

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ

FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA



**DESARROLLO DE MODELOS DE TURBULENCIA LES UTILIZADOS
EN SIMULACIONES NUMÉRICAS DE FLUJOS TURBULENTOS
COMPLEJOS PRESENTES EN LA INDUSTRIA MINERA**

Tesis para obtener el título profesional de Ingeniero Mecánico

AUTOR

Jhon David Córdova Acuña

ASESOR:

Dr. César Celis Pérez

Lima, Junio, 2022

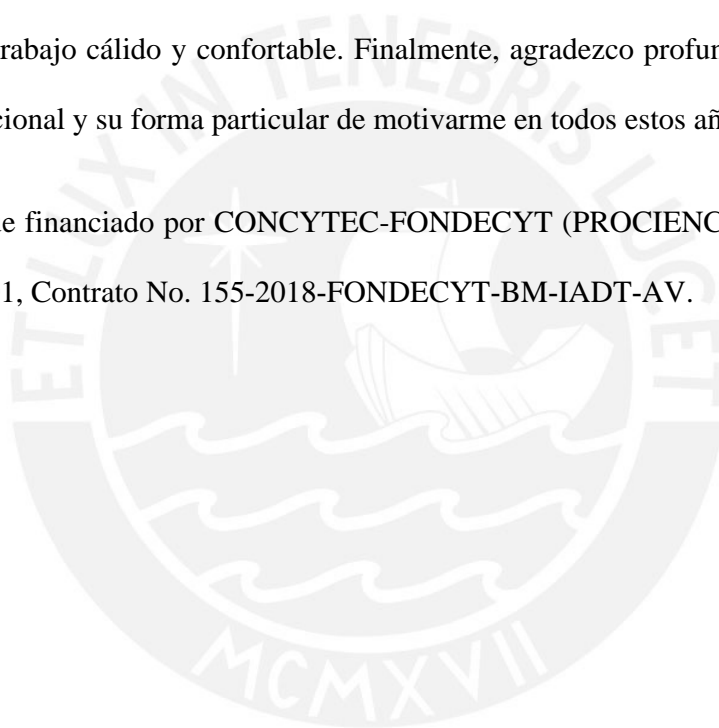
RESUMEN

En el Perú, la minería es una actividad extractiva que permite mantener la estabilidad económica del país. En la actualidad, aproximadamente, un tercio del consumo eléctrico nacional proviene del sector minero, el cual es mayoritariamente utilizado para el transporte y molienda de pulpas minerales en plantas concentradoras de mineral. Por lo tanto, la minería como actividad económica demanda una gran cantidad de recursos energéticos, cuya generación origina impactos negativos en la salud y el medio ambiente. Así, la determinación de condiciones operativas de plantas de concentración que permitan reducir el consumo de energía asociado es de particular interés para la industria. En la práctica, el transporte y molienda de pulpas minerales involucra flujos turbulentos de fluidos no-Newtonianos. Por lo tanto, simulaciones numéricas de estos flujos complejos deben ser capaces de describir adecuadamente el fenómeno de la turbulencia. El presente trabajo tiene como objetivo desarrollar modelos de turbulencia tipo LES (simulación de grandes escalas) para estos flujos complejos, considerando el comportamiento reológico de las pulpas minerales. En consecuencia, a fin de describir adecuadamente el modelamiento numérico de estos flujos de interés vía LES, trabajos anteriores involucrando flujos de fluidos no-Newtonianos son inicialmente revisados. Luego, los modelos de turbulencia LES son implementados en una herramienta computacional (CFLOWSS) actualmente en desarrollo. Con los modelos implementados, resultados de flujos turbulentos Newtonianos obtenidos en una configuración clásica de placas planas son primero comparados con otros disponibles en la literatura. Finalmente, para evaluar el efecto de la reología sobre las características turbulentas del flujo, flujos turbulentos no-Newtonianos como aquellos caracterizando el transporte de pulpas minerales son numéricamente simulados.

