models. *International Journal of Multiphase Flow*, 60:1–10, 2014.
- Sudheer Tenneti y Shankar Subramaniam. Particle-resolved direct numerical simulation for gas-solid flow model development. *Annual review of fluid mechanics*, 46:199–230, 2014.
- Federico Toschi y Eberhard Bodenschatz. Lagrangian properties of particles in turbulence. *Annual review of fluid mechanics*, 41:375–404, 2009.
- Yutaka Tsuji, Toshihiro Kawaguchi, y Toshitsugu Tanaka. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder technology*, 77(1):79–87, 1993.
- Markus Uhlmann. Interface-resolved direct numerical simulation of vertical particulate channel flow in the turbulent regime. *Physics of Fluids*, 20(5):053305, 2008.
- MAT Van Hinsberg, JHM ten Thije Boonkamp, y Hans JH Clercx. An efficient, second order method for the approximation of the basset history force. *Journal of Computational Physics*, 230(4):1465–1478, 2011.

- AW Vreman. Turbulence characteristics of particle-laden pipe flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 584:235–279, 2007.
- AW Vreman. Turbulence attenuation in particle-laden flow in smooth and rough channels. *Journal of Fluid Mechanics*, 773:103–136, 2015.
- AW Vreman. Particle-resolved direct numerical simulation of homogeneous isotropic turbulence modified by small fixed spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 796:40–85, 2016.
- Gregory J Wagner, Sandip Ghosal, y Wing K Liu. Particulate flow simulations using lubrication theory solution enrichment. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56(9):1261–1289, 2003.
- Lian-Ping Wang, Anthony S Wexler, y Yong Zhou. Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 415:117–153, 2000.
- PK Yeung y SB Pope. An algorithm for tracking fluid particles in numerical simulations of homogeneous turbulence. *Journal of computational physics*, 79(2):373–416, 1988.
- Z Zhang y A Prosperetti. A second-order method for three-dimensional particle simulation. *Journal of Computational Physics*, 210(1):292–324, 2005.
- F Zhao, WK George, y BGM Van Wachem. Four-way coupled simulations of small particles in turbulent channel flow: The effects of particle shape and stokes number. *Physics of Fluids*, 27(8):083301, 2015.
- LH Zhao, Helge I Andersson, y JJJ Gillissen. Turbulence modulation and drag reduction by spherical particles. *Physics of Fluids*, 22(8):081702, 2010.