



UNIVERSIDAD **NACIONAL** DE COLOMBIA
SEDE BOGOTÁ
FACULTAD DE INGENIERÍA
ÁREA CURRICULAR DE INGENIERÍA CIVIL Y AGRÍCOLA
PROGRAMA DE PREGRADO EN INGENIERÍA CIVIL

APLICACIÓN DEL MODELO $k - \epsilon$ PARA LA SOLUCIÓN DE FLUJO TURBULENTO EN CONDUCTOS A PRESIÓN

Victor Hernán Garzón Rodríguez



ciencia, tecnología e innovación para el país

Bogotá, Colombia

”150 años Construyendo Nación con Ingenio Propio”

APLICACIÓN DEL MODELO $k - \epsilon$ PARA LA SOLUCIÓN DE FLUJO TURBULENTO EN CONDUCTOS A PRESIÓN

Victor Hernán Garzón Rodríguez

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:
Ingeniero Civil

Director:
Pedro Mauricio Avellaneda López Ph.D.
Profesor Asistente

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Civil y Agrícola
Bogotá, Colombia
2012

Un gran descubrimiento resuelve un gran problema, pero en la solución de cualquier problema hay una pizca de descubrimiento. Tu problema puede ser modesto, pero si es un reto para tu curiosidad y hace que entre en juego tus facultades de inventiva, y si lo resuelves con tus propios medios, experimentarás la tensión y gozarás el triunfo del descubrimiento.

George Polya

Agradecimientos

Mi profundo agradecimiento a todos los que hicieron posible que se desarrollara mi formación en Ingeniería en estos años, dentro de mi tan querida alma máter.

Agradezco a la compañía del profesor Pedro Avellaneda, quien aportó su conocimiento y experiencia en la asesoría de mi trabajo de grado.

Mi gratitud especial a mis amigos Andrés Camacho y Cristian Rincón, quienes han venido compartiendo sus conocimientos en lenguajes de programación y herramientas computacionales, lo que facilitó considerablemente el desarrollo de este trabajo.

Por último agradezco a la comunidad científica internacional que dedicada a los temas aquí tratados, aclararon varias dudas que se generaron en el camino, mediante las preguntas y opiniones publicadas en blogs y en páginas de discusión en la web.

Resumen

Se utilizó el lenguaje de programación OpenFOAM para implementar el modelo $k - \epsilon$ de flujo turbulento en 3D para dos accesorios de tuberías a presión. Se propuso identificar los perfiles de velocidad y de presiones que se presenten en cualquier sección de los accesorios. Se espera que las herramientas desarrolladas se usen en los cursos de Mecánica de Fluidos, e Hidráulica Básica del programa de Ingeniería Civil de la Universidad Nacional sede Bogotá

Palabras clave: Flujo Turbulento, OpenFOAM, Conductos a Presión, Modelo $k - \epsilon$.

Abstract

It was used the OpenFOAM language of programming in order to use the standart $k - \epsilon$ model of 3D turbulent flux for two pipe accesories. It was proposed to identify speed and pressure profiles, which be present in any seccion of the accesory. It is hoped that the developed tools be used for the courses of Fluid Mechanics, and Basic Hydraulics from Civil Engineering program of the Universidad Nacional de Colombia Bogotá.

Keywords: Turbulent flow, OpenFOAM, Pipe Flow, $k - \epsilon$ standart model

Contenido

Agradecimientos	VII
Resumen	IX
Lista de símbolos	XIX
Introducción	1
1. Capítulo 1. Fundamentación	3
1.1. La Dinámica Computacional de Fluidos	3
1.1.1. Como una herramienta de investigación	4
1.1.2. Como una herramienta educacional para entender las bases de la dinámica de fluidos	4
1.1.3. Como herramienta para los proyectos de ingeniería	4
1.2. Ecuaciones Fundamentales	4
1.2.1. Ecuación de Continuidad	5
1.2.2. Ecuación de Momentum	5
1.2.3. Ecuación de Energía	6
1.2.4. Ecuación de estado	6
1.3. Condiciones de Contorno	7
1.3.1. Paredes rígidas	7
1.3.2. Entradas y salidas	7
1.3.3. Otras condiciones	8
1.4. La Turbulencia	8
1.4.1. Irregularidad, dependencia del tiempo y tridimensionalidad	9
1.4.2. Comportamiento casi caótico	10
1.4.3. Amplia gama de escalas en tiempo y espacio	10
1.4.4. Fuerte Mezcla	10
1.4.5. Estructuras Coherentes	10
2. Capítulo 2. Modelación de la Turbulencia	13
2.1. Ecuaciones promedio de Reynolds. Modelos <i>RANS</i>	14
2.1.1. Forma promedio de Reynolds de la Ecuación de Continuidad	15
2.1.2. Forma promedio de Reynolds de la Ecuación de Momentum	15

2.1.3. Forma promedio de Reynolds de la Ecuación de Energía	15
2.2. Terminología de la modelación	16
2.3. Modelo $k - \epsilon$. Modelo de dos ecuaciones	16
2.4. Forma Genérica de las ecuaciones de gobierno en la <i>CFD</i>	18
3. Capítulo 3. La Modelación Numérica	21
3.1. Componentes de una solución numérica	22
3.2. Propiedades de una Solución numérica	23
3.3. El Método de los Volúmenes Finitos MVF	24
3.3.1. Formulación	25
3.3.2. Solución Numérica	27
3.4. Implementación Numérica del modelo $k - \epsilon$	28
4. Capítulo 4. Proceso de Solución	31
4.1. Proceso de Análisis en <i>CFD</i>	31
4.1.1. Pre-proceso. Definición del Problema	32
4.1.2. Proceso. Solución Numérica	34
4.1.3. Post-Proceso. Reporte de resultados y visualización	35
4.2. Verificación de los modelos <i>CFD</i>	36
4.3. Caso 1. Flujo en un codo	36
4.3.1. Descripción del modelo	37
4.3.2. Malla	38
4.3.3. Condiciones iniciales y de Contorno	39
4.3.4. Características de la simulación	40
4.3.5. Resultados	41
4.4. Caso 2. Flujo en una conexión tipo T	44
4.4.1. Descripción del modelo	44
4.4.2. Malla	45
4.4.3. Condiciones de Contorno	45
4.4.4. Características de la simulación	47
4.4.5. Resultados	48
5. Conclusiones y Recomendaciones	51
5.1. Conclusiones	51
5.2. Recomendaciones a futuros Trabajos	52
A. Anexo: Sobre los software empleados	55
A.1. OpenFOAM	55
A.1.1. Estructura	55
A.2. Gmsh	57
A.3. Discretizer	58

Bibliografía

61

Lista de Figuras

1-1. Esquema de Da Vinci del flujo turbulento (Tomado de Pisarenco, 2007) . . .	9
1-2. Velocidad fluctuante en el tiempo en un cierto punto de un flujo turbulento .	9
1-3. Tomas instantáneas en la sección de un canal modelado computacionalmente (Tomado de Zikanov, 2010)	11
3-1. Celda o volumen finito	25
4-1. Conexión de los tres elementos principales en el análisis en <i>CFD</i> . (Tomado de Jiyuan Tu, 2008)	32
4-2. Diferentes procesos físicos usuales en la <i>CFD</i>	33
4-3. Geometría del modelo empleado de un codo	37
4-4. Malla empleada diseñada con el software Gmsh. a) vista en planta de la malla empleada en el codo. b) sección transversal de la malla empleada para la tubería	38
4-5. Bordes empleados para las condiciones de contorno. a) Plano de simetría, b) Pared, c) Entrada, d) Salida	39
4-6. Soluciones obtenidas tras la simulación de la turbulencia para la velocidad del flujo. a) Visualización de la magnitud del vector velocidad asociado a cada volumen finito, b) Vista de los perfiles de velocidad para diferentes secciones, c) Gráfico de Vectores de Velocidad, d) Gráfico de líneas de Corriente	42
4-7. Soluciones obtenidas tras la simulación de la turbulencia para la Presión . .	43
4-8. Geometría del modelo de Te, empleada. En la fotografía se muestra el modelo físico estudiado por Anderson <i>et al.</i> (2006)	45
4-9. Malla de volúmenes finitos empleada para la simulación del flujo en una Te. a) detalle de la sección transversal, b) detalle de la unión entre las dos tuberías, c) esquema general de la malla	46
4-10. Resultados para la velocidad de la simulación. a) Vista transversal del campo de velocidades en el plano $y = 0$. b) Vista de los perfiles transversales de velocidad. c) Visualización de la tendencia de las líneas de corriente	48
4-11. Resultados para valores de Presión P/ρ	49
A-1. Esquema de organización de los módulos en C++ que emplea el solucionador simpleFoam	56
A-2. Esquema de ventana del visualizador de OpenFOAM ParaView	58

A-3. Interfaz de Gmsh	59
A-4. Interfaz de Discretizer	60

Lista de Tablas

2-1.	Forma general de las ecuaciones de gobierno para flujo compresible	19
4-1.	Características de la malla empleada	39
4-2.	Evaluación de condiciones iniciales	41
4-3.	Características de la malla empleada para el caso de la Te	47
4-4.	Evaluación de condiciones iniciales para el caso de la Te	47

Lista de símbolos

Símbolos con letras latinas

Símbolo	Término
e	Energía Interna por unidad de masa
$\underline{f}$	Fuerza por unidad de masa
I	Intensidad de la Turbulencia
$k_{\circ T}$	Coefficiente de conductividad térmica de Fourier
$k, \overline{k}$	Energía Cinética de la turbulencia
l	Longitud de mezcla de Prandtl
L	Longitud característica
$\underline{n}$	Vector normal a la superficie
P	Presión
Pr	Número de Prandtl
$\underline{q}$	Pérdida de calor por conducción
Q	Calor producida por unidad de volumen por la acción de agentes externos
R	Constante de la ley universal de gases
Re	Número de Reynolds
t	Tiempo
T	Temperatura
$\underline{v}$	Vector velocidad del flujo $\underline{v} = (v_x, v_y, v_z)$
$\overline{v}$	Velocidad media del flujo
v'	Fluctuaciones generadas en la velocidad por efectos de la turbulencia
v_T	Velocidad característica de la turbulencia
v_{τ}	Velocidad de corte
$\underline{x}$	Vector de coordenadas espaciales $\underline{x} = (x, y, z)$

Símbolo	Término
z_P	Coordenada de un punto normal a una superficie de contorno

Símbolos con letras griegas

Símbolo	Término
δ_{ij}	Función Delta de Kronecker
ϵ	Tasa de disipación de la energía por la Turbulencia
κ	Constante de Von Kartman
μ	Viscosidad dinámica
μ_T	Viscosidad de la turbulencia
ν	Viscosidad cinemática $\nu = \mu/\rho$
ρ	Densidad
τ_w	Esfuerzo cortante viscoso
ϕ	Variable de estudio del flujo
Γ	Coefficiente de difusión
Φ	Tasa de discipación: Tasa a la que la energía mecánica se gasta en el proceso de deformación del fluido debido a la viscosidad

Abreviaturas

Abreviatura	Término
$2D$	Dos Dimensiones
$3D$	Tres Dimensiones
CFD	Dinámica Computacional de Fluidos (Computational Fluid Dynamics)
EDP	Ecuaciones diferenciales parciales
DNS	Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation)
LES	Simulaciones de grandes escalas (Large Eddy Simulation)

Abreviatura	Término
<i>MDF</i>	Método de las diferencias Finitas
<i>MVF</i>	Método de los volúmenes finitos
<i>RANS</i>	Ecuaciones Promedio de Reynolds (Reynolds Averaged Navier-Stokes)
<i>SGS</i>	Escalas Sub-Grid (Sub-Grid Escales)

Introducción

Debido a las grandes escalas que se manejan en las estructuras hidráulicas, las altas velocidades y consecuentemente los altos números de Reynolds, las condiciones del flujo de aguas superficiales tienden a ser en su mayoría turbulentas. Bajo estas condiciones, se presentan fenómenos de continuo interés en ingeniería como los fenómenos de cavitación, la aeración de la superficie libre en canales con flujo supercrítico, los cambios de presión sobre superficies sólidas, los fenómenos de disipación de energía en resaltos hidráulicos o el arrastre de sedimentos en ríos.

Los estudios que en las últimas décadas se han desarrollado gracias a los avances en la capacidad de procesamiento de los computadores marca una tendencia a que en un futuro las simulaciones numéricas asistidas por computadora reemplacen los métodos más aproximados de diseño en las aplicaciones de ingeniería usadas actualmente [23].

En este contexto, diferentes comunidades científicas entre físicos, e ingenieros, han ido desarrollando modelos que intentan hacer una aproximación a la turbulencia; modelos que con el tiempo han venido revisándose, replanteándose y mejorándose. A pesar de estos esfuerzos de las comunidades científicas, aún no se ha definido un modelo último de la turbulencia, puesto que hasta ahora, nadie ha encontrado una forma de describir y predecir flujos turbulentos matemáticamente, de forma que se den soluciones explícitas a las ecuaciones de Navier-Stokes [25].

Generalmente se considera que han habido tres caminos para abordar la solución al flujo de fluidos: 1) *Aproximaciones Teóricas* que usan las ecuaciones que gobiernan el flujo para encontrar soluciones analíticas, 2) *Aproximaciones Experimentales* que utilizan un cuidadoso diseño experimental usando un modelo de los objetos reales, y 3) *Aproximaciones Numéricas* que usan procedimientos computacionales para encontrar la solución. El constante desarrollo del desempeño de los computadores ha permitido que, de la mano de la conformación de modelos de turbulencia, se haya venido desarrollando software especializado que permite simplificar la labor de quienes hacen los modelos, albergando en sus códigos algoritmos que traen los planteamientos de las soluciones numéricas de las ecuaciones del flujo turbulento, campo que se ve mas promisorio comparado con la búsqueda de soluciones analíticas o experimentales dadas sus limitaciones y dificultades técnicas.

Dentro de trabajos dedicados anteriormente a estos temas dentro de la Universidad Nacional de Colombia, el estudiante Adrián Lievano, del programa de Ingeniería Mecánica, en 2003

presentó como Trabajo de grado un programa de modelación de flujo incompresible Laminar y turbulento para tuberías en $2D$. Con este programa el estudiante presentó a sus usuarios la modelación de la turbulencia usando el método $k - \epsilon$ mediante el método numérico de las diferencias finitas para dar solución a las ecuaciones diferenciales correspondientes. Sin embargo, dentro de la actual Dinámica Computacional de Fluidos, la mayoría de los software comerciales adoptan la discretización del dominio del problema mediante el método de los Volúmenes Finitos, para obtener soluciones numéricas a problemas complejos del flujo de fluidos, dadas ciertas bondades que tiene este método por encima de las diferencias finitas [24]. Esto conforma un llamado a entender la percepción que está tomando la ingeniería para abordar el tema de la turbulencia, buscando desde la academia poder entender las bondades, limitaciones y posibilidades de las metodologías empleadas.

El presente trabajo, pretende entonces construir herramientas que permitan a la comunidad de estudiantes de pregrado de Ingeniería Civil de la Universidad Nacional, conceptualizar los fenómenos de turbulencia, mediante su modelación, tratando de refinar la metodología empleada anteriormente en la Universidad Nacional [16] a través de la implementación de los elementos finitos y del modelo $k - \epsilon$, con software especializado para ello.

Mediante el paquete OpenFOAM, un software libre, a código abierto de Dinámica Computacional de Fluidos, desarrollado por el equipo OpenFOAM de SGI Corp, el cual desarrolla modelos de turbulencia con el método numérico de los Volúmenes Finitos, se busca presentar la modelación de problemas típicos de turbulencia en conductos a presión como codos y tes; de forma que se incentive en los cursos de Mecánica de Fluidos e Hidráulica Básica el modelamiento de la turbulencia, en pro a responder a las tendencias mundiales.

En ese sentido, los primeros tres capítulos hacen una recopilación bibliográfica de conceptos fundamentales. En los capítulos siguientes se presenta la implementación del modelos $k - \epsilon$ con diferentes software de apoyo a OpenFOAM y que pueden hacer el trabajo de un estudiante incitado por la modelación, mas adsequible cuando no se tiene mayor afinidad con la programación.

1. Capítulo 1. Fundamentación

En este capítulo se presentan los conceptos básicos para poder abarcar la modelación de la turbulencia. Para ello se hace un breve recorrido sobre conceptos de la Dinámica Computacional de Fluidos (*CFD* por sus siglas en inglés), asociados a las ecuaciones que gobiernan la mecánica de fluidos, junto con las ecuaciones que hoy se consideran, rigen el flujo turbulento en el régimen continuo. Para las primeras, se considera que el lector ya tiene algunos fundamentos, por lo que solo se enuncian y no se enfatiza en la deducción de ellas, las cuales se encuentran fácilmente en cualquier texto de Mecánica de Fluidos.

1.1. La Dinámica Computacional de Fluidos

De acuerdo a Zikanov (2010), la Dinámica Computacional de Fluidos (*CFD* por sus siglas en inglés) es un conjunto de métodos numéricos que tienen como objetivo encontrar solución a problemas de dinámica de fluidos y transferencia de calor. En este sentido, *CFD* se convierte no en una ciencia, sino en una forma de aplicar soluciones numéricas mediante programas computacionales a las ecuaciones matemáticas que rigen la mecánica de fluidos. Es entonces, una combinación de tres disciplinas: La Dinámica de fluidos, las matemáticas y la programación de computadores.

Así como varios de los desarrollos que se han alcanzado hoy en la ingeniería, la *CFD* nació con el fin de atender necesidades militares como el modelamiento de la incidencia de ondas producidas por una explosión, o del flujo pasando a un Jet hipersónico; pero su desarrollo en las últimas décadas acompañada de el rápido avance de los computadores, la convierten hoy en una herramienta diaria de la ingeniería para diseñar, optimizar y analizar buscando dos cosas principales: Entender y predecir los procesos de los fluidos.

Dentro de las aplicaciones en crecimiento de la *CFD* se encuentra la ingeniería aeroespacial (aviones), la ingeniería automotriz (motores de vehículos), ingeniería biomédica (respiración y flujo de sangre), ingeniería civil y ambiental (ríos, flujo de contaminantes en el medio fluido, flujo en bombas y tuberías), ingeniería energética (turbinas y hornos) y la ingeniería del deporte (natación y golf) [24]. Tres enfoques importantes de la *CFD* serán de interés en este trabajo [24]: *CFD* como una herramienta de investigación, como una herramienta educativa y como una herramienta para los proyectos de ingeniería.

1.1.1. Como una herramienta de investigación

Los eventos físicos o procesos que ocurren en el flujo de fluidos al rededor o dentro de objetos diseñados, relacionados con fenómenos como la disipación, difusión, convección y turbulencia son de comportamiento no lineal y por ende no tienen soluciones analíticas, por lo que las soluciones numéricas resultan necesarias para poder entender estos eventos.

1.1.2. Como una herramienta educacional para entender las bases de la dinámica de fluidos

El desarrollo de diferentes paquetes computacionales de *CFD* hacen que los estudiantes de cursos de pregrado puedan visualizar el comportamiento de los fluidos y así mismo, predecirlo; a la vez, se le generan herramientas para resolver problemas de cierta complejidad, que hasta hace unos años, se abordaban solo en cursos especializados.

1.1.3. Como herramienta para los proyectos de ingeniería

Diferentes entidades como los gobiernos, institutos de investigación y empresas del sector privado, interesados en resolver ciertos problemas en las áreas de ingeniería enunciadas anteriormente, ven a la *CFD* como una herramienta de análisis y diseño que permite observar la respuesta de las superficies y cuerpos de los elementos diseñados ante los esfuerzos que le genera el flujo de fluidos.

1.2. Ecuaciones Fundamentales

Desde un punto de vista físico, las ecuaciones que describen el flujo de fluidos son versiones de tres leyes universales de conservación:

- Conservación de masa (ley de conservación de las especies químicas)
- Conservación de Momentum (Segunda ley de Newton)
- Conservación de Energía (primera ley de la Termodinámica)

Estas leyes se deben cumplir por cualquier elemento de fluido. Esto se puede expresar matemáticamente de dos formas diferentes: La *Aproximación Lagrangiana* en la que los cambios en las propiedades del fluido experimenta se observan en movimiento con el elemento de fluido. Esta aproximación es poco usual en *CFD*. Es más común la *Aproximación Euleriana* en que se considera un volumen de control fijo y se observan los cambios que sufren las propiedades del fluido como la densidad $\rho(\underline{x}, t)$, temperatura $T(\underline{x}, t)$ o velocidad $\underline{v}(\underline{x}, t)$ ¹ en la medida que este pasa a través del volumen [23].

¹En este documento, el subrayado de las variables como $\underline{x}$ indica que se tiene un vector

Las ecuaciones que resultan de aplicar cada una de las leyes universales de conservación al flujo de un fluido son la Ecuación de Continuidad, la ecuación de momentum y la ecuación de energía respectivamente. A continuación se presentan estas ecuaciones para un fluido uniforme y homogéneo sin difusión de masa o tasas finitas de reacciones químicas de acuerdo al planteamiento presentado por Tannehill, *et. al.* (1997).

1.2.1. Ecuación de Continuidad

La ecuación de continuidad indica²:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \underline{v}) = 0 \quad (1-1)$$

El primer término en la ecuación 1-1 corresponde a la tasa de cambio de la densidad en el volumen de control, y el segundo la tasa de flujo de masa que pasa fuera de la superficie de control por unidad de volumen.

Usando la derivada sustancial³

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \underline{v}) = 0 \quad (1-2)$$

Para un flujo incompresible la ecuación 1-1 se reduce a:

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (1-3)$$

1.2.2. Ecuación de Momentum

La segunda ley de Newton aplicada al movimiento de un fluido pasando a través de un volumen de control fijo e infinitesimal expresa:

$$\rho \frac{D\underline{v}}{Dt} = \rho \underline{f} + \nabla \cdot \underline{\Pi} \quad (1-4)$$

El primer término en el lado derecho de la ecuación corresponde a la fuerza de cuerpo por unidad de volumen y el segundo es la fuerza de superficie por unidad de volumen. Las fuerzas de superficie son aplicadas por esfuerzos externos normales y cortantes representados por el tensor $\underline{\Pi}_{i,j}$ que en notación tensorial se expresa como:

$$\underline{\Pi}_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \nu \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \quad i, j, k = 1, 2, 3 \quad (1-5)$$

²El símbolo ∇ es el operador diferencial "Nabla" y corresponde en coordenadas cartesianas a $\nabla = \partial/\partial x + \partial/\partial y + \partial/\partial z$

³La *Derivada sustancial* de alguna propiedad del flujo (densidad, temperatura, velocidad) que sea función de x, y, z, t corresponde a: $D()/Dt \equiv \partial()/\partial t + \underline{v} \cdot \nabla()$

Siendo i, j y k la representación tensorial de vectores unitarios direccionales correspondientes a los ejes coordenados x, y y z respectivamente.

Para fluidos compresibles, es generalmente empleado que $\nu = -2/3\mu$, con esto si se sustituye la ecuación 1-5 en 1-4 se obtiene la **Ecuación de Navier-Stokes**:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \rho \mathbf{f} - \nabla p + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right] \quad (1-6)$$

Si el flujo es incompresible y la viscosidad dinámica μ es constante la ecuación se reduce a:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \rho \mathbf{f} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (1-7)$$

Estrictamente hablando, la ecuación de Navier Stokes hace referencia a la ecuación de momento 1-6, sin embargo, es común incluir la ecuación de continuidad y la ecuación de energía como el grupo de ecuaciones relacionadas a Navier-Stokes.

1.2.3. Ecuación de Energía

Cuando se aplica la primera ley de la termodinámica a un fluido que pasa por un volumen de control fijo e infinitesimal, realizando las respectivas consideraciones se tiene:

$$\rho \frac{De}{Dt} + p(\nabla \cdot \mathbf{v}) = \frac{\partial Q}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \Phi \quad (1-8)$$

Usando la definición de entalpía:

$$h = e + \frac{p}{\rho} \quad (1-9)$$

La ecuación 1-8 puede escribirse como:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \Phi \quad (1-10)$$

Si el flujo es incompresible y si se considera la ley de Fourier de transferencia de calor ($\mathbf{q} = -k_{\circ T} \nabla T$) con el coeficiente de conductividad térmica $k_{\circ T}$ constante, la ecuación 1-8 se reduce a:

$$\rho \frac{De}{Dt} = \frac{\partial Q}{\partial t} + k_{\circ T} \nabla^2 T + \Phi \quad (1-11)$$

1.2.4. Ecuación de estado

Para completar el sistema de las ecuaciones de gobierno, se requiere una ecuación adicional que conecte las variables termodinámicas ρ, p y T . Igualmente se requiere una expresión para

la energía interna en términos de variables termodinámicas. La ecuación mas usual es la del modelo de los gases ideales:

$$\frac{P}{\rho} = RT \quad (1-12)$$

Debe tenerse en cuenta que de no considerarse coeficientes físicos como la viscosidad μ o la conductividad k_T constantes, se deben incluir valores de estos coeficientes como funciones de la temperatura y de otras variables.

1.3. Condiciones de Contorno

Como se vio, las ecuaciones de gobierno del flujo de fluidos se suelen presentar usualmente en su forma diferencial, conformando un conjunto de ecuaciones diferenciales cuya solución numérica será el objeto de la *CFD*. Es por esto que los problemas deben limitarse a dominios finitos limitados por contornos.

La importancia de seleccionar condiciones de borde apropiadas no deben subestimarse, puesto que sin importar que se tenga un muy buen software de *CFD* se pueden obtener resultados erróneos de no darse las entradas apropiadas. Según Zikanov (2010) Los tres tipos de condiciones mas comunes son:

1.3.1. Paredes rígidas

En las paredes rígidas, las condiciones de borde de velocidad son diferentes para flujos viscosos ($\mu \neq 0$) y no viscosos ($\mu = 0$). En los fluidos viscosos se dice que el fluido tiene velocidad cero relativo al contorno, esto es, los valores de velocidad en cualquier punto del dominio es igual al de la velocidad del contorno:

$$\underline{v} = \underline{v_{Contorno}} \quad (1-13)$$

Para flujos no viscosos, se aplica una condición de borde en que solo la componente normal a las paredes se requiere para relacionarla con la componente correspondiente de la velocidad en el contorno:

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = \underline{v_{Contorno}} \cdot \underline{n} \quad (1-14)$$

1.3.2. Entradas y salidas

Cuando se tienen entradas y salidas, se suelen especificar las condiciones de borde en dichos sitios, así una condición de borde será la velocidad en la entrada. En las salidas se suele expresar gradientes de las líneas de corriente nulos. Por ejemplo para gradientes en la dirección

x :

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad (1-15)$$

1.3.3. Otras condiciones

En muchas situaciones, se pueden hacer mas o menos plausibles ciertas suposiciones respecto a la naturaleza de la solución antes de calcularse. Esto puede ayudar a reducir el dominio computacional, la grilla y aún el número de cálculos.

1.4. La Turbulencia

Cuando se observa definiciones sobre la turbulencia en la literatura, los diferentes autores coinciden en tratar de exponer una idea de algo aleatorio, caótico y ruidoso. Lo que se tiene claro es que es un fenómeno que ocurre en un gran número de ocasiones de interés ingenieril como el humo de los vehículos, la condensación del aire en una pared, flujos en cámaras de combustión o en tuberías de conducción de agua, las olas de los océanos, el flujo de agua en ríos, los climas de tormentas y las atmósferas de los planetas.

Jiyuan Tu, *et al.* (2008) expresan que una simple pequeña alteración de las líneas de corriente de un flujo laminar puede eventualmente llevar a un estado de movimiento caótico y aleatorio, a una condición turbulenta, que puede ser originada desde la superficie libre del flujo o inducida por la rugosidad de la superficie de contacto. La generación de turbulencia depende de la relación de las fuerzas de inercia y las fuerzas viscosas indicadas por el número de Reynolds $Re = \bar{v}L/\nu$. A bajos números de Reynolds, las fuerzas inerciales son mas pequeñas que las viscosas, así que si se presentan alteraciones, estas se disipan y el flujo permanece laminar. Si los números de Reynolds son altos, las fuerzas inerciales son lo suficientemente altas para amplificar las alteraciones del flujo y se evidencia una transición a la turbulencia. Aquí el flujo se vuelve inestable y la velocidad y otras propiedades empiezan a variar de forma caótica y aleatoria. Han sido varios autores los que desde siglos atrás han venido estudiando el tema de la turbulencia, desde los dibujos de Leonardo Da Vinci (1452-1519) que mostraban su interés en el movimiento del agua (ver Figura 1-1), pasando por el padre de la investigación cuantitativa de la turbulencia Osbourne Reynolds (1883, 1894) y por los aportes de von Karman (1937), Prandtl (1925), Taylor (1921) y Kolmogorov (1941)⁴, hasta llegar a las perspectivas computacionales que se han venido desarrollando desde la década de 1960. Observar sus trabajos, lleva a pensar que una definición completa, rigurosa y corta de la turbulencia parece imposible. Sin embargo, las aproximaciones de estos autores tratan principalmente 5 temas [25]:

⁴Para una historia mas completa, remitirse a Paul A. Libby (1996)

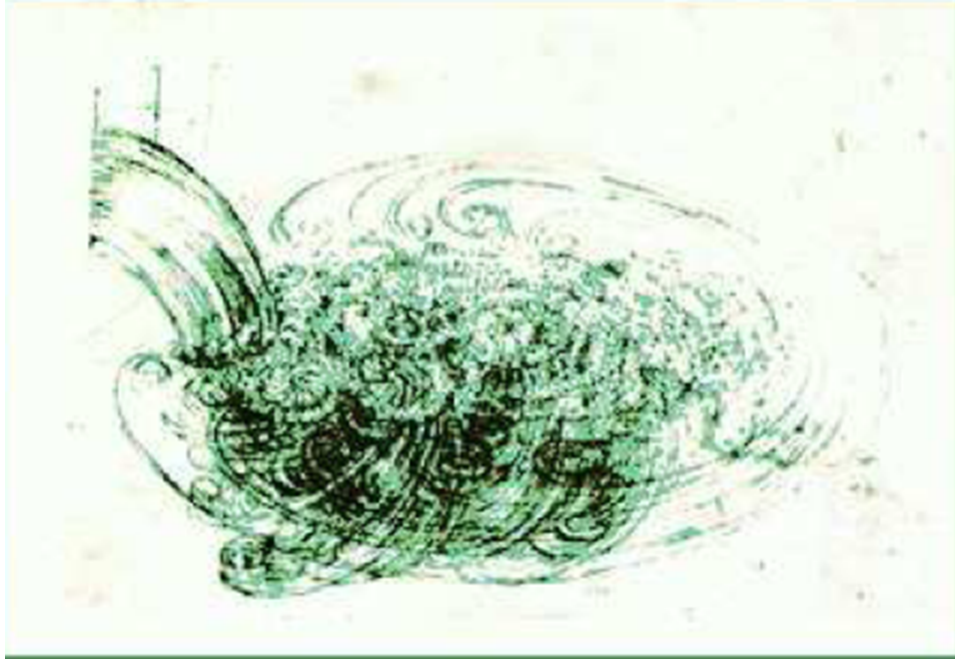


Figura 1-1.: Esquema de Da Vinci del flujo turbulento (Tomado de Pisarenco, 2007)

1.4.1. Irregularidad, dependencia del tiempo y tridimensionalidad

Según Hinze (1975) citado por Tannehill, et al. (1997) “El movimiento turbulento de un fluido es una condición irregular en el que diferentes cantidades muestran una variación aleatoria en el tiempo y el espacio de forma que estadísticamente muestran valores medios que pueden ser identificados”. Esto quiere decir, que es usual, identificar un valor medio de la velocidad $\bar{v}$ acompañado de un campo de fluctuaciones generadas por la turbulencia v' , las cuales son irregulares, dependientes del tiempo y esencialmente tridimensionales. La figura 1-2 muestra gráficamente esta consideración.

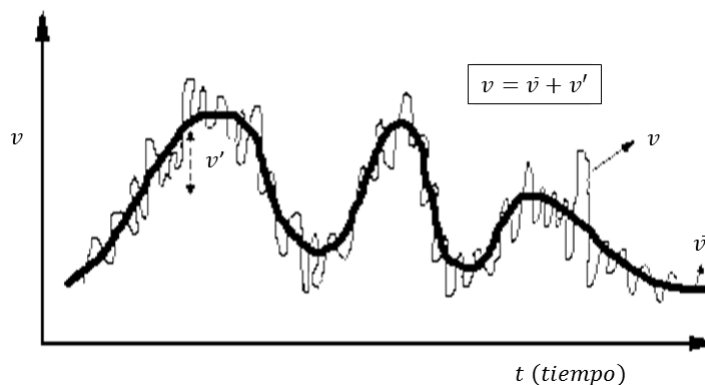


Figura 1-2.: Velocidad fluctuante en el tiempo en un cierto punto de un flujo turbulento

1.4.2. Comportamiento casi caótico

El cambio de los patrones de flujo en tiempo y espacio parece aleatorio y hace que se comporte caóticamente. Sin embargo, el flujo turbulento aún se rige por las ecuaciones de Navier-Stokes, que no contienen términos estocásticos que le puedan representar dicha caoticidad. El flujo debe entonces seguir una evolución constante determinada por las ecuaciones, el contorno y las condiciones iniciales. Las razones de la aleatoriedad radica en que las pequeñas alteraciones que sufre el flujo turbulento aumentan rápidamente en el tiempo, y se tornan de difícil predicción. En este sentido el flujo turbulento se considera “*constantemente inestable*”.

1.4.3. Amplia gama de escalas en tiempo y espacio

El fenómeno de la amplitud en la gama de escalas en tiempo y espacio que presenta un flujo turbulento puede asociarse a la no-linealidad de las ecuaciones de Navier-Stokes, o desde otro punto de vista, a la inestabilidad hidrodinámica del flujo. El concepto de *Cascada de Energía* introducido por L. F. Richardson en 1922, hace referencia a este fenómeno. Según Richardson, el flujo presenta ciertas estructuras (remolinos o vórtices) dada la hidrodinámica del flujo. Cuando estas son de gran tamaño, son inestables en si y generan remolinos de menor tamaño. Estos siguen siendo inestables y rompen en otros mas pequeños aún y en este proceso, la energía cinética se transfiere constantemente de movimientos a gran escala a otros de menor escala. Esta cascada de rotura se detiene cuando las estructuras del flujo son tan pequeñas que los altos gradientes de velocidad llevan a una completa disipación de la energía cinética en calor.

El concepto de cascada de energía llevó a que A. N. Kolmogorov en 1941 desarrollara su concepto de la turbulencia en el que nos permite estimar la gama de escalas activas de la turbulencia en función del número de Reynolds. Este concepto relaciona la escala en tiempo y espacio de los remolinos más pequeños η y τ con los de los más grandes L y T [25]:

$$\eta/L \sim Re^{-3/4}, \quad \tau/T \sim Re^{-1/2} \quad (1-16)$$

1.4.4. Fuerte Mezcla

Las fluctuaciones turbulentas proveen un muy eficiente mecanismo de mezcla de momentum, energía interna, o de soluciones disueltas dada la fuerte interacción y contacto de partículas con diferentes concentraciones entre ellas.

1.4.5. Estructuras Coherentes

Las recientes investigaciones en turbulencia se han enfocado en entender el papel que juegan ciertas *estructuras coherentes* localizadas, es decir, formas geométricas que se presentan en el flujo, tienen capas bien definidas, se repiten constantemente en el flujo y persisten por un

relativo largo tiempo. Las estructuras presentan tamaños típicos de una gran gama, y toman diferentes formas, como regiones de fuerte vorticidad (ver Figura 1-3).

La existencia de las estructuras coherentes, no debe desviar la mirada de la naturaleza

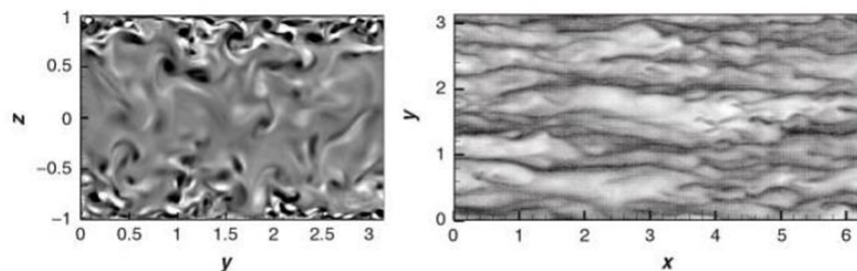


Figura 1-3.: Tomas instantáneas en la sección de un canal modelado computacionalmente (Tomado de Zikanov, 2010)

estocástica de la turbulencia, puesto que la frecuencia en el tiempo, la ubicación y las capas de las estructuras siguen comportándose bajo un patrón aleatorio.

2. Capítulo 2. Modelación de la Turbulencia

Hoy existen basicamente tres formas de simular el flujo turbulento:

- Simulación Numérica Directa *DNS*
- Simulación de grandes escalas *LES*
- Promedios de Reynolds *RANS*

Simulación Numérica Directa: Es una simulación en *CFD* en el que las ecuaciones de Navier-Stokes se resuelven numéricamente sin modelos de turbulencia. Esto implica que toda la gama de escalas temporales y espaciales de Kolmogorov (ver Capítulo 1) deben ser resueltas. A pesar de las altas exigencias computacionales para ello *DNS* es un método muy usado hoy en la investigación de la turbulencia [21].

Simulación de grandes escalas: Es una técnica numérica usada para resolver las ecuaciones diferenciales que gobiernan el flujo de fluidos. Según Kolmogorov (1941) citado por Pisarenko (2007) los grandes remolinos del flujo dependen de la geometría del flujo mismo, mientras que los pequeños son similares entre si y tienen un carácter mas universal. Por esto, la metodología se enfoca en resolver explícitamente las grandes escalas y modelar el efecto de los pequeños remolinos en los mas grandes usando escalas *Sub-Grid* (*SGS*)¹. Estos efectos se compensan mediante un término adicional de *viscosidad* a las ecuaciones de gobierno. Esta metodología requiere menos capacidad computacional que la metodología *DNS* pero más que aquellas que resuelven las ecuaciones promedio de Reynolds *RANS*. La demanda computacional de este método radica en el nivel de detalle que se requiere en las vecindades de las paredes del dominio.

Ecuaciones Promedio de Reynolds: Son ecuaciones promedio en el tiempo, del movimiento del flujo de un fluido. El proceso de promediado trae nuevos términos a las ecuaciones de Navier-Stokes. Además, nuevas ecuaciones se requieren para poder resolver el sistema [21]

¹El modelamiento a escalas Sub-grid hace referencia a la representación de procesos físicos importantes a pequeña escala que ocurren a escalas mayores y que no se pueden considerar en una malla computacional. La formulación de los modelos *SGS* requieren entender la física y la estadística de la interacción de escalas en la turbulencia hidrodinámica y constituye un campo activo de investigación.

pero que resultan de menor demanda computacional para resolver.

Los métodos *DNS* son hoy una herramienta comúnmente usada en la investigación y se suelen aplicar a las soluciones *SGS* de la metodología *LES*. Por otra parte una ventaja que presenta *LES* sobre las aproximaciones *RANS* recae en el nivel de detalle que el primero puede generar. Mientras que *RANS* provee resultados promedios, *LES* es capaz de predecir características instantáneas del flujo.

2.1. Ecuaciones promedio de Reynolds. Modelos RANS

RANS es el método mas antiguo de modelación de turbulencia. Sus ventajas son simples: bajo requisito computacional comparado con *LES* o *DNS*, una amplia selección de modelos y gran experiencia acumulada en la aplicación de estos modelos. Aún así tienen desventajas en cuanto al bajo nivel de descripción (no se tiene información más allá de valores promedio), necesita afinar los modelos a características específicas del flujo y presenta un alto error de modelamiento. Se debe tener siempre en la mente al aplicar estos modelos las implicaciones que estas desventajas tienen en la ingeniería [25].

Las ecuaciones promedio de Reynolds se derivan de descomponer las variables dependientes de las ecuaciones de conservación (Ver sección 1.2) en tiempos promedio (obtenido de un intervalo de tiempo apropiado) y componentes de fluctuación (ver Figura 1-2) y luego promediar en el tiempo toda la ecuación [23]. Dos tipos de promedio se usan actualmente, el promediado clásico de Reynolds y el promedio ponderado de masa sugerido por Favre ².

Mediante los promedios estadísticos (*ensemble-averaged*) los campos medios del flujo se expresan como:

$$\bar{v}(\underline{x}, t) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \underline{v}^{(m)}(\underline{x}, t) \quad (2-1)$$

Donde $\underline{v}^{(m)}$ son las realizaciones del flujo en M experimentos idénticos. Si las condiciones del flujo son independientes del tiempo, el flujo medio se puede considerar como el resultado de promediar:

$$\bar{v}(\underline{x}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \underline{v}^{(m)}(\underline{x}, t) \quad (2-2)$$

Así las propiedades del flujo pueden verse como la suma de los promedios y las partes fluctuantes como se expresa en la Figura 1-2:

$$\underline{v}(\underline{x}, t) = \bar{v}(\underline{x}, t) + \underline{v}'(\underline{x}, t), \quad \underline{p}(\underline{x}, t) = \bar{p}(\underline{x}, t) + \underline{p}'(\underline{x}, t), \quad \underline{\rho}(\underline{x}, t) = \bar{\rho}(\underline{x}, t) + \underline{\rho}'(\underline{x}, t)$$

²Favre, A: *Equations des Gaz Turbulents Compresibles: 1. Formes Générales*, J. Mec., vol. 4, pp 361-390.

$$(2-3)$$

Si el término de la izquierda de la ecuación 2-3 se considera como el promedio, se tiene inmediatamente que:

$$\overline{v'} = 0 \quad (2-4)$$

A continuación se presenta el planteamiento de las formas promedio de las ecuaciones fundamentales de continuidad, momentum y energía de acuerdo a lo expuesto por Tannehill, *et. al.* (1997).

2.1.1. Forma promedio de Reynolds de la Ecuación de Continuidad

Si consideramos la ecuación de continuidad 1-1, con la respectiva descomposición de las variables en las definidas en la promediación en el tiempo 2-3 mas las fluctuaciones, se llega en notación tensorial a:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{v}_j + \overline{\rho' v'_j}) = 0 \quad (2-5)$$

Para flujos incompresibles, $\rho' = 0$, la ecuación 2-5 queda:

$$\frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2-6)$$

2.1.2. Forma promedio de Reynolds de la Ecuación de Momentum

Haciendo un procedimiento similar, de remplazar las variables de la ecuación 1-6 por las definidas en 2-3, y despreciando las fuerzas de cuerpo, se tiene en notación tensorial:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{v}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{v}_i \bar{v}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho v'_i v'_j}) \quad (2-7)$$

Donde $\bar{\tau}_{ij}$ equivale a:

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{v}_k}{\partial x_k} \right] \quad (2-8)$$

2.1.3. Forma promedio de Reynolds de la Ecuación de Energía

Siguiendo la notación tensorial se obtiene para la ecuación de energía al despreciar el término de generación $\partial Q / \partial t$ en notación tensorial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} h + \overline{\rho' h'}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} h \bar{v}_j - \overline{h' v'_j}) &= \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \overline{v'_j \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} (-\bar{q} - \overline{\rho h' v'_j} - \overline{\rho' h' v'_j} - \overline{\rho' h' v'_j}) + \bar{\Phi} \end{aligned} \quad (2-9)$$

Donde:

$$\overline{\Phi} = \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} = \overline{\tau_{ij}} \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \overline{\tau'_{ij} \frac{\partial v'_i}{\partial x_j}} \quad (2-10)$$

2.2. Terminología de la modelación

Boussinesq (1877) citado por Tannehill, *et al.* (1997) sugirió que unos aparentes esfuerzos cortantes generados por la turbulencia estarían relacionados con una tasa media de esfuerzos en una escala turbulenta o una “viscosidad del remolino”. Esta suposición se traduce en:

$$-\overline{\rho v'_i v'_j} = 2\nu_T S_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij} \left(\nu_T \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \rho \bar{k} \right) \quad (2-11)$$

Siendo ν_T la viscosidad de la turbulencia y $\bar{k} = \overline{v'_i v'_i}/2$ y la tasa media de esfuerzos S_{ij} está dada por:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2-12)$$

Por analogía con la teoría cinética, en la que la viscosidad molecular de los gases se puede evaluar con aproximación razonable, la viscosidad turbulenta se puede modelar como:

$$\nu_T = \rho v_T l \quad (2-13)$$

El problema entonces se remonta a encontrar los valores de la velocidad y la longitud media de la turbulencia o longitud de mezcla de Prandtl³, v_T y l respectivamente.

Estas suposiciones de Boussinesq son adoptadas por unos modelos de turbulencia y por otros no. A partir de esto, se genera una clasificación de los modelos de turbulencia en tres categorías: las que usan las suposiciones de Boussinesq, las que no las usan, y las que simplemente no emplean las ecuaciones de Reynolds. El otro tipo de clasificación comúnmente empleado, es de acuerdo al número de ecuaciones diferenciales parciales que se deben resolver para suplir los parámetros del modelo [23]. Este número de ecuaciones parten de cero para los modelos mas simples a 12 para los más complejos modelos de esfuerzos de Reynolds.

2.3. Modelo $k - \epsilon$. Modelo de dos ecuaciones

En 1940, Prandtl y Kolmogorov refiriéndose a la ecuación 2-13 plantearon que la velocidad de la turbulencia v_T es proporcional a la raíz cuadrada de la energía cinética de la turbulencia

³La teoría de mezcla de Prandtl se propuso por L. Prandtl en 1925. Esta teoría induce el término *longitud de mezcla* l , que puede verse como la máxima distancia típica sobre la cual un paquete de partículas de fluido que se mueven en un flujo turbulento retienen su cantidad de momentum

$\bar{k} = \overline{v'_i v'_i}/2$, convirtiendo a esta ecuación en:

$$\nu_T = C_k \rho l (\bar{k})^{1/2} \quad (2-14)$$

Pensando en términos de las ecuaciones de energía desarrollada para $\bar{k}$, la tasa de discipación de la energía cinética ϵ^4 basados en argumentos dimensionales estará dado por:

$$\epsilon = C_D \frac{\bar{k}^{3/2}}{l} \quad (2-15)$$

Donde se relacionan los coeficientes de proporcionalidad como $C_k = (C_D)^{1/3}$.

Con base a esto, en los modelos *RANS* de dos ecuaciones, la velocidad y la longitud se determinan como soluciones de dos ecuaciones diferenciales parciales. El método comúnmente usado toma las variables $\bar{k}$ y ϵ . Este método debe su desarrollo a hoy, a los trabajos de Harlow y Nakayama (1968), Jones y Launder (1972) y Launder y Spalding (1974) [23].

En términos de $\bar{k}$ y ϵ , la viscosidad turbulenta se puede evaluar como:

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{\bar{k}^2}{\epsilon} \quad (2-16)$$

Donde $C_\mu = C_D^{4/3}$. Con esto, las ecuaciones empleadas en el modelo estándar $\bar{k} - \epsilon$ son:

$$\rho \frac{D\bar{k}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_T / Pr_k) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] + \left(2\mu_T S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \rho \epsilon \quad (2-17)$$

$$\rho \frac{D\epsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_T / Pr_\epsilon) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{\bar{k}} \left(2\mu_T S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{\bar{k}} \quad (2-18)$$

Cada uno de los términos de izquierda a derecha, se pueden interpretar como las tasas de incremento, difusión, generación y disipación de $\bar{k}$ para la ecuación 2-17 y de ϵ para la ecuación 2-18. En estas ecuaciones se introduce el término del número de Prandtl Pr_k y Pr_ϵ para la energía cinética y la tasa de discipación de energía respectivamente y se toman como constantes de las ecuaciones junto con los coeficientes de proporcionalidad C_μ , $C_{\epsilon 1}$ y $C_{\epsilon 2}$ y cuyos valores fueron evaluados por Launder y Spalding (1974) citados por Jiyuan Tu, *et al.* (2008) por correlaciones como:

$$C_\mu = 0,09 \quad Pr_k = 1,0 \quad Pr_\epsilon = 1,3 \quad C_{\epsilon 1} = 1,44 \quad C_{\epsilon 2} = 1,92$$

El significado físico del conjunto de ecuaciones del modelo $k - \epsilon$ según Jiyuan Tu, *et al.* (2008) es: *la tasa de cambio y el transporte advectivo de k o ϵ iguala el transporte por difusión combinado con la tasa de producción o destrucción de k o ϵ .*

⁴Identificada en la ecuación 2-9 como el término $\bar{\Phi}$ que para su aplicación a la energía cinética de la turbulencia equivaldría al producto $\rho \epsilon$

2.4. Forma Genérica de las ecuaciones de gobierno en la CFD

Las ecuaciones de gobierno descritas en la sección 1.2 además de la formulación de la turbulencia planteada en la sección 2.3 hace que se complete el esquema empleado en la *CFD*. Si introducimos una variable ϕ y expresamos las ecuaciones de conservación de masa, momentum, energía y cantidades turbulentas en la forma conservativa incompresible obtenemos la conocida ecuación de transporte:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (2-19)$$

La ecuación 2-19 muestra los diferentes procesos de transporte físico que ocurren durante el flujo de fluidos: la *aceleración local* y la *advección* correspondientes a los términos de la izquierda son equivalentes a la difusión (Γ = Coeficiente de difusión) y a un término de fuente S_ϕ del lado derecho de la ecuación. Con el fin de traer las características comunes, los términos que no comparten las diferentes ecuaciones de gobierno se introducen en el término S_ϕ . Así, por ejemplo, para la ecuación de momentum, el término estará dado por gradientes de presión y otras fuentes como la gravedad, que influyen el movimiento del flujo, mientras que para la ecuación de energía serán fuentes de calor las usuales para representar este término [24].

La ecuación 2-19 se usa como el punto de partida de los procedimientos computacionales en la modelación numérica (Ver Capítulo 3). Si empleamos para la variable ϕ las propiedades $\underline{v}, T, k, \epsilon$ y seleccionamos los valores apropiados para el coeficiente de difusión Γ y los términos de fuente S_ϕ como muestra la tabla **2-1**, se pueden obtener las formas especiales para cada ecuación diferencial de conservación de masa, momentum, energía y las cantidades turbulentas. Los términos P y D de la tabla **2-1** equivaldrán a:

$$P = 2\nu_T \left[\left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right] + \nu_T \left[\left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (2-20)$$

$$D = \epsilon \quad (2-21)$$

Tabla 2-1.: Forma general de las ecuaciones de gobierno para flujo compresible

ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
1	0	0
$\underline{v}$	$\nu + \nu_T$	$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + S_i$
T	$\frac{\nu}{Pr} + \frac{\nu_T}{Pr_T}$	S_T
k	$\frac{\nu_T}{Pr_k}$	$P - D$
ϵ	$\frac{\nu_T}{Pr_\epsilon}$	$\frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} P - C_{\epsilon 2} D)$

3. Capítulo 3. La Modelación Numérica

Como se ha visto a través de los capítulos anteriores, la descripción del flujo de fluidos se ha basado en el planteamiento de ecuaciones diferenciales. Con el fin de resolver estas ecuaciones, los métodos numéricos usados en *CFD* dan una solución dividiendo el dominio en pequeños subdominios y asumiendo variaciones dependiendo el campo, para cada subdominio [12]. En este sentido se introduce el concepto de *discretización* entendida como el reemplazo de una solución exacta a una ecuación diferencial parcial (*EDP*) o sistema de *EDP* en un medio continuo a una solución aproximada numéricamente en un dominio discreto.

La discretización se puede implementar de diferentes formas. En *CFD* suelen seguirse tres tipos de aproximaciones [25]

Métodos Espectrales:

La metodología espectral es conceptualmente similar a las técnicas de separación de variables usadas en la solución analítica de ecuaciones diferenciales parciales *EDP*. La solución se presenta entonces por una serie de funciones linealmente independientes, y en muchos casos, ortogonales (cos, sin, Funciones de Bessel, polinomios ortogonales, etc.) con coeficientes desconocidos. Respecto a la metodología analítica, la que busca definir series infinitas que converjan a la solución exacta de una *EDP*, en el método espectral, la serie es finita y los coeficientes se escogen de forma que minimicen el error de aproximación.

Método de los Elementos Finitos:

Contempla un esquema en que se da solución a las ecuaciones diferenciales en pequeños dominios en que se subdivide el dominio mayor. Un pequeño conjunto de ecuaciones son empleadas de forma que sean cero fuera del elemento.

Diferencias Finitas *MDF* y Volúmenes Finitos *MVF* Es la metodología mas ampliamente usada en *CFD*. En esta, la discretización se hace aproximando la solución continua en una grilla discreta de puntos dentro de una malla compuesta por capas de tiempos. El método de los volúmenes finitos es en esencia similar a los elementos finitos, la característica que los distingue es que *MVF* usa funciones polinomiales en elementos locales para describir las funciones de las variables desconocidas del flujo. El *MVF* es el empleado comunmente en los códigos comerciales de *CDF*.

Evaluar la precisión de la escogencia de la solución numérica representa un campo de mucha investigación [11, 12]. El poder juzgar cuál de las soluciones numéricas es la más acertada debería poderse comparar con la solución exacta que usualmente no se tiene. La estimación del error constituye entonces un campo importante en la modelación numérica.

Los errores que traen las soluciones numéricas del flujo de fluidos generalmente se dividen en cuatro grupos [12]:

- **Errores de Modelación:** Se definen como la diferencia entre el flujo real y la solución exacta. Las condiciones iniciales y de contorno pueden introducir errores si no se conocen exactamente. La descripción de la geometría también puede introducir errores si no es exacta.
- **Errores de discretización:** Se definen como la diferencia entre la solución exacta de las ecuaciones diferenciales y la solución exacta de la aproximación discreta. La densidad del enmallado y la calidad, además del tamaño de los saltos en el tiempo resultan fundamentales en la generación de este tipo de errores.
- **Errores de iteración:** Son un grupo de errores que surgen si la solución se plantea desde una metodología iterativa. Se define como la diferencia entre la solución encontrada con el método de los volúmenes finitos con la obtenida por procedimientos iterativos.
- **Errores de programación y del usuario:** Son el resultado de la implementación incorrecta del uso de la metodología *CFD* en el código computacional.

Con esta perspectiva, en que se tiene claro que las soluciones numéricas consisten en aproximaciones a la solución de las EDP que rigen el flujo del fluido, y para el caso de este trabajo, de un flujo que se encuentra en condiciones de turbulencia. No consisten en soluciones exactas, y su implementación se aceptará en la medida que el método sea apropiado o no para la aplicación académica o de ingeniería.

3.1. Componentes de una solución numérica

Cuando se piensa en la solución numérica a EDP, se suele seguir una metodología de la siguiente forma [19]:

Modelo Matemático

Es el conjunto de ecuaciones y condiciones de contorno que describen el problema en particular. Este modelo puede incluir simplificaciones e idealizaciones de las leyes de conservación.

Sistema Coordinado

Se suelen emplear diferentes sistemas de coordenadas (Cartesiano, cilíndrico, esférico, etc.) dependiendo la forma de las ecuaciones de gobierno en la geometría del problema.

Método de discretización

Como se vio al comienzo de este capítulo, los empleados usuales son el espectral, elementos finitos, diferencias finitas y Volúmenes Finitos.

Método de Solución

Los métodos de solución se pueden dividir en dos grandes grupos: 1) Solución del sistema lineal, 2) Solución que manipula múltiples ecuaciones.

3.2. Propiedades de una Solución numérica

Mitidieri (2005) cita ciertas propiedades que debe cumplir la metodología de solución numérica para ser aceptables:

Consistencia

Para que un método de modelación numérica sea consistente, debe hacer que el error tienda a cero cuando los espaciamientos en la malla tiendan a cero.

Estabilidad

Una solución numérica es estable si no aumenta el error que aparece en el proceso de la solución numérica.

Convergencia

La solución es convergente cuando tiende a la solución exacta en la medida que el espaciamiento de la grilla tiende a cero.

Conservación

El método numérico, tanto en bases locales como globales, debe respetar las leyes de conservación, para cada volumen de control individual.

Acotación

Las soluciones deben estar limitadas por sus propios contornos. Esto significa que físicamente no se pueden dar cantidades negativas, al igual que parámetros como k o ϵ (ver Capítulo 2).

Realizabilidad

El caso que se estudia debe poder ser realizable con el fin de que no resulte físicamente

improbable.

Presición

La evaluación de la presición como se dijo al comienzo del capítulo, se basa en la determinación de los errores que típicamente pueden presentarse.

Por ser la metodología empleada por el software escogido para este trabajo, a continuación se hace énfasis en la el planteamiento de los volúmenes finitos, con algunas observaciones hechas por diferentes autores sobre la exactitud y precisión de esta metodología.

3.3. El Método de los Volúmenes Finitos MVF

El método de los volúmenes finitos discretiza la forma integral de las ecuaciones de conservación directamente en el espacio físico. Nació al rededor de los años de 1970, por autores como McDonald (1971) y MacCormack y Paullay (1972) citados por Jiyuan Tu, *et al.* (2008), quienes intentaron dar solución a las ecuaciones bidimensionales de Euler y se extendió al campo tridimensional por Rizzi y Inouye [24]. El dominio computacional se divide en un número finito y continuo de volúmenes, donde los resultados expresan la conservación de ciertas propiedades de cada volumen de control. En el centroide de cada volumen de control se calculan los valores de las variables a evaluar, y para luego usar métodos de interpolación para expresar valores de dichas variables en la superficie del volumen en términos de los valores del centro.

El *MVF* tiene las siguientes propiedades [11]:

- El método se basa en la discretización de la forma integral de las ecuaciones de gobierno en cada volumen de control. Las ecuaciones básicas, como masa y momento por lo tanto, se conservan en niveles discretos.
- Las ecuaciones se resuelven en un sistema coordenado cartesiano en una malla que no cambia en tiempo.
- Los volúmenes de control pueden ser generalmente capas poliédricas, con un número variable de vecinos, llevando a la creación de una malla arbitraria y no estructurada¹.
- Los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales se tratan de una forma “segregada”, es decir, se resuelven una a la vez, con un posterior acople de las ecuaciones.

¹Una malla estructurada esta compuesta por celdas de un tamaño similar y del mismo tipo, como triángulos o rectángulos, en dos dimensiones y tetraedros o hexaedros en tres dimensiones

La presencia de volúmenes de control hace que se puedan acomodar a cualquier tipo de geometría, y permite la implementación de características propias del método de los elementos finitos, como la combinación de tipos de elementos bien en 2D o 3D.

3.3.1. Formulación

El proceso de discretización de Volúmenes Finitos consiste de dos pasos consecutivos. El primer paso es la discretización del dominio físico en celdas contiguas, las cuales pueden moverse en el espacio y el tiempo que no se superponen. Todas las celdas juntas forman la grilla que es una representación discreta del dominio computacional. Para cada celda, el valor de los diferentes campos se almacenan en un nodo P , (Ver Figura 3-1), ubicado en el centroide de la celda x_P y definida por:

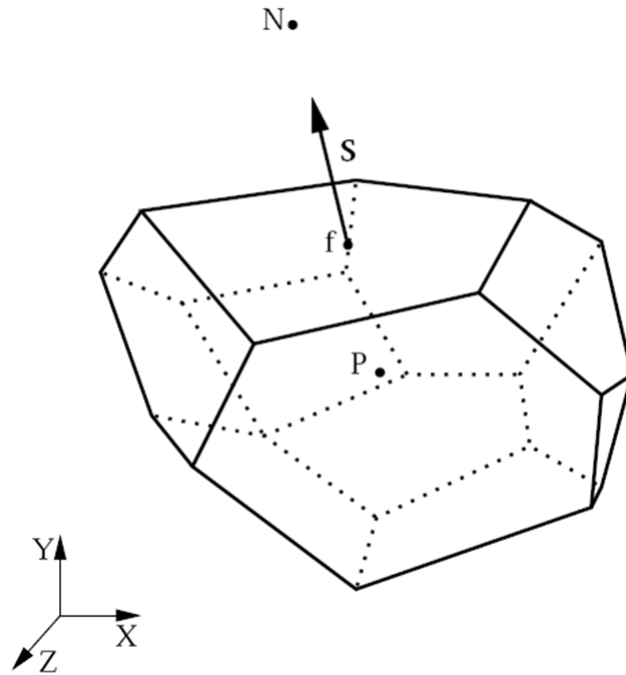


Figura 3-1.: Celda o volumen finito

$$\int_{V_P} (x - x_P) dV = 0 \quad (3-1)$$

Cada celda comparte una cara con otra celda vecina, cuyo centroide se denota por N en la figura 3-1. Las caras que no comparten celdas serán las superficies de contorno.

Los valores de las propiedades que se evalúan con este método se almacenan en el centroide

de cada cara x_f cuya posición está dada por:

$$\int_f d\underline{S}(x - x_f) = 0 \quad (3-2)$$

El segundo paso del *MVF* es la aproximación de las ecuaciones de gobierno en la celda típica. Aquí se entra a asumir una variación lineal de una propiedad ϕ entre cada volumen de control y durante cada paso de tiempo. Esto se puede expresar por la expansión de la serie de Taylor:

$$\phi(x) = \phi_P + (x - x_P) \cdot (\nabla \phi)_P + O(|(x - x_P)|^2) \quad (3-3)$$

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta t \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^t + O(\Delta t^2) \quad (3-4)$$

Donde el subíndice P hace referencia al nodo en que la solución se evalúa, el superíndice t denota el tiempo en que se evalúa, $O(|(x - x_P)|^2)$ y $O(\Delta t^2)$ son los términos de truncado de la serie de Taylor.

Cuando se sigue la formulación del *MVF* junto con las principales características expuestas anteriormente se puede plantear la discretización de las ecuaciones de gobierno como plantea Mitidieri (2005). Recordando la ecuación de transporte 2-19, el *MVF* usa la forma integral como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho \phi dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \underline{v}) dV - \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV \\ \int_{V_P} S_\phi(\phi) dV \end{aligned} \quad (3-5)$$

Empleando el teorema de divergencia de Gauss, las integrales de volumen de los términos de advección y difusión pueden reescribirse como integrales en el contorno de los volúmenes de control:

$$\int_{CV} \nabla \cdot a dV = \oint_{\partial V} d\underline{n} \cdot a \quad (3-6)$$

$$\int_{CV} \nabla \cdot \phi dV = \oint_{\partial V} d\underline{n} \phi \quad (3-7)$$

$$\int_{CV} \nabla a dV = \oint_{\partial V} d\underline{n} a \quad (3-8)$$

Donde ∂V es la superficie de contorno del volumen V y $d\underline{n}$ representa un elemento infinitesimal de superficie cuya normal apunta hacia el exterior de ∂V .

Dado que los términos de difusión incluyen una segunda derivada de ϕ en el espacio, esta es una ecuación de segundo orden. Para garantizar la consistencia, el orden de la discretización

debe ser igual o mayor que el orden de la ecuación que está siendo discretizada.

Si asumimos que $\phi = \phi(\underline{x}, t)$ varía linealmente en el espacio y el tiempo al rededor de P , se puede escribir:

$$\phi(\underline{x}) = \phi_P + (\underline{x} - \underline{x}_P) \cdot (\nabla \phi)_P \quad (3-9)$$

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta \quad (3-10)$$

Aplicando la discretización de variación lineal mostrada en las ecuaciones 3-3 y 3-4 se tiene:

$$\begin{aligned} \int_{V_P} \phi(\underline{x}) dV &= \int_{V_P} [\phi_P + (\underline{x} - \underline{x}_P) \cdot (\nabla \phi)_P] dV \\ &= \phi_P \int_{V_P} dV + \left[\int_{V_P} (\underline{x} - \underline{x}_P) dV \right] \cdot (\nabla \phi)_P \\ &= \phi_P V_P \end{aligned} \quad (3-11)$$

Con el fin de obtener una forma discretizada del teorema de Gauss, la ecuación 3-6 se puede transformar en una suma de integrales en las caras como:

$$\begin{aligned} \int_{CV} \nabla \cdot \underline{a} dV &= \oint_{\partial V} d\underline{n} \cdot \underline{a} \\ &= \sum_f \left(\int_f d\underline{n} \cdot \underline{a} \right) \end{aligned} \quad (3-12)$$

Si asumimos que $\underline{a}$ varía linealmente en el espacio, la integral en las caras de la ecuación 3-12 se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \int_f d\underline{n} \cdot \underline{a} &= \left(\int_f d\underline{n} \right) \cdot \underline{a}_f + \left[\int_f d\underline{n} (\underline{x} - \underline{x}_f) \right] \cdot (\nabla \underline{a})_f \\ &= \underline{n} \cdot \underline{a}_f \end{aligned} \quad (3-13)$$

Combinando las ecuaciones 3-11, 3-12 y 3-13, se obtiene:

$$(\nabla \cdot \underline{a}) V_P = \sum_f \underline{n} \cdot \underline{a}_f \quad (3-14)$$

Donde $\underline{a}_f$ es el valor de la variable a en el medio de la cara f y $\underline{n}$ es el vector normal a la cara, que apunta hacia el exterior.

3.3.2. Solución Numérica

La aplicación del *MVF* a todos los elementos en el dominio resultan en un conjunto de ecuaciones agrupadas en un sistema. El autor Eesa (2009) emplea un ejemplo sencillo para

ilustrar esta condición. Si consideramos un caso en el que se tienen tres ecuaciones, cada una con variables del flujo ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 . La discretización se puede expresar como:

$$\begin{aligned} a_{11}\phi_1 + a_{12}\phi_2 + a_{13}\phi_3 &= b_1 \\ a_{21}\phi_1 + a_{22}\phi_2 + a_{23}\phi_3 &= b_2 \\ a_{31}\phi_1 + a_{32}\phi_2 + a_{33}\phi_3 &= b_3 \end{aligned} \quad (3-15)$$

Donde a_{ij} son los coeficientes de la variable ϕ_j , y b_i son los valores conocidos de la ecuación. Este sistema linealizado de ecuaciones discretas se pueden reescribir en forma matricial como [7]:

$$[A][\phi] = [B] \quad (3-16)$$

Donde $[A]$ representa los coeficientes de la matriz, $[\phi]$ el vector de soluciones o de variables, y $[B]$ el vector que agrupa los valores conocidos b_i . Esta ecuación se puede resolver iterativamente suponiendo valores de ϕ^n y sustituyendo estos valores en la ecuación 3-16, obteniendo valores residuales r^n , como:

$$r^n = B - A\phi^n \quad (3-17)$$

Con los valores del vector r^n se usan para calcular una corrección ϕ' , el cual se usa para producir una nueva solución:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \phi' \quad (3-18)$$

Donde la corrección ϕ' se obtiene resolviendo la ecuación:

$$A\phi' = r^n \quad (3-19)$$

Este procedimiento se repite hasta que el residual se aproxime a valores predefinidos para el modelo.

3.4. Implementación Numérica del modelo $k - \epsilon$

Las ecuaciones *RANS*, y en particular las empleadas para el modelo $k - \epsilon$ 2-17 y 2-18, se resuelven en la misma malla computacional que la del flujo. La metodología numérica que presenta el *MVF* requiere considerar ciertas modificaciones de forma que la solución sea eficiente y robusta [25].

Una modificación obedece a que la turbulencia responde a periodos más cortos de tiempo que el flujo medio. Esto implica que el conjunto de *EDP* es numéricamente rígido (parte de la solución presenta fuertes diferencias en las escalas de tiempo) lo que lleva a una lenta

convergencia de los cálculos numéricos. Para ello la convergencia puede acelerar si las iteraciones para el flujo medio y para la turbulencia se separan de manera que cada iteración se subdivide en dos pasos: una iteración para el flujo medio se hace con la viscosidad turbulenta tomada de la anterior iteración, luego la aproximación obtenida para el flujo medio se emplea para otra iteración en las ecuaciones $k - \epsilon$.

Otra consideración se basa, en que por definición k y ϵ no pueden ser negativos. De no considerarse se puede llevar a consideraciones en que se tengan aportes de energía al flujo o haya inestabilidad numérica en las soluciones.

Como se expuso en el capítulo 1, se debe igualmente poner atención en las condiciones de contorno. En paredes sólidas se requiere que:

$$k_{pared} = 0 \quad (3-20)$$

La tasa de disipación no puede ser cero. Dar valores exactos de ϵ resulta imposible en la metodología *RANS* dado el poco conocimiento que se tiene sobre su variación, pero se pueden seguir ciertas aproximaciones como:

$$\epsilon_{pared} = \nu \left(\frac{\partial^2 k}{\partial n^2} \right)_{pared} \quad o \quad \epsilon_{pared} = 2\nu \left(\frac{\partial k^{1/2}}{\partial n} \right)_{pared}^2 \quad (3-21)$$

Las condiciones en los contornos simétricos y periódicos, como en las salidas se disponen típicamente en la misma manera que para otras variables. La situación es mas complicada en las entradas, donde usualmente no se conoce el estado del flujo. La aproximación común es asumir un cierto nivel de turbulencia y usar la energía cinética de la turbulencia, como una fracción de la energía cinética del flujo medio. Esto se hace en términos de **Intensidad de la turbulencia**, que corresponde a:

$$I \equiv \frac{(2k/3)^{1/2}}{(\overline{v_x^2} + \overline{v_y^2} + \overline{v_z^2})^{1/2}} \quad (3-22)$$

Los valores que la literatura recomienda para I varían dependiendo las situaciones. $I \approx 10^{-2}$ para entradas con turbulencia débil, mientras que altas turbulencias requieren valores de $I \approx 10^{-1}$ o mayores. Valores de entrada de ϵ se determinan mediante la ecuación 2-15, con valores supuestos de la longitud de mezcla l como fracciones del ancho de la entrada. Se debe tener cuidado de que k y ϵ nunca sean cero, esto llevaría que en el modelo nunca exista turbulencia. Empíricamente se ha determinado que para flujo totalmente desarrollado en ductos a presión la Intensidad de la turbulencia puede aproximarse a:

$$I \approx 0,16(Re)^{-1/8} \quad (3-23)$$

Debe entonces tenerse claro que no se pueden esperar altas resoluciones en los cálculos realizados con el método $k - \epsilon$ ni con los demás de la metodología *RANS*. Solo se evalúan

valores medios de la turbulencia, que suelen tener efectos más fuertes en las vecindades de los contornos, sitios donde deben considerarse mallas más finas que en el resto del dominio, aunque bajo grandes números de Reynolds, esta solución no es suficiente, lo que implica considerar entender el comportamiento de la turbulencia en las vecindades de los contornos. Existe una expresión logarítmica para ello:

$$\bar{v}_P = v_\tau \left[\frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{v_\tau z_P}{\nu} \right) + B \right] \quad (3-24)$$

En esta ecuación la velocidad de corte v_τ se define como $v_\tau = (\tau_w/\rho)^{1/2}$, con τ_w el esfuerzo cortante por viscosidad que se genera en el contorno, y z_P , la coordenada del punto mas cercano en dirección normal al contorno. Las dos constantes κ de Von Karman=0.41 y la constante empírica B al rededor de 5.5 en superficies lisas. Con la ecuación 3-24 se puede conocer el esfuerzo cortante τ_w en función de la velocidad $\bar{v}_P$, para poder encontrar las propiedades de la turbulencia en z_P :

$$k_P = \frac{v_\tau^2}{C_\mu^{1/2}} \quad (3-25)$$

$$\epsilon_P = \frac{C_\mu^{3/4} k_P^{3/2}}{\kappa z_P} \quad (3-26)$$

Esta aproximación pierde validez en la medida en que se tienen patrones geométricos mas complejos, por lo que deben considerarse otras aproximaciones.

Si bien la modelación de la turbulencia empieza a requerir de varias consideraciones cuando se emplea la metodología *RANS*, cabe exponer que entender el planteamiento expuesto no resulta de mayor dificultad. Muestra de ello es que se redujo un conjunto de ecuaciones a la ecuación de transporte 2-19. Lo que debe tenerse siempre claro es la importancia de las condiciones, valores de entrada y metodología de solución que se emplee. Para ello el capítulo 4, explica en mejor detalle el procedimiento típico que se emplea en la modelación de *CFD*.

4. Capítulo 4. Proceso de Solución

Tras identificar las bases que soportan la modelación de la turbulencia con la metodología $k - \epsilon$ en los primeros tres capítulos, esta sección pretende mostrar el esquema de modelación que se siguió para este trabajo, el cual obedece a los procesos típicos empleados en *CFD*. Estos procesos se implementaron mediante el uso de varios software libres y a código abierto, reconocidos por comunidades internacionales por su fácil aplicación, de forma que se muestra la facilidad de implementación en escenarios académicos.

4.1. Proceso de Análisis en CFD

Según Eesa (2009), un análisis exitoso de *CFD* requiere:

- Una *grilla de puntos* en los que se acumularán las variables calculadas en *CFD*.
- *Condiciones de Contorno* para definir las condiciones en los contornos del dominio del flujo.
- *Propiedades del fluido* como la viscosidad
- Un *Modelo del flujo* que define los diferentes aspectos del flujo como la turbulencia o el transporte de masa.
- *Condiciones iniciales* que otorguen valores iniciales de las variables en la modelación
- *Parámetros de control de la solución* que permiten controlar el comportamientos del proceso de la solución numérica.

Estos insumos se enmarcan dentro de tres elementos principales de la *CFD*:

- Pre-Proceso
- Proceso
- Post-Proceso

A continuación se hace una descripción mas detallada de estos elementos, y su inter-relación en el contexto de la modelación de la turbulencia. La figura **4-1** ilustra esta relación.

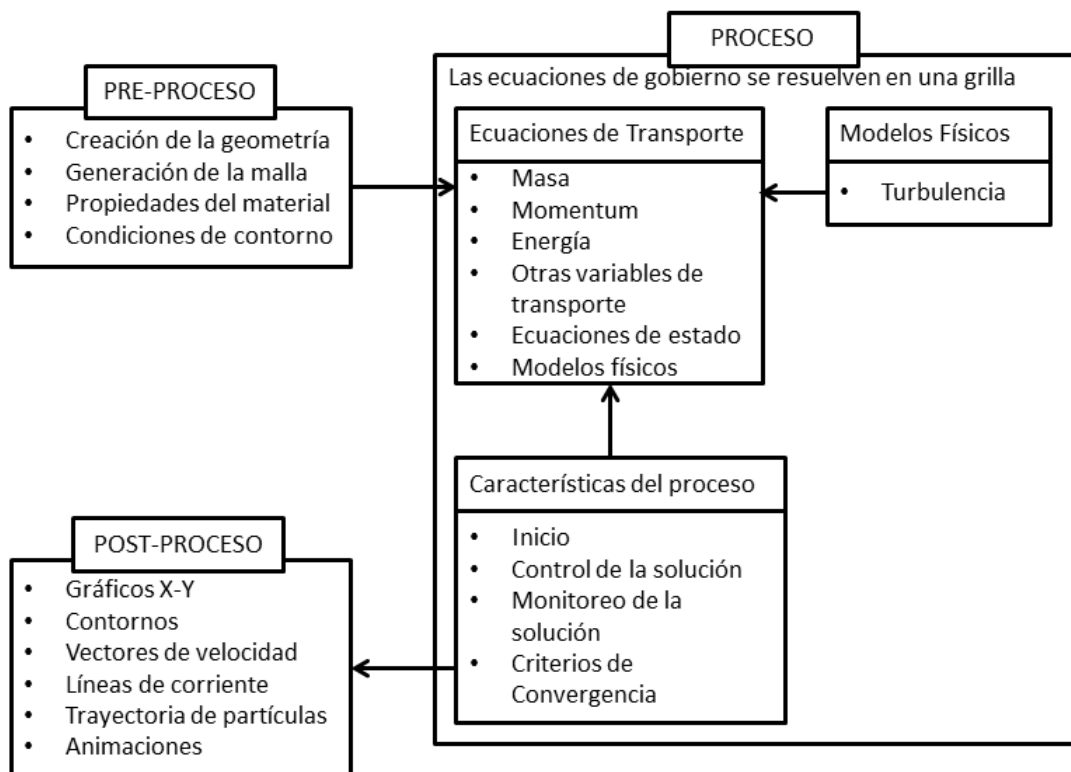


Figura 4-1.: Conexión de los tres elementos principales en el análisis en *CFD*. (Tomado de Jiyuan Tu, 2008)

4.1.1. Pre-proceso. Definición del Problema

Enmarcar claramente el problema que se va a tratar hace particular cada modelo que se haga en *CFD*. Las siguientes etapas hacen que el problema quede dispuesto claramente para poder disponer la modelación numérica de las ecuaciones de gobierno de la simulación.

Idea Inicial

Es importante entender cuanto se pueda el problema que se quiere simular para poder definirlo claramente. Esta etapa involucra coleccionar todos los datos necesarios para la simulación incluyendo detalles de la geometría, propiedades del fluido, especificaciones de flujo y condiciones de contorno e iniciales.

Creación de la geometría

La geometría del dominio del flujo se crea de forma que se garantice que la dinámica del flujo pueda desarrollarse libremente. En este paso se emplean software especializado en dibujo. Usualmente se desarrollan los dibujos en *2D* para luego con herramientas *3D* generar toda

la geometría.

Generación de la malla

Es uno de los pasos mas importantes en el pre-proceso. El dominio se divide en un número suficiente de pequeñas celdas (volúmenes de control) que conforman una malla. El flujo descrito en cada celda se resuelve numéricamente determinando las propiedades del flujo como velocidad, presión, temperatura y otros parámetros del flujo.

La generación de la malla se realiza con algún software especializado para ello, los cuales hacen uso de diferentes técnicas de enmallado descritas por diversos autores [6, 23–25].

Selección de la física del problema y de las propiedades del fluido

En la *CFD* se debe identificar claramente en que tipo de proceso físico se esta trabajando. Un esquema que muestra los diferentes procesos físicos se muestra en la figura 4-2. en la que igualmente se identifican las características propias del fluido.

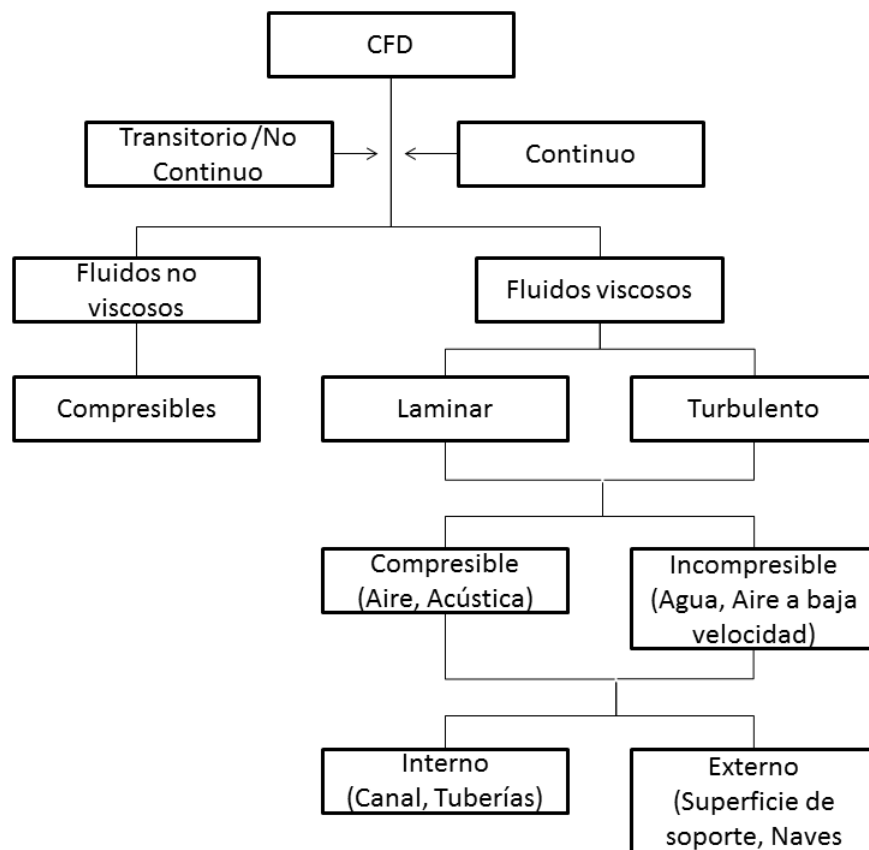


Figura 4-2.: Diferentes procesos físicos usuales en la *CFD*

Especificación de las condiciones de contorno

A lo largo de este documento se ha venido expresando la importancia de definir claramente las condiciones de contorno que preescriben el problema. Si estas condiciones se emplean claramente se pueden emplear menores tiempo de cálculo en la etapa del proceso y se evitan resultados que no tengan sentido físico alguno en la representación de la situación real. Para mayores especificaciones se remite a la sección 1.3.

4.1.2. Proceso. Solución Numérica

El planteamiento numérico que sigue la *CFD* como se expuso en el capítulo 3 corresponde a la ejecución por parte de un software especializado, de dichos planteamientos, aplicados al problema particular definido en el Pre-Proceso. Esta etapa es la esencia de la modelación, en la que se encuentran los valores de las variables en tiempo y espacio, obedeciendo las ecuaciones de gobierno. Esta etapa para posibles programadores de software *CFD* implica una especial atención en cuanto a sus habilidades en programación y al entendimiento profundo de los métodos numéricos que se quieran implementar. Hoy, se tiene disponibles ya diferentes software especializados, tanto comerciales como libres que siguen esquemáticamente la solución planteada en el capítulo 3 de este documento para responder a las diferentes simulaciones que el usuario quiera aplicar. Al ser modelación numérica deben tenerse presentes dos procesos importantes en esta etapa: el control de la solución y el monitoreo de la convergencia de la solución.

Inicio y Control de la Solución

El proceso parte de unas condiciones iniciales impuestas, cuya importancia es similar a la de las condiciones de contorno. De escogerse sabiamente, se pueden reducir considerablemente los tiempos de convergencia de las soluciones y evitar problemas de divergencia en los resultados de las variables evaluadas.

Cuando se habla del control de la solución se hace referencia a la definición de las metodologías de solución que lleven a la interpretación numérica de los casos. El método numérico a emplear y los métodos de interpolación de los valores para garantizarles continuidad deben definirse a criterio del usuario. Aunque en *CFD*, como ya se expuso, es usual emplear la metodología de los volúmenes finitos como método numérico de solución. Las estrategias de interpolación son varias y dependerá su uso de la experiencia en los resultados con las variables evaluadas, las cuales se especifican con mayor detalle en Chung (2002).

Monitoreo de la Convergencia

Poder estar monitoreando la convergencia de la solución es una clara estrategia de revisión para los anteriores pasos. Soluciones inestables suelen ser señal de un error en la definición de

alguna de las variables antes expuestas. Los software suelen hacerlo mostrando la evolución del residual del que se habló en la sección 3.3.2, y será el usuario quien defina si se llega a convergencias aceptables o no.

4.1.3. Post-Proceso. Reporte de resultados y visualización

Uno de los fuertes de la *CFD* es la forma como se muestran los resultados. La variación de las variables del flujo en el dominio se observan y se permite concluir sobre la simulación. Las formas usuales de visualización de los resultados son:

Gráficos X-Y

Son útiles para presentar los datos numéricos, a ampliamente usados para mostrar perfiles de las variables del flujo, en especial, la velocidad. Por ejemplo, el desarrollo del flujo puede mostrarse graficando varios perfiles de velocidad en el dominio.

Gráficos de Contornos

Son mapas *2D* a color que muestran la variación de una variable en el dominio. El uso de colores, es muy útil para la determinación de zonas homogéneas o zonas críticas de la variable estudiada.

Vectores de velocidad

La gráfica de vectores provee una forma interesante de visualizar la tendencia de la variable en un punto cualquiera. La variable usual para este fin es la velocidad. Se emplea para representar condiciones bidimensionales, cuando se entra en esquemas *3D* se suele emplear secciones que muestren la gráfica de vectores para evitar que la visualización se vea contaminada por la gran cantidad de vectores.

Líneas de corriente

Una línea de corriente es una curva que es instantáneamente tangencial al vector de velocidad del flujo [7], y representa la trayectoria que una partícula de masa cero, tomará en el dominio del fluido. Son usuales para representar patrones del flujo.

Trayectoria de partículas

Se usa para mostrar la trayectoria del fluido o de partículas sólidas en el flujo. Es muy útil este tipo de representaciones en los modelos de mezclas o flujos multifase.

Animaciones

La mayoría de los software que existen hoy para *CFD* permiten crear animaciones de diferentes tipos para mostrar la variación de las variables en tiempo y espacio. Es el caso de representar el recorrido de una partícula en el dominio o la variación de una de las variables en el tiempo, mediante la representación sucesiva de gráficos de contorno para cada unidad de tiempo.

4.2. Verificación de los modelos CFD

La verificación de los modelos se requiere frecuentemente para poder verificar su desempeño. Este proceso consiste en comparar los resultados de *CFD* con datos disponibles, bien experimentales, teóricos o analíticos. Los modelos validados son tanto estables como confiables. Sin embargo, los datos no son siempre de fácil acceso, por lo tanto realizar esta etapa no siempre es posible y recae la responsabilidad de darle validez, a quien realiza la simulación, basado esencialmente en la experiencia personal con la variable evaluada o con el conocimiento de las tendencias físicas del comportamiento del flujo.

4.3. Caso 1. Flujo en un codo

Los codos junto con las tes, son geometrías comunes usadas en sistemas de tuberías para redireccionar los fluidos. Estos accesorios representan grandes pérdidas de energía dado el cambio brusco de dirección que sufre el flujo, adicionado a la fuerza que genera el cambio mismo sobre las paredes de la tubería. Hoy por hoy, los codos resultan de interés en la modelación *CFD* dado que son sinónimos de corrosión y erosión en las paredes de la tubería cuando el flujo acelerado pasa por ellos. Cuando el fluido, en este caso el agua, para por el codo, la interacción entre las fuerzas centrífugas y viscosas crean un fuerte flujo secundario en el plano normal al eje de la tubería. Este flujo secundario se genera por la producción de vórtices en el cambio de dirección que sufre el flujo. La acción de estos vórtices aceleran el proceso de corrosión y erosión en las vecindades del codo y en el codo mismo.

A continuación se presenta un caso de flujo en una tubería, tomado del caso expuesto por Homicz (2005), en el cual se emplearon los software FLUENT¹ para la simulación del flujo en el codo; la geometría y el enmallado mediante GAMBIT. En este trabajo la geometría del codo junto con la malla se hicieron con el software Gmsh, y el solucionador *CFD* empleado fué OpenFOAM con ayuda de la interfaz gráfica Discretizer (Ver Anexo A.)

¹Código comercial de *CFD* del grupo Fluent Inc., de la casa ANSYS Inc, uno de los paquetes comerciales mas fuertemente usados entre investigadores y empresarios junto con el enmallador GAMBIT de los mismos creadores. Página Web: www.ansys.com

4.3.1. Descripción del modelo

La figura 4-3 muestra una vista en planta de la geometría empleada para la simulación. Los ejes coordenados (x, y) se encuentran en el plano del papel, con el origen en la esquina inferior de la tubería de ingreso al codo.

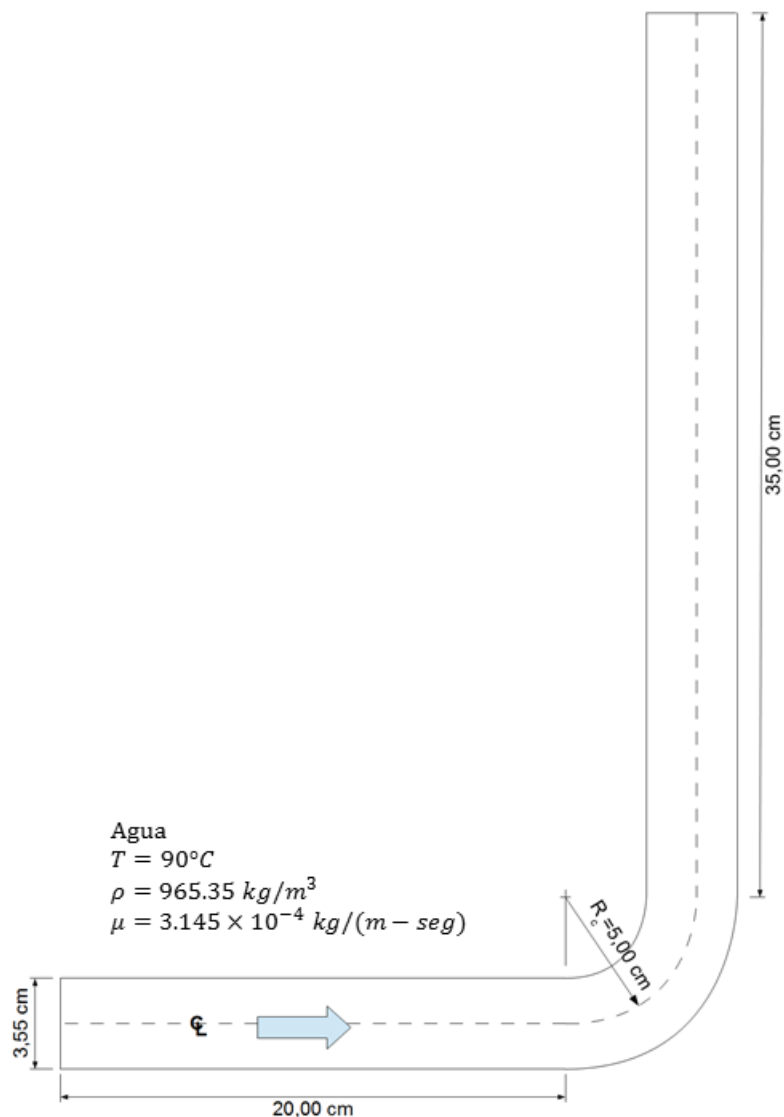


Figura 4-3.: Geometría del modelo empleado de un codo

La tubería tiene un diámetro interno de $D = 3,55 \text{ cm}$. El flujo ingresa a la tubería a una sección de $20,00 \text{ cm}$ de largo en la parte baja de la figura 4-3. De allí continúa el accesorio del codo y le sigue otra sección de tubería de $35,00 \text{ cm}$.

El problema se trata como flujo estacionario, viscoso, incompresible e isotérmico con agua

como el fluido empleado. Los efectos gravitatorios se desprecian. La temperatura se considera de $T = 90^\circ C$, para los que la densidad y la viscosidad del agua son $\rho = 965,35 kg/m^3$, y $\mu = 3,145 \times 10^{-4} kg/(m \cdot s)$.

4.3.2. Malla

La geometría y el enmallado se realizó mediante el software Gmsh, desarrollado por el profesor del departamento de Ingeniería Eléctrica y de Sistemas de la University of Liège Christophe Geuzaine, en compañía de Jean- François Remacle [9]. Empleando el algoritmo de Delaunay² se obtuvo la malla mostrada en la figura 4-4 con las características que resume la tabla 4-1, la cual se diseñó pensando en simplificar los cálculos modelando la parte superior al plano $z = 0$ ya que consideramos un flujo isotérmico, sin efectos de flotación u otros efectos que se asocian a la gravedad.

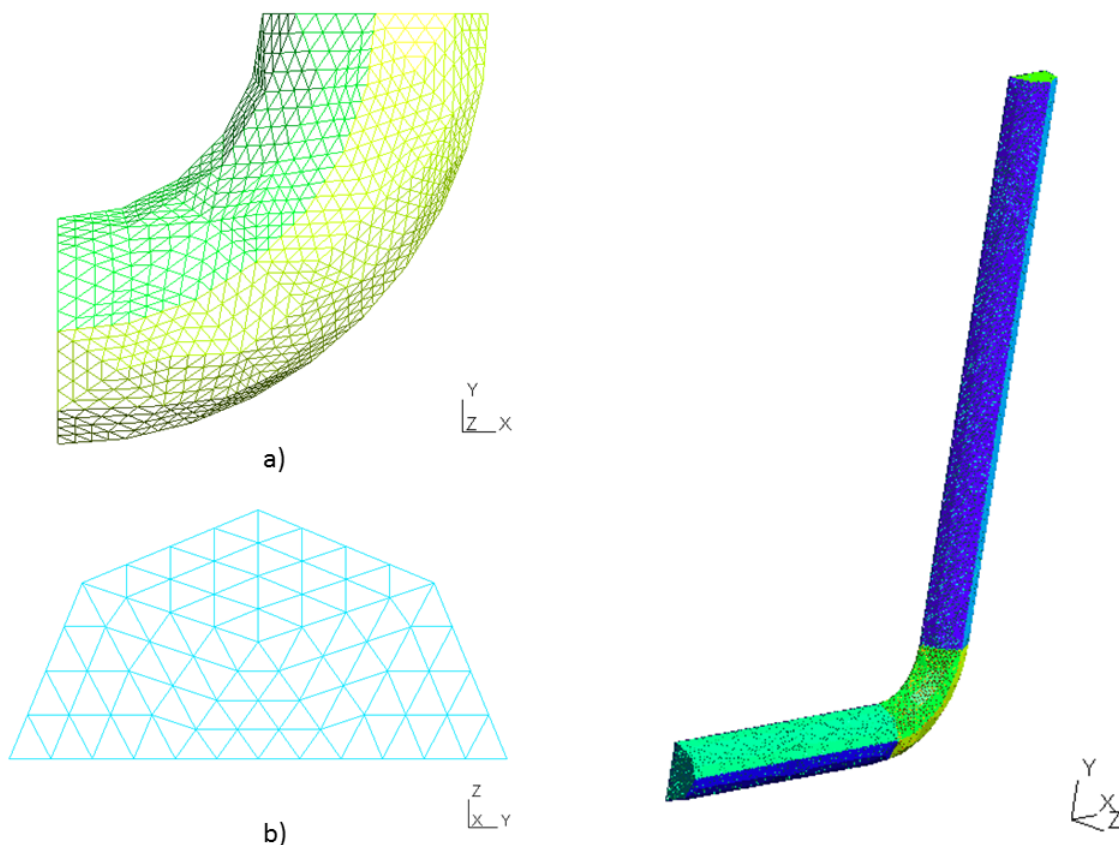


Figura 4-4.: Malla empleada diseñada con el software Gmsh. a) vista en planta de la malla empleada en el codo. b) sección transversal de la malla empleada para la tubería

²La triangulación de Delaunay es un método de enmallado creado por el Ruso Boris Delaunay en 1934 en que para un grupo P de puntos en un plano, la triangulación $DT(P)$ es tal, que ningún punto en P está dentro de un círculo circunscrito en los triángulos de $DT(P)$.

Tabla 4-1.: Características de la malla empleada

Puntos	Caras	Caras Internas	Volúmenes	Contornos
33562	343130	320858	165997 Tetraedros	4

4.3.3. Condiciones iniciales y de Contorno

Para las condiciones de contorno se definen cuatro bordes como muestra la figura 4-5. A continuación se describe el tipo de contorno que se aplicó a la malla.

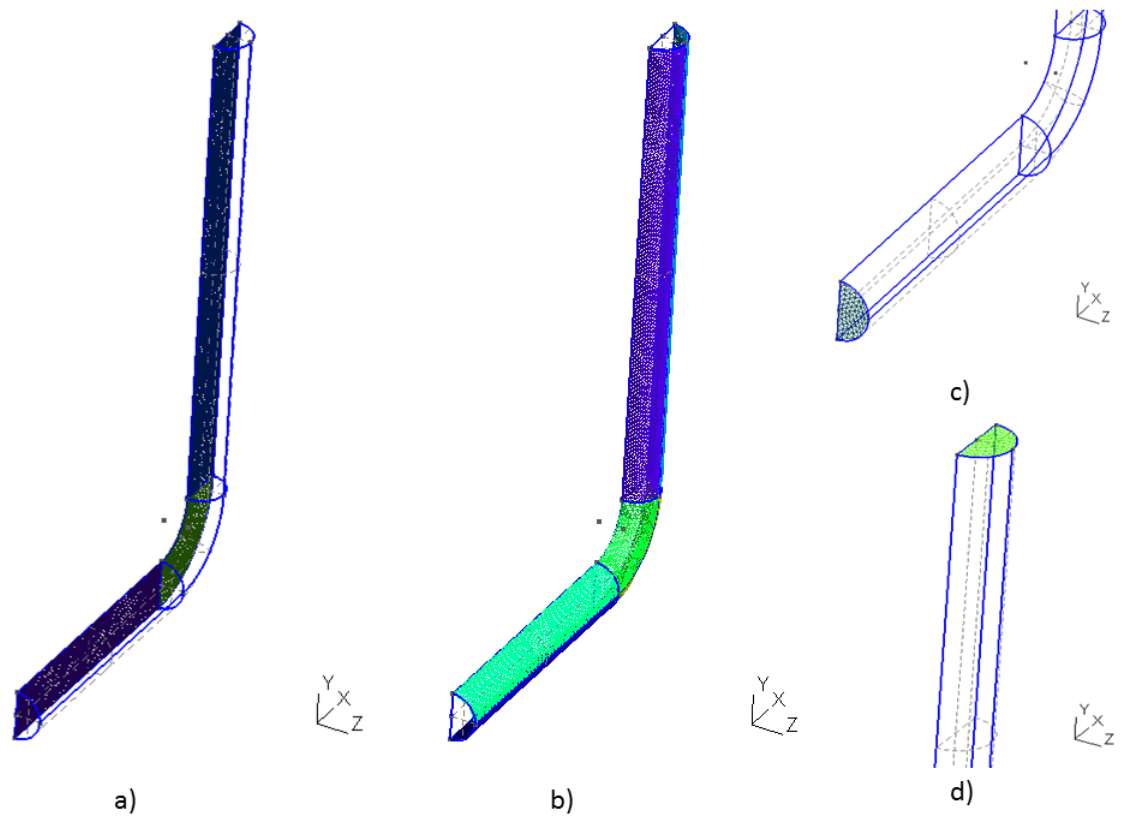


Figura 4-5.: Bordes empleados para las condiciones de contorno. a) Plano de simetría, b) Pared, c) Entrada, d) Salida

Plano de simetría

Gracias a la condición de borde disponible en OpenFOAM “symmetryPlane” cada cara de los volúmenes que conforman el plano $z = 0$ tendrán como condición $\partial(..)/\partial n|_{z=0} = 0$ para todas las variables del flujo (ver figura 4-5 a))

Pared

Para una pared impermeable no se genera flujo normal a la superficie, y dado que tratamos un flujo viscoso, los componentes de la velocidad tangenciales a las paredes son nulos, por lo que los tres componentes de la velocidad en las paredes serán iguales a cero (ver Figura 4-5 b))

Entrada

En la entrada del dominio en $x = 0$ se aplica como condición de contorno la velocidad media del flujo tomada como $5m/s$ (ver Figura 4-5 c)).

Salida

A la salida del sistema, terminados los 35.0 cm de la tubería siguiente al codo, se emplea una condición de contorno de Presión, para la cual, empleamos un valor de $0Pa$ (ver figura 4-5 d)).

Condiciones Iniciales

Dadas las características del flujo, de la geometría y de contorno expuestas anteriormente, es posible identificar los parámetros propios de la modelación en turbulencia expuestos en el capítulo 3, mediante la siguiente serie de ecuaciones:

$$Re = \frac{L|\bar{v}|}{\nu} \quad I = 0,16(Re)^{-1/8} \quad l = 0,07L \quad k = \frac{3}{2}(U \cdot I)^2 \quad \epsilon = \frac{C_{\mu}^{0,75} k^{1,5}}{l}$$

En la tabla 4-2 se muestra el resultado de aplicar estas ecuaciones al modelo seleccionado. Los valores obtenidos para los parámetros k y ϵ se aplican a la entrada y la salida del sistema, al igual que una condición inicial en toda la malla de velocidad $\bar{v} = 0$ y $P = 0$.

4.3.4. Características de la simulación

Considerando la turbulencia del flujo y empleando los modelos disponibles en OpenFOAM, se dispone el análisis mediante el modelo “RNGk-epsilon”, el cual corresponde a un modelo reciente que usa técnicas estadísticas mas rigurosas conocidas como la teoría del **ReNormalization Group** (RNG) [10]. Similar a la forma del modelo estándar $k - \epsilon$, este resulta de una derivación analítica de los valores de las constantes del modelo, que le dan mayor

Tabla 4-2.: Evaluación de condiciones iniciales

Propiedades del caso	$L =$	$3,55cm$
	$\nu =$	$3,25 \times 10^{-7} m^2/s$
	$C_\mu =$	$0,09$
	$\bar{v} =$	$5,0m/s$
Cálculos Intermedios	$Re =$	546153
	$I =$	3%
	$l =$	$2,48mm$
Condiciones iniciales	$k =$	$0,03375m^2/s^2$
	$\epsilon =$	$0,409m^2/s^3$

presición en los cálculos computacionales.

OpenFOAM alberga este modelo mediante el solucionador conocido como “simpleFoam”, el cual se usa para flujo turbulento en estado estacionario e incompresible.

La simulación se ejecutó con un equipo AMD Sempron de 2.10 GHz de velocidad, 4.0 GB de memoria RAM y en el sistema operativo UBUNTU V. 12.01.

4.3.5. Resultados

Tras 500 iteraciones destinadas al modelo con saltos en el tiempo de 0.0005 segundos hasta 0.25 segundos, los valores residuales del error se mantienen dentro de rangos predeterminados por el programa y llevan a la convergencia de la solución. OpenFOAM tiene como postprocesador al software ParaView, con el cual se visualizaron los resultados mostrados en la figura 4-6 y 4-7. Con estos resultados es posible visualizar las zonas en que se presentan los mayores valores de velocidad y cómo su distribución se ve afectada por los cambios que tiene la geometría. Al tiempo, es posible apreciar las tendencias de la dirección del flujo. En las Figuras 4-6 c) y d) mediante el diagrama de vectores y de líneas de corriente, se aprecia la aceleración que tiene el flujo de forma que la mayor velocidad se alcanza en la entrada al codo en las vecindades de borde interno, y sufre una separación cuando sale de él hacia el costado externo.

Si por otra parte, un estudio de este tipo de casos pretende conocer la incidencia del flujo en las paredes de la tubería, los gráficos de presiones permiten estimar la mayor afectación

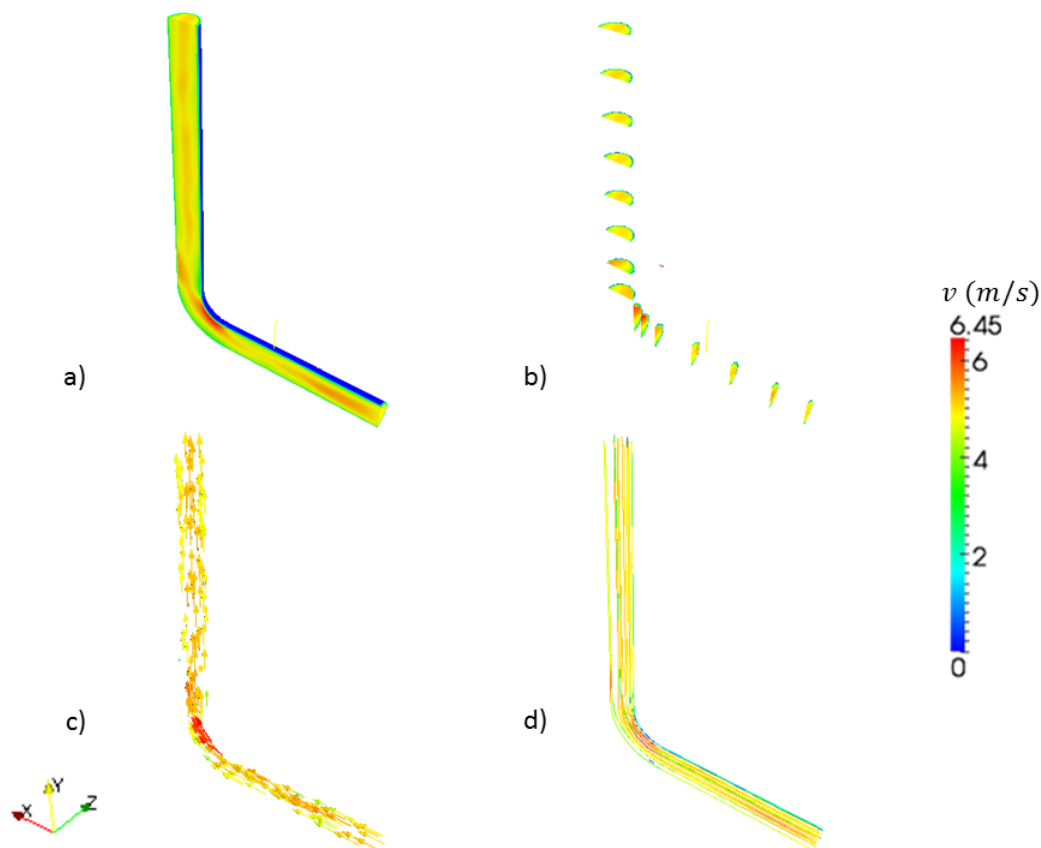


Figura 4-6.: Soluciones obtenidas tras la simulación de la turbulencia para la velocidad del flujo. a) Visualización de la magnitud del vector velocidad asociado a cada volumen finito, b) Vista de los perfiles de velocidad para diferentes secciones, c) Gráfico de Vectores de Velocidad, d) Gráfico de líneas de Corriente

y posibles zonas de presencia de cavitación por descenso considerable de la presión del flujo. En este caso la turbulencia permitió que se desarrollaran presiones negativas en el sentido de su dirección respecto al volumen finito. En magnitud alcanzaron hasta cerca de $13000 Pa$ lo que no significa riesgo por cavitación a la temperatura a la que se considera el flujo ($90^{\circ}C$).

La forma en que se visualizan los resultados de las simulaciones en *CFD*, por el manejo de colores asociados a magnitudes, al igual que la dirección de los vectores y su longitud permiten que el usuario entienda mejor el flujo y asocie las tendencias de variables como la presión y la velocidad a los efectos que puedan producir en los materiales y las estructuras que los contienen.

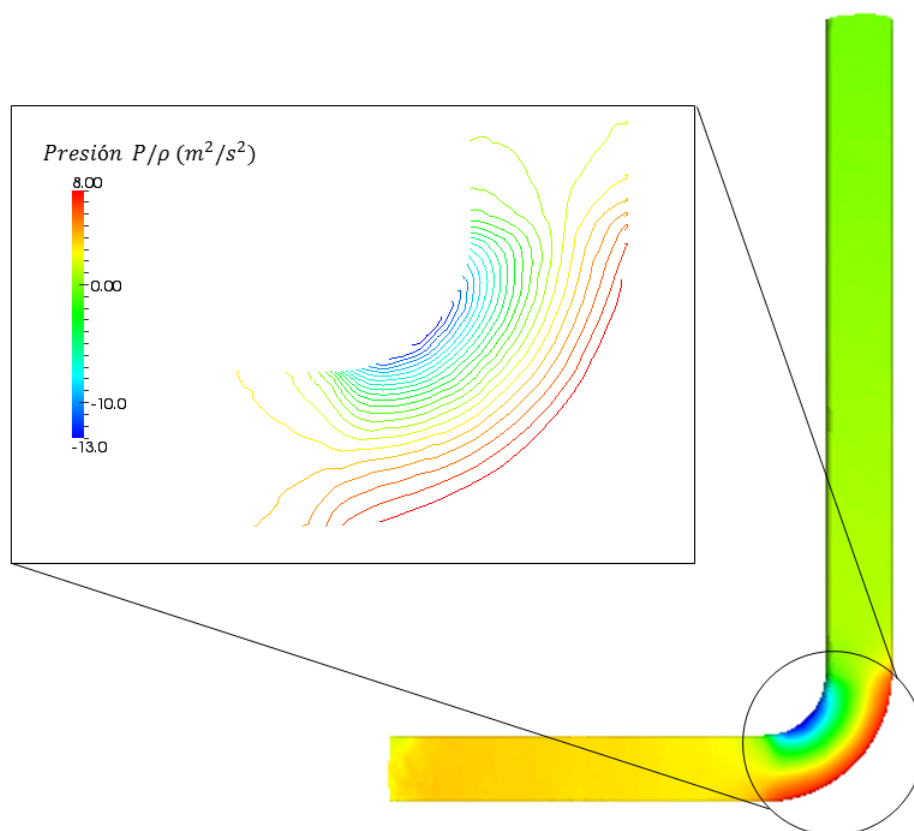


Figura 4-7.: Soluciones obtenidas tras la simulación de la turbulencia para la Presión

Efectos del modelo y de las condiciones empleadas

El modelo $k - \epsilon$ como se expuso en capítulos anteriores, conforma en una escala de complejidad, uno de los modelos más sencillos de la turbulencia, del cual se obtienen valores promedios de las variables que se evalúan como velocidad, presión, energía cinética de la turbulencia o la tasa de disipación de la energía. Sin embargo, y a pesar que este método requiere la menor cantidad de recursos computacionales, una estimación cercana y al detalle de las vorticidades que puede la turbulencia generar a pequeña escala, son posibles considerando largos tiempos de cálculo o equivalentemente mejores recursos.

Cuando las simulaciones pretenden con la metodología $k - \epsilon$ (y en general *RANS*), estimar comportamientos como los efectos de la fricción en las paredes o la separación del flujo que generan las capas viscosas, se requieren mallas de volúmenes muy finas. Para este ejemplo, se emplearon como muestra la tabla 4-1, 33562 puntos mientras que autores como Wilcox (1993), citado por Tannehill *et al.* (1997), expresan que el número de puntos N necesarios para obtener resultados apropiados de la turbulencia, se puede estimar mediante la expresión:

$$N = (0,088Re)^{9/4} \quad (4-1)$$

Tomando como valor para el número de Reynolds Re el equivalente al de la velocidad media del flujo. Siguiendo este criterio, la modelación del codo habría requerido al rededor de 34×10^9 puntos. En este sentido, los requerimientos de cálculo por cada salto en el tiempo sería muy grande para equipos computacionales con bajas características, teniendo en cuenta que para la malla utilizada en este trabajo, y el equipo empleado la simulación tomó al rededor de una hora.

Se hace necesario siempre para *CFD* conocer el equipo con el que se quiera implementar la simulación y aún más cuando se aumenta el nivel de complejidad del modelo. Choi, *et al.* (2011) expresan que para simulaciones como *LES* o *DNS* el número de elementos necesarios para la grilla se dan en proporciones de $N \sim Re^{13/7}$ y $N \sim Re^{37/14}$.

Otro factor importante en la obtención de los resultados reside en las condiciones de borde empleadas. Usualmente, las condiciones que se conocen para un sistema de este estilo, son la velocidad media del flujo, la geometría del sistema de tuberías y las condiciones en un punto, de temperatura del fluido empleado. Valores como la presión, cuando no se dispone de una herramienta de medición suelen no tenerse, y el hecho de haber adecuado a nuestro problema una presión continua en la salida de $0Pa$, hizo que el flujo se ajustara para alcanzar esta presión, condición que puede no ser cierta necesariamente, sin embargo, entre mayor cantidad de condiciones de contorno adecuadas se tengan, se alcanza la convergencia de la solución con menor número de iteraciones.

4.4. Caso 2. Flujo en una conexión tipo T

Para la simulación del flujo en un accesorio, se implementará el modelo formulado por Anderson *et al.* (2006) de un sistema de dos tuberías conectadas mediante una Te, diseñado para evaluar la incidencia de la turbulencia en la mezcla térmica que se genera al combinar por dos de las entradas, agua a diferentes temperaturas. Este modelo ha sido ampliamente estudiado por otros autores posteriores quienes han venido estudiando el comportamientos de modelos tipo LES para evaluar las incidencias planteadas por el autor inicial [8, 13, 14, 20].

4.4.1. Descripción del modelo

La geometría del modelo corresponde a la que se muestra en la figura 4-8. El sistema coordenado tiene su origen en la entrada de la tubería dispuesta en sentido horizontal, para la que el eje x corresponde al eje axial de la tubería horizontal de forma que la cara de entrada a esta tubería se encuentra contenida en el plano $y - z$ con el eje x ascendiendo. El sistema

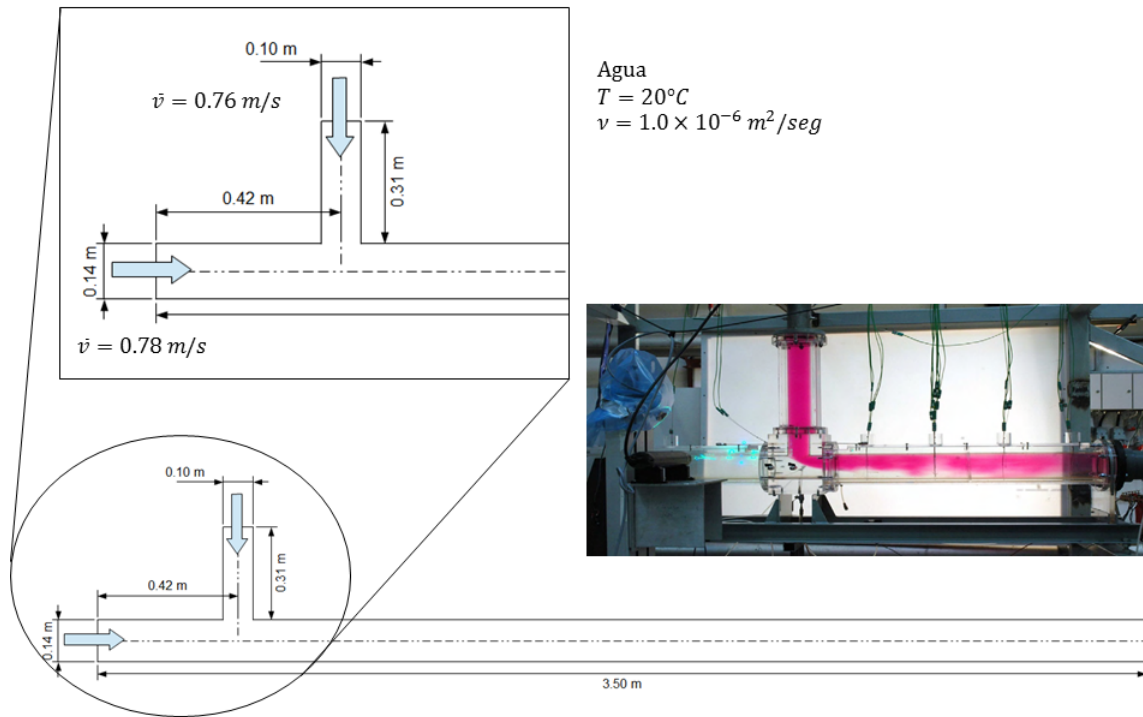


Figura 4-8.: Geometría del modelo de Te, empleada. En la fotografía se muestra el modelo físico estudiado por Anderson *et al.* (2006)

está conformado por dos tuberías perpendiculares conectadas. La tubería horizontal tiene un diámetro de 0,14m y la tubería vertical de 0,10m.

La longitud de la tubería se toma de 25 veces el diámetro (3,1m) en la dirección x , con el centro de la tubería vertical que se une a tres veces el diámetro (0,42m). La tubería vertical tiene una longitud de 3.1 diámetros (0,31m) medidos desde la entrada de la tubería horizontal.

Nuevamente consideramos un problema incompresible e isotérmico con agua como el fluido que pasa a través de las dos tuberías a 25°C .

4.4.2. Malla

Nuevamente, la geometría y el enmallado se realizaron con Gmsh con los resultados que muestra la figura 4-9 y la tabla 4-3

4.4.3. Condiciones de Contorno

Como muestra la tabla 4-3, se implementaron cinco contornos:

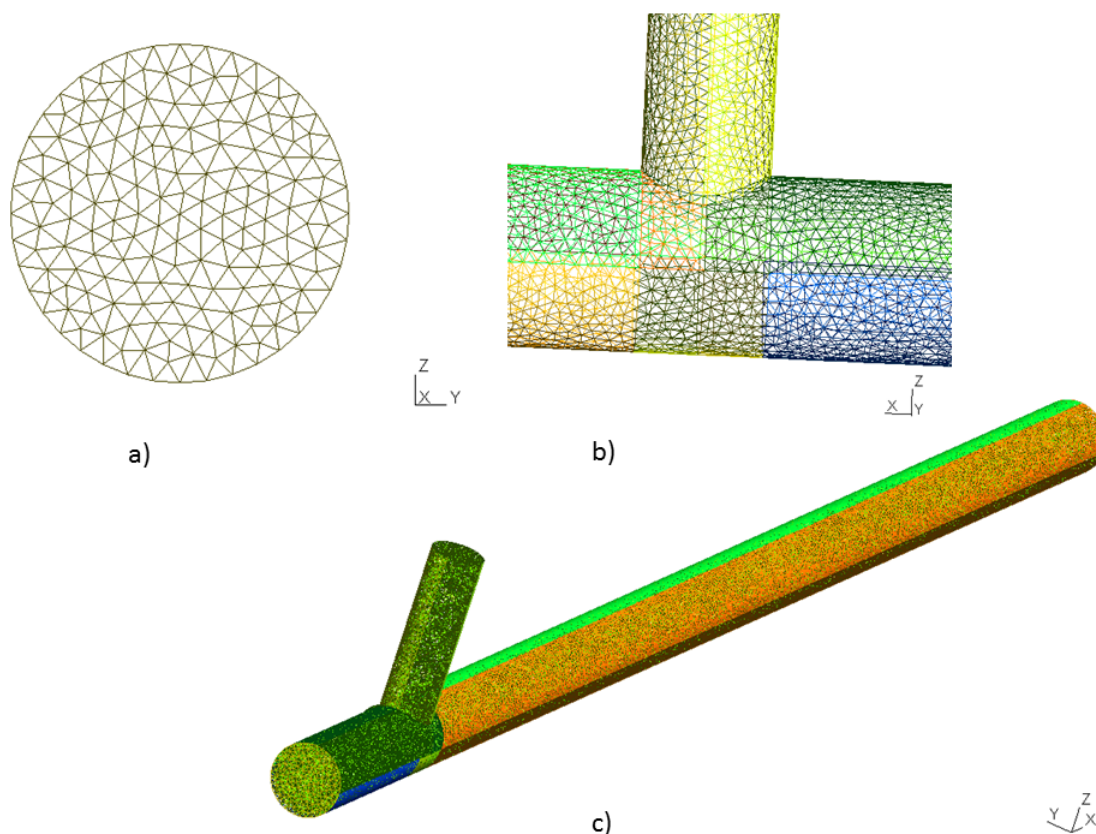


Figura 4-9.: Malla de volúmenes finitos empleada para la simulación del flujo en una Te. a) detalle de la sección transversal, b) detalle de la unión entre las dos tuberías, c) esquema general de la malla

Entrada 1

Corresponde a la entrada a la tubería horizontal, descrita en el plano $x = 0$. Los elementos de este contorno están sometidos a una condición de velocidad conocida de flujo de $0,78m/s$.

Entrada 2

Es la entrada del flujo de la tubería vertical, que se encuentra en el plano $z = 0,38$ cuya condición estará ajustada a una velocidad de entrada de $0,76m/s$.

Salida

Nuevamente se tomará la salida del sistema, terminados los $3,5m$ de la tubería bajo la condición de presión de $0Pa$.

Tabla 4-3.: Características de la malla empleada para el caso de la Te

Puntos	Caras	Caras Internas	Volúmenes	Contornos
23385	175262	138834	78524 Tetraedros	5

Pared Tuberías 1 y 2

La tubería 1 corresponde al contorno de la tubería horizontal, cuya condición se mantendrá a velocidad de cero. Esta misma condición se aplicará a la tubería vertical o tubería 2.

Condiciones iniciales

Aplicando la misma metodología del caso anterior, las condiciones iniciales que aplica al modelo $k - \epsilon$. En este caso, las propiedades de la turbulencia tendrán valores diferentes para cada tubería antes del punto de contacto del flujo. Por ello, cada tubería tendrá las condiciones iniciales mostradas en la tabla 4-4

Tabla 4-4.: Evaluación de condiciones iniciales para el caso de la Te

		Tubería 1	Tubería 2
Propiedades del caso	$L =$	0,14m	0,10m
	$\nu =$	$1,0 \times 10^{-6} m^2/s$	$1,0 \times 10^{-6} m^2/s$
	$C_\mu =$	0,09	0,09
	$\bar{v} =$	0,78m/s	0,76m/s
Cálculos Intermedios	$Re =$	109200	76000
	$I =$	3,7 %	4,0 %
	$l =$	9,8mm	1,4mm
Condiciones iniciales	$k =$	$0,00125 m^2/s^2$	$0,00139 m^2/s^2$
	$\epsilon =$	$0,00074 m^2/s^3$	$0,00121 m^2/s^3$

4.4.4. Características de la simulación

Las características propias de la simulación se aplicaron idénticamente iguales al caso anterior.

4.4.5. Resultados

La convergencia de la solución se alcanzó nuevamente con la programación de 500 iteraciones entre 0 y 0,25 segundos. Los resultados se muestran en las figuras 4-10 y 4-11 para velocidad y presión respectivamente.

La modelación de la turbulencia permite visualizar las tendencias del flujo y prever sus

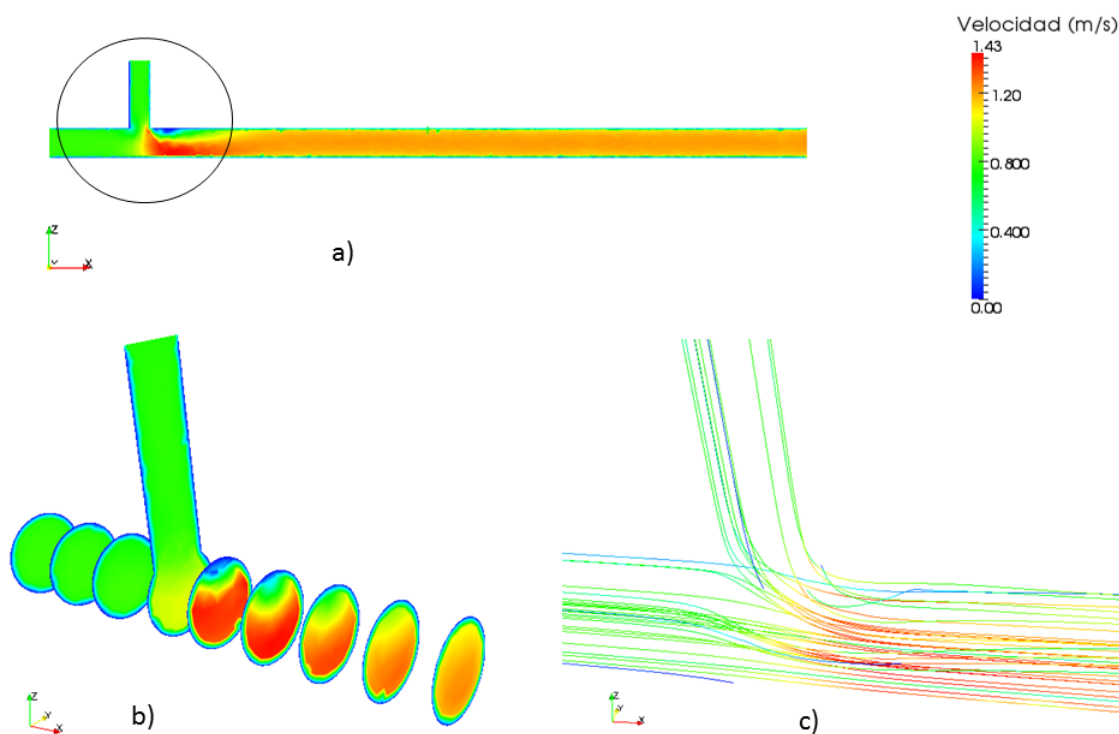


Figura 4-10.: Resultados para la velocidad de la simulación. a) Vista transversal del campo de velocidades en el plano $y = 0$. b) Vista de los perfiles transversales de velocidad. c) Visualización de la tendencia de las líneas de corriente

posibles incidencias en el material que la compone, como se observa en el extremo derecho de la unión Te, donde, la separación que sufre el flujo por el cambio de dirección genera presiones negativas que pueden significar problemas en la resistencia de un material que funcione bajo características similares al modelo implementado.

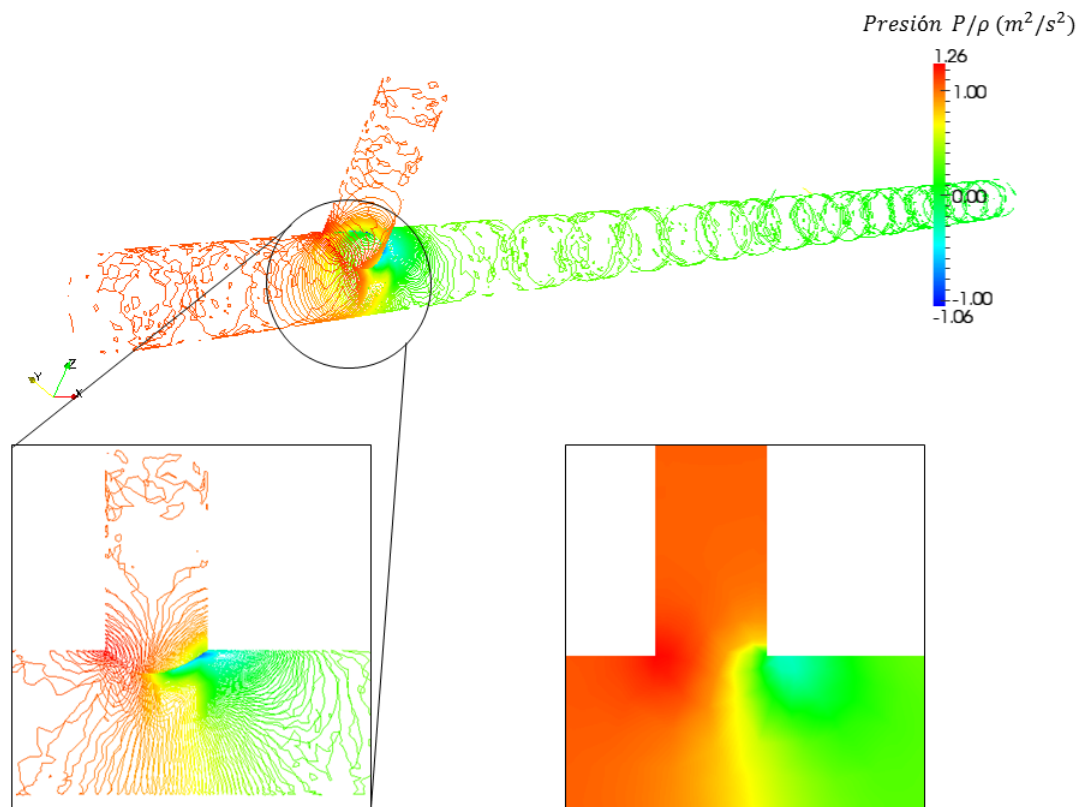


Figura 4-11.: Resultados para valores de Presión P/ρ

5. Conclusiones y Recomendaciones

5.1. Conclusiones

En este trabajo, se muestra el resultado de una intensiva búsqueda de software libre de *CFD* para su aplicación a conductos a presión, de forma que se lograra identificar el comportamiento propio de variables del flujo como la velocidad y la presión bajo la influencia de la Turbulencia. Para ello, fue necesario hacer un recorrido por las diferentes bases teóricas de modelos de baja complejidad para la turbulencia. El modelo empleado fue el $k - \epsilon$ de la metodología *RANS* y se aplicó al flujo en un codo y en una unión tipo T.

De esta revisión de software se empleó la herramienta OpenFOAM, cuyos resultados permiten que el usuario identifique las tendencias del flujo y el comportamiento de las variables en el tiempo y el espacio, visualizando claramente, tendencias e incidencias de la turbulencia.

Es de resaltar, que si bien, la literatura y las investigaciones que se han venido desarrollando en las últimas décadas muestran avances significativos respecto a la modelación en *CFD*, el constante aumento de los software a código abierto han significado un fuerte impulso al interés de las comunidades científicas y universidades a desarrollar códigos que atiendan a necesidades particulares, lo que se pudo evidenciar en la búsqueda de los programas que apoyaron este trabajo.

Cuando se hacen búsquedas en la web de software que sirvan para el pre-proceso, proceso y post-proceso en la modelación *CFD*, son numerosas las páginas que ofrecen software libre y a código abierto que han sido objeto de revisión extensiva por parte de estudiantes de maestrías y doctorados en sus tesis de investigación, o por conocedores del área mediante blogs o discusiones en línea, lo que permite a un usuario que quiera emplear este tipo de códigos, tener una percepción de qué puede esperar del software y qué no.

El uso de OpenFOAM, permitió tener un acercamiento a los modelos *CFD* que hasta ahora se habían venido manejando mediante programas comerciales como ANSYS, y sus resultados mostraron estructuras de comportamiento típicos en la turbulencia, además de poder emplear métodos numéricos de mayor complejidad comparados con el tan usado método de las diferencias finitas. Al tiempo, los software auxiliares a OpenFOAM que se emplearon permitieron mostrar facilidades en la modelación. Gmsh permitió que de manera eficiente

se generaran modelos en 3D como se mostró con el caso del codo, y la interfaz Discretizer por su parte, generó mayor agilidad en la programación del esquema de solución a los casos, evitando el contacto con los códigos que requiere OpenFOAM (Ver Anexo A).

A pesar de las facilidades expuestas, hasta que no se tengan claros los procesos que ejecutan, los software aquí empleados, son exigentes en la convergencia de soluciones o en la corrección de errores. OpenFOAM resulta, como exponen algunos interesados en el tema, un “maestro exigente”, que no permitirá obtener resultados acertados en tanto no se conozca y entienda las variables que usa y cómo las ejecuta en el proceso de solución, de forma que cualquier consideración errónea en sus variables, llevan a la divergencia de los resultados o a generación de soluciones carentes de significado físico. Es por esto que tuvo que ponerse especial atención en el uso de Discretizer, dado que estas interfaces gráficas, al evitar el contacto con los códigos de OpenFOAM, pueden estar escribiendo características no deseadas en el modelo, o en alguna parte de él.

5.2. Recomendaciones a futuros Trabajos

En el desarrollo de este trabajo, se hizo notoria la necesidad de dos grandes cualidades para quien se interese en los modelos: 1. Tener un claro conocimiento de las condiciones que hacen particular el problema, es decir, las condiciones iniciales y de contorno; y 2. Contar con herramientas computacionales en buenas condiciones de procesamiento y de memoria virtual.

Al tener presentes estas dos cualidades, se hizo evidente que con los software libre disponibles, es posible generar buenos modelos que permitan a la comunidad académica entender en mejor medida los procesos propios de la turbulencia y en particular, de las demandas que conlleva su modelación. Es en este sentido que se hace necesario que futuros trabajos dedicados a la generación de modelos de turbulencia, partan de entender tanto los procesos matemáticos y físicos que traen de fondo los software disponibles para ello. En este trabajo, el entender las limitaciones del modelo $k - \epsilon$, el planteamiento del método de los volúmenes finitos, y los principios de modelación expuestos en el capítulo 4, permitió que se tuvieran claros los alcances que se tenían con el uso del software OpenFOAM y no se esperaran resultados de los alcances de los modelos *LES* o *DNS*.

Cuando se expone en el segundo punto, la necesidad de contar con herramientas computacionales en buenas condiciones, hace mayor énfasis a los objetivos que se tengan con la modelación. De no contarse con herramientas en buenas condiciones operacionales que demanda cada tipo de modelo, los procesamientos pueden tomar varias horas que no sean funcionales si los resultados se requieran con prontitud, o cuando quien este ejecutando el modelo, no esté acostumbrado a las implicaciones de estar en contacto con el mundo de la programación.

En este sentido, si bien, el desarrollo de los modelos mostrados en este trabajo, se alcanzó con eficiencia una vez se conoció el papel de las diferentes variables, y el apoyo de software como Gmsh o Discretizer, que cuentan con interfaces gráficas que no son ajenas a los programas típicos que se manejan a nivel de pregrado; aún es necesario que se genere investigación para conocer el gran número de opciones que se tienen en la web para *CFD* y se evalúen las bondades y limitaciones que cada uno de estos tiene, para ir acercando cada vez más a los estudiantes de la Universidad Nacional de Colombia, a las tendencias mundiales en la dinámica de fluidos que se expusieron al inicio de este documento.

Para futuros trabajos queda por aplicar temas sumamente interesantes y que acercan cada vez más al entendimiento de procesos en la dinámica de fluidos como:

- Flujos compresibles.
- Mallas dinámicas.
- Transporte Multifase.
- Computación Paralela.
- Metodologías estocásticas en la turbulencia.
- Estructuras coherentes (ver Capítulo 1)

Estos temas, que aún, junto con los empleados en este trabajo, siguen siendo de constante investigación en las comunidades científicas, significan largos pasos, en el aprovechamiento del continuo avance en las capacidades computacionales y que permiten ir entendiendo cada vez más la tan estudiada y desconocida turbulencia.

A. Anexo: Sobre los software empleados

A.1. OpenFOAM

OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) es una herramienta para *CFD* distribuido por la OpenFOAM Foundation y producido por OpenCFD Ltd, de libre distribución y a código abierto licenciado por la GNU (General Public Licence), y se distribuye únicamente para sistemas operativos Linux.

Este programa permite simular varios de los problemas complejos del flujo de fluidos, incluyendo reacciones químicas, turbulencia y transferencia de calor, para dinámica de sólidos, electromagnetismo y algunas funciones financieras.

La tecnología que emplea OpenFOAM se basa en un grupo de módulos escritos en C++, que se usan para un amplio número de solucionadores, que simulan problemas específicos en ingeniería. Estos módulos permiten pasar por las diferentes etapas de la modelación: el preproceso, con creadores de mallas de volúmenes finitos e importación de mallas de otros generadores, el proceso mediante los solucionadores y el post-proceso mediante el visualizador ParaView.

OpenFOAM no solo permite la modificación de los códigos propios de cada caso, sino que su característica de ser a código abierto, también permite la modificación de los códigos fuente, haciendo que sus librerías sean totalmente ampliadas o mejoradas [22].

A.1.1. Estructura

OpenFOAM usa el método de los elementos finitos para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales parciales en mallas no-estructuradas de volúmenes tipo poliedro en *3D*. Sin embargo permite simular casos bi-dimensionales aplicando ciertas propiedades a las caras del modelo.

Para crear una simulación en OpenFOAM, es necesario crear un caso, el cual contendrá 3 carpetas:

- Carpeta *0*

- Carpeta *constant*
- Carpeta *system*

Cada una de estas carpetas contienen los diferentes módulos escritos en C++, y variarán de acuerdo al solucionador que se seleccione. Para el caso de *simpleFoam* la estructura típica es la que muestra la figura A-1. El proceso normal que sigue OpenFOAM, consiste en una

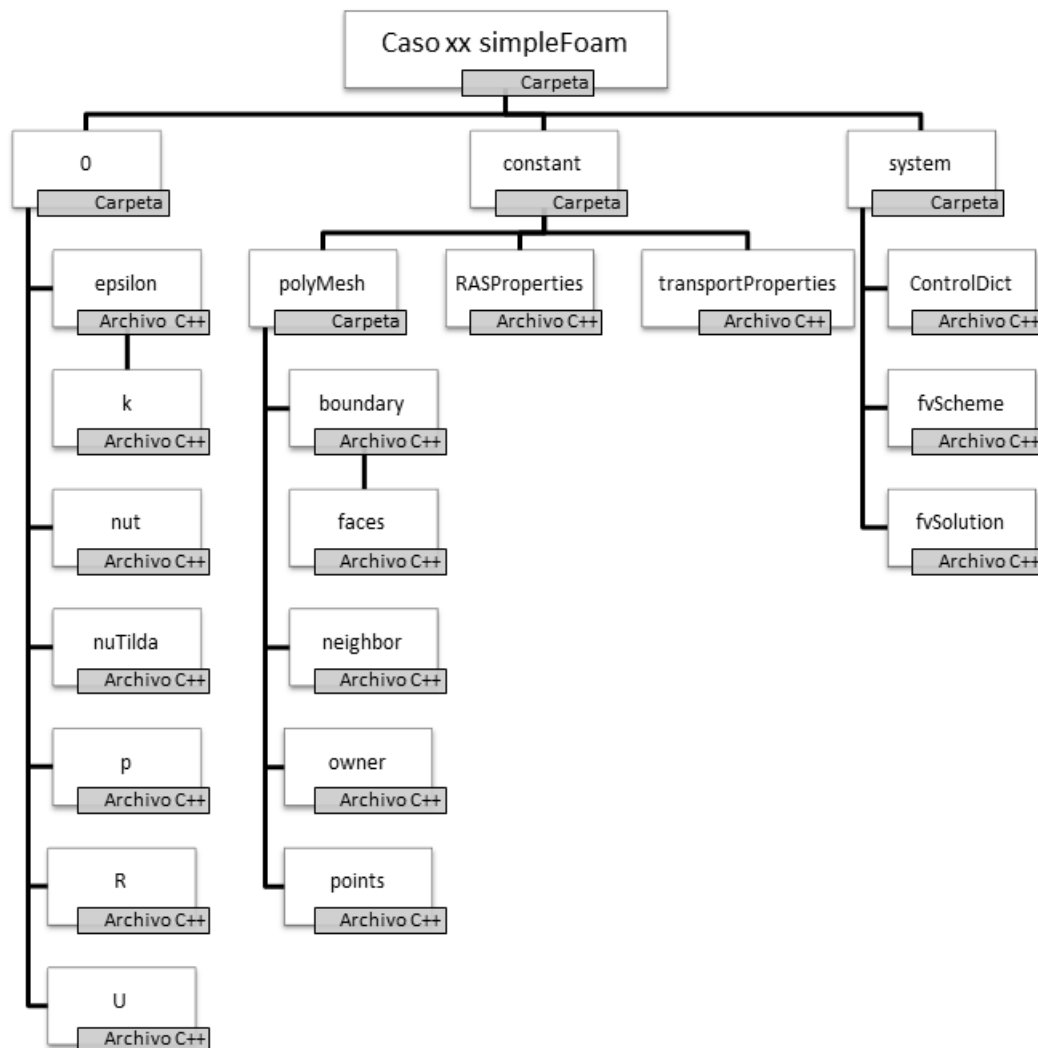


Figura A-1.: Esquema de organización de los módulos en C++ que emplea el solucionador *simpleFoam*

serie de comandos que se invocan desde ventanas de terminales, para lo que deben existir de entrada un archivo en la carpeta *PolyMesh*, con los datos para generar la geometría y la

mallla, un primer código convierte este archivo en todos los que contiene la carpeta según la figura **A-1**, de forma que se tengan claramente identificados los contornos, los elementos que compone todo el modelo, las caras de los elementos que conforman cada contorno y los demás datos estructurados para OpenFOAM. Seguidamente se invoca el solucionador que utiliza los datos de la carpeta *constant* y *0* de las cuales, los archivos de la primera muestran las propiedades geométricas y propias del modelo; mientras la segunda contiene las condiciones iniciales y de contorno. Estos archivos los utiliza de acuerdo a las indicaciones que se hayan especificado en la carpeta *system*, donde se identifica el solucionador, los tiempos de cálculo y los criterios de convergencia del modelo.

El programa ejecuta los cálculos para toda la mallla, en cada intervalo de tiempo especificado, y va escribiendo sus cálculos en subcarpetas del caso, para cada intervalo de tiempo. Así, para el caso del codo descrito en este trabajo, se seleccionaron 500 intervalos de tiempo entre *0seg* y *25seg*, y se especificó que se escribieran estos resultados cada 50 intervalos, de forma que se fueron escribiendo subcarpetas con los mismos archivos de *0* pero con los resultados de esas variables para los tiempos: 0,025, 0,05, 0,075, etc.

Una vez termina los cálculos garantizada la convergencia de los resultados, se emplea un nuevo comando en el terminal que invoca al software ParaView, el cual tiene una estructura típica de los visualizadores de postprocesos en elementos finitos (ver figura **A-2**)

A.2. Gmsh

Gmsh es un generador de malllas en 3D para elementos finitos creado en una plataforma CAD (Computer Aided Design), el cual permite un diseño ágil y amigable de geometrias y malllas para análisis numéricos de este tipo. Gmsh además cuenta con un post-procesador que permite visualizar el comportamiento de diferentes variables de la modelación.

Creado por Christophe Geuzaine y Jean-François Remacle, es de libre distribución bajo los términos de la licencia GNU. Está disponible para sistemas operativos Linux, Windows y Mac.

El software cuenta con cuatro módulos: geometry, mesh, solver y post-processing. Cada uno de ellos cuenta con opciones interactivas que mediante la interfaz gráfica que posee, lo hace de fácil acceso para quien no este acostumbrado a la programación (ver figura **A-3**), aunque también ofrece la opción de edición mediante archivos de texto en formato ASCII con el lenguaje propio de programación de Gmsh. Gmsh, tiene la ventaja, que es uno de los formatos de los que OpenFOAM importa las malllas para convertirlas a su formato propio mediante comandos directos que crean los archivos de soporte que se guardan en la carpeta *PolyMesh* como se explicó anteriormente. Esta bondad junto con la facilidad de desarrollo de diferentes

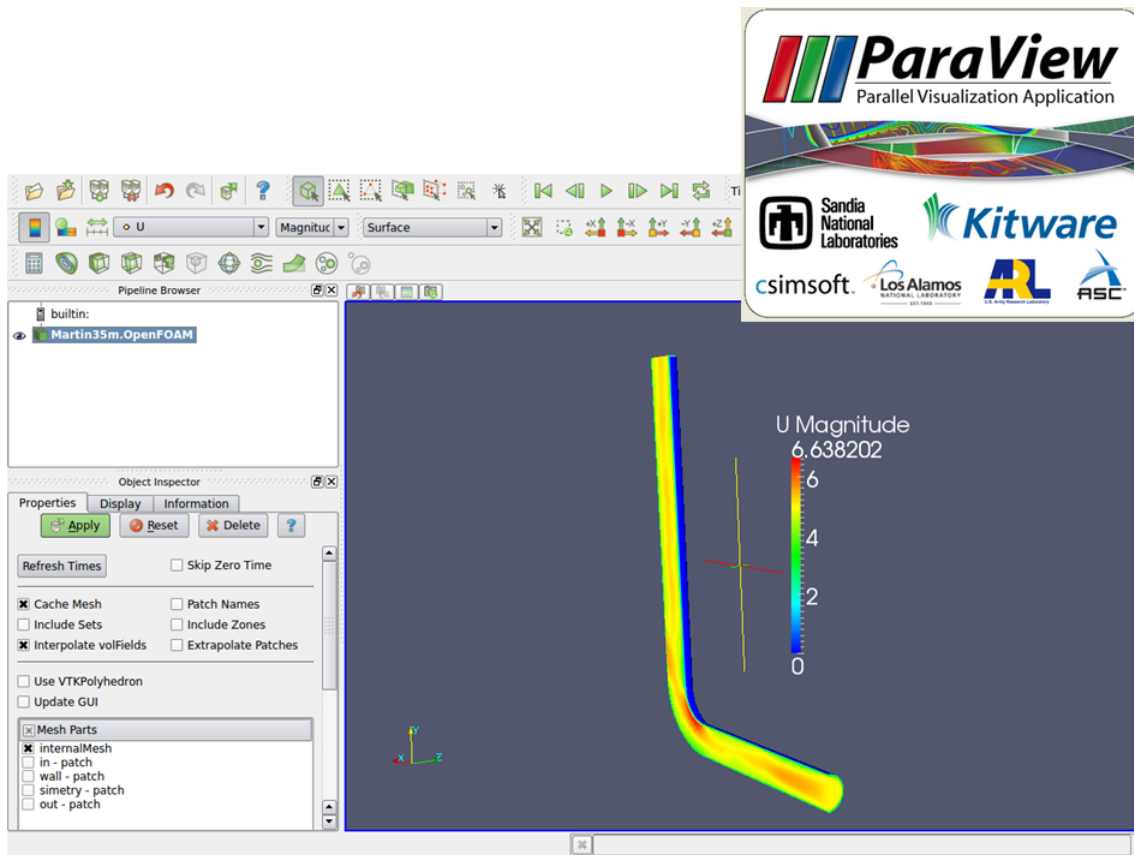


Figura A-2.: Esquema de ventana del visualizador de OpenFOAM ParaView

geometrías hicieron que Gmsh, se seleccionara para la creación de las mallas usadas en este trabajo.

A pesar de esto, el programa aún tiene algunas falencias para geometrías de mayor complejidad, como la ausencia de operaciones booleanas entre los elementos que se crean y que en ocasiones pueden ser útiles dependiendo el problema que se considere. En el mismo sentido, el programa es aún inestable cuando se tienen mallas con grandes números de elementos; algunas funciones hacen que el programa se cierre o se tarde en el procesamiento de las órdenes dado el gran número de ajustes *CAD* que realiza.

A.3. Discretizer

Dentro de la cualidad propia de OpenFOAM, de ser a código abierto, es de gran interés la generación de interfaces gráficas que incluyan las diferentes cualidades del programa. Este es el caso de Discretizer.

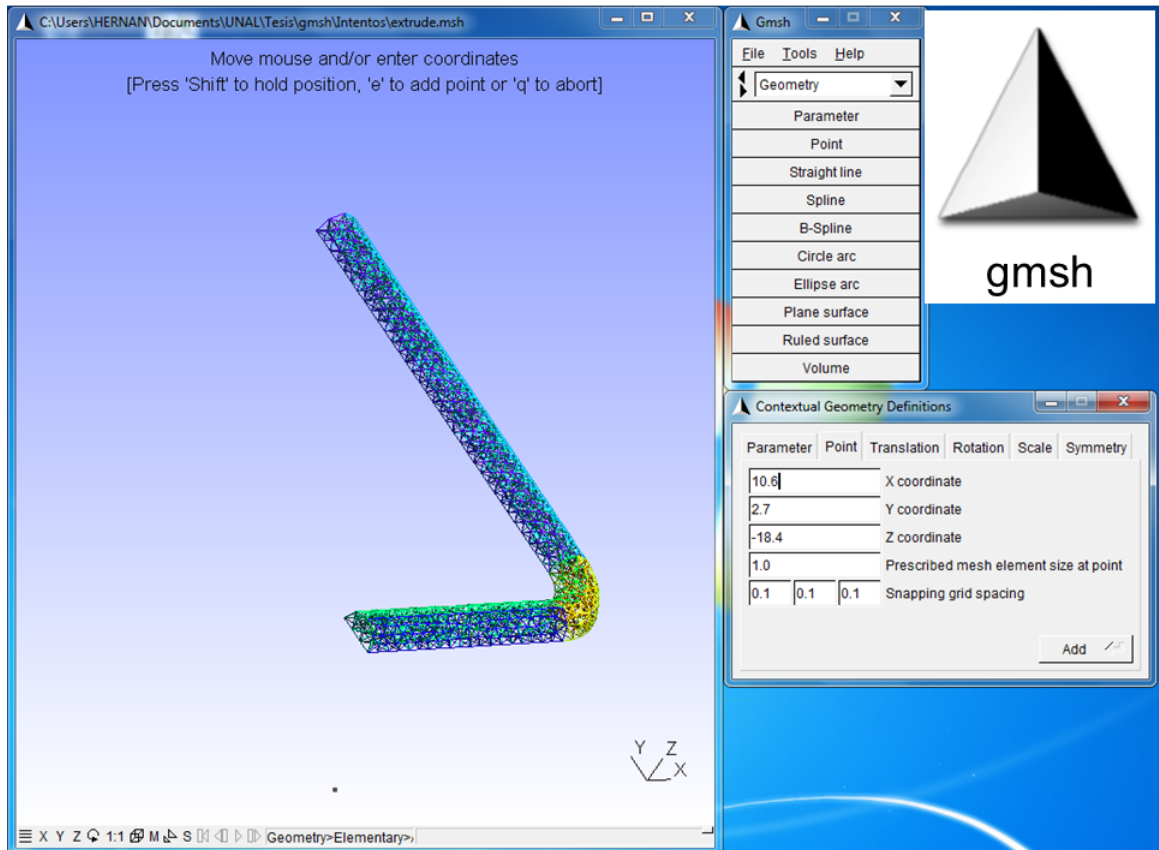


Figura A-3.: Interfaz de Gmsh

Discretizer es una interfaz gráfica creada para operar los casos de OpenFOAM, de forma que el usuario no recurra a los códigos escritos en C++ propios del programa. En este sentido, Discretizer es una herramienta también de libre distribución, creada por Bjorn Bergqvist también para Linux de forma que pueda interactuar con las opciones de OpenFOAM.

La interfaz cuenta con menús, botones y opciones (ver figura A-4) que crean por si mismos las carpetas y archivos característicos de cada caso de OpenFOAM (ver figura A-1), al tiempo que permite correr los casos y post-procesarlos con ParaView sin necesidad de hacer el proceso desde el terminal, que es típico de OpenFOAM.

Las limitaciones que tiene Discretizer se enfocan en el número de casos que ejecutan de OpenFOAM, dado que actualmente no cuenta con todo el arsenal de solucionadores que este tiene, aunque si tiene los más usuales. Uno de los cuidados que debe tenerse al emplear Discretizer hace referencia a la definición de las condiciones de contorno, ya que como se recalcó durante todo el documento, la definición correcta de cada una de estas lleva a la convergencia o no de la solución. Entonces, cuando se definen estas condiciones en Discretizer,

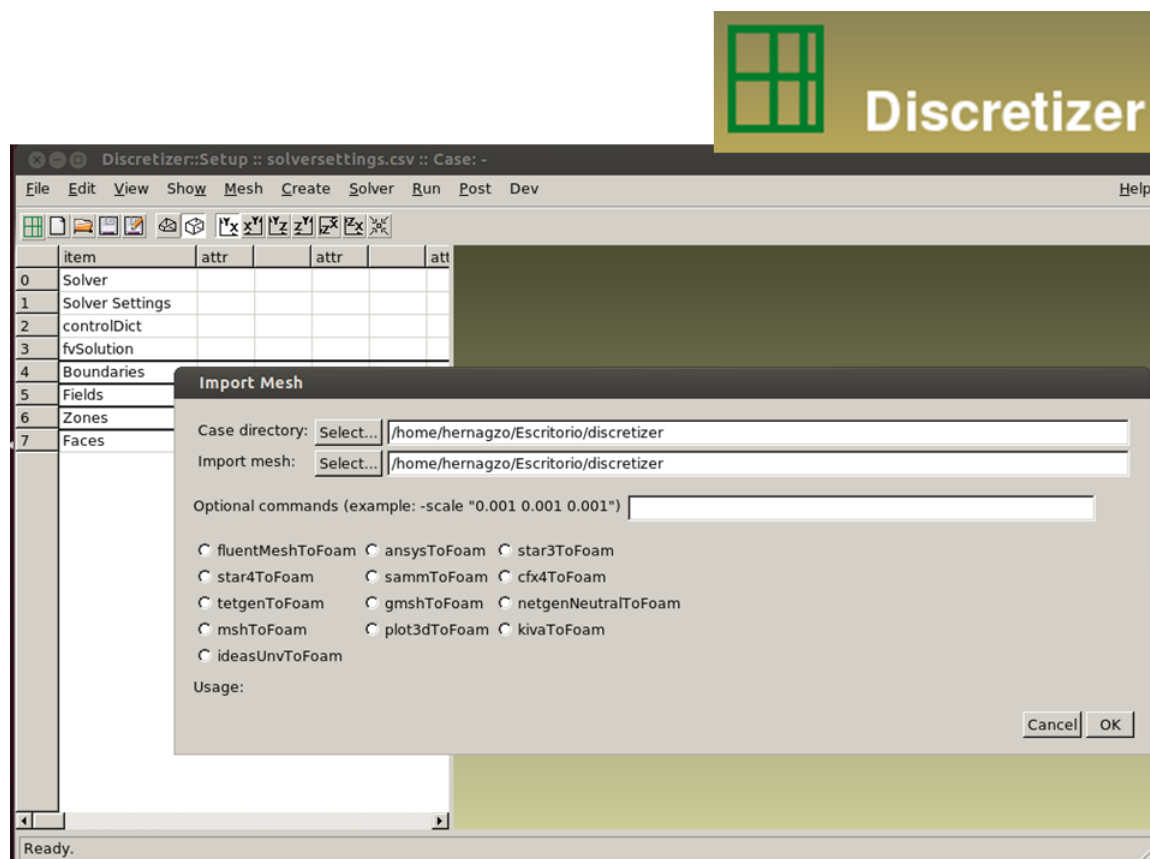


Figura A-4.: Interfaz de Discretizer

existe la posibilidad de visualizar el código C++ que se está escribiendo, actividad que debe tenerse muy en cuenta para verificar que cada uno de los módulos que contiene la carpeta *0* (ver figura A-1) tengan valores apropiados.

Bibliografía

- [1] *Discretizer: A Guide to the mesh program Discretizer with OpenFOAM for CFD*
- [2] *OpenFOAM, The Open Source CFD Toolbox. User guide*
- [3] ANDERSSON, U. ; WESTIN, J. ; ERIKSSON, J.: Thermal mixing in a T-Junction. En: *Vattenfall Research and Development* (2006)
- [4] CHEN, Xianghui ; MCLAURY, Brenton S. ; SHIRAZI, Siamack A.: Application and experimental validation of a computational fluid dynamics (CFD)- based erosion prediction model in elbows and plugged tees. En: *Computers and Fluids* (2004)
- [5] CHOI, H. ; MOIN, P.: Grid-point requirements for Large Eddy Simulation: Chapman's estimates revised. En: *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (2011)
- [6] CHUNG, T. J.: *Computational Fluid Dynamics*. New York USA : Cambridge University Press, 2002
- [7] EESA, Muhammad: *CFD Studies of Complex Fluid Flows in Pipes*, University of Birmingham, Tesis de Doctorado, 2009
- [8] FRANK, Th. ; LIFANTE, C. ; PRASSER, H.-M ; MENTER, F.: Simulation of turbulent and thermal mixing in T-junctions using URANS and scale -resolving turbulence models in ANSYS CFX. En: *Nuclear Engineering and Design* (2010)
- [9] GEUZAIN, C. ; REMACLE, J. F.: Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with build-in pre- and post-procesing facilities. En: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* (2009)
- [10] HOMICZ, Gregory F.: *Computational Fluid Dynamic Simulations of Pipe Elbow Flow*. Springfield, VA USA : Sandia National Laboratories, 2004
- [11] JASAK, Hrvoje: *Error Analysis and estimation for the finite Volume Method with applications to Fluid Flows*, Imperial College of Science London, Tesis de Doctorado, 1996
- [12] JURETIC, Franjo: *Error Analysis in Finite Volume CFD*, University of London and Imperial College London, Tesis de Doctorado, 2004

- [13] KUCZAJ, A.K. ; KOMEN, E.M.J.: Large-Eddy Simulation study of turbulent mixing in a T-junction. En: *Computational Fluid Dynamics, Safety and Performance* (2010)
- [14] KUCZAJ, A.K. ; KOMEN, E.M.J. ; LOGINOV, M.S.: Large-Eddy Simulation of turbulent mixing in a T-junction. En: *Nuclear Engineering and Design* (2010)
- [15] LIBBY, Paul A.: *Introduction to Turbulence*. Washington USA : Taylor and Francis, 1996
- [16] LIEVANO, Adrian: *Programa de modelación de flujo incompresible en tuberías en regímenes Laminar y Turbulento en 2-D*, Universidad Nacional de Colombia, Tesis de Pregrado, 2003
- [17] MARTIN, Keith ; CIMBALA, John M.: *Pointwise to OpenFOAM Tutorial - Minor Losses through a Pipe Elbow*. Pennsylvania, USA : Penn State University, 2011
- [18] MARTÍN, E. ; MEIS, M. ; VARAS, F.: *Introducción a OpenFOAM*. Madrid, España : Universidad Politécnica de Madrid, 2009
- [19] MITIDIERI, Petra B.: *Advanced Modelling of Elastohydrodynamic Lubrication*, Imperial College London, Tesis de Doctorado, 2005
- [20] NDOMBO, Jean-Marc ; HOWARD, Richard J.: Large Eddy Simulation and the effect of the turbulent inlet conditions in the mixing Tee. En: *Nuclear Engineering and Design* (2011)
- [21] PISARENCO, Maxim: *Friction Factor Estimation for Turbulent Flows in corrugated Pipes with Rough Walls*. Eindhoven, Países Bajos : Technische Universiteit Eindhoven. Department of Mathematics and Computer Science, 2007
- [22] RIVOLA, Vicent: *Comparative Study of the CFD codes Mistral and OpenFOAM: Application to fluid - structure interaction*, Hôtel d' Enterprises - Parc Technologique Cap Delta, Tesis de Maestría, 2007
- [23] TANNEHILL, John C. ; ANDERSON, Dale A. ; PLETCHER, Richard H.: *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Philadelphia USA : Taylor and Francis, 1997
- [24] TU, Jiyuan ; HENG YEOH, Guan ; LIU, Chaoqun: *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach*. Burlington USA : Butterworth-Heinemann, 2008
- [25] ZIKANOV, Oleg: *Essential Computational Fluid Dynamics*. New Jersey USA : John Wiley and Sons, Inc., 2010