AGRADECIMIENTOS

La realización de esta tesis no hubiera sido posible sin el apoyo de individuos increíbles. Primero, me gustaría expresar mi más sincera gratitud a mi asesor el Dr. César Celis por su paciencia, guía y motivación brindada en cada capítulo de esta tesis. Sobre todo, en aquellos momentos en que las cosas no salieron como esperábamos. Extiendo esta gratitud al Dr. Danmer Maza por las clases otorgadas de elementos finitos y su guía a la distancia. Agradezco a mis compañeros del grupo de investigación FPCE por los momentos compartidos y las enseñanzas brindadas. Pero en especial por hacer de la oficina un lugar de trabajo cálido y confortable. Finalmente, agradezco profundamente a mi familia por su amor incondicional y su forma particular de motivarme en todos estos años.

Este trabajo fue financiado por CONCYTEC-FONDECYT (PROCIENCIA) en el marco de la convocatoria E041-01, Contrato No. 155-2018-FONDECYT-BM-IADT-AV.



DEDICATORIA



A mi madre Patricia por su amor, apoyo y comprensión estadísticamente estacionarios.

TABLA DE CONTENIDOS

Resumen	i
Agradecimientos	ii
Dedicatoria	iii
Tabla de contenidos	iv
Índice de Figuras	vi
Índice de Tablas	viii
Notaciones	ix
Abreviaturas	xi
Introducción	1
CAPÍTULO 1 - REVISIÓN DE LA LITERATURA	7
1.1 Modelamiento DNS no-Newtoniano	7
1.2 Modelamiento LES no-Newtoniano	9
CAPÍTULO 2 - MODELO MATEMÁTICO	12
2.1 Ecuaciones gobernantes	12
2.2 Modelamiento reológico	13
2.3 Modelamiento de la turbulencia	14
2.3.1 Modelamiento del tensor de esfuerzos viscosos	15
2.3.2 Modelamiento del tensor de esfuerzos sub-malla	17
2.3.3 Modelos sub-malla	18
CAPÍTULO 3 - MODELO NUMÉRICO	21
3.1 Herramienta computacional	21
3.2 Configuración geométrica	22
3.3 Condiciones de contorno	23
3.4 Condiciones iniciales	24
3.4.1 Generación de turbulencia sintética	26
3.5 Generación de malla	27
3.6 Estrategia de simulación	28
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS Y DISCUSIÓN	30
4.1 Verificación de herramienta computacional	30
4.1.1 Flujos laminares en 2D	31
4.1.2 Flujos laminares en 3D	31
4.2 Resultados cualitativos	32
4.2.1 Campos instantáneos	33
4.2.2 Campos medios	36

4.3 Resultados cuantitativos	40
4.3.1 Perfil de velocidades	41
4.3.2 Tensores de Reynolds	43
4.3.3 Energía cinética turbulenta	47
Conclusiones	viii
Referencia Bibliográfica	x
Apéndices	xiv
Apéndice A: Lista de publicaciones	xiv
Apéndice B: Filtraje LES de las ecuaciones gobernantes	xv
Apéndice C: Aplicación de la hipótesis de Boussinesq en un enfoque LES	xix



ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Perfil de velocidad normalizado para tres fluidos Power-law con un $Re_b = 5500$ [18].	8
Figura 2. Perfil de los tensores T_{12} (líneas discontinuas con puntos) y de Reynolds σ_{12} (líneas continuas) [23].	9
Figura 3. Perfiles de velocidades normalizados utilizando (A) el modelo dinámico de Smagorinsky [23] y (B) mallas progresivamente más refinadas [16].	10
Figura 4. Aspectos geométricos del dominio computacional	22
Figura 5. Ubicación de las condiciones de contorno de periodicidad: Streamwise (E-F) y Spanwise (C-D).	23
Figura 6. Malla computacional (estructurada, Cartesiana) usada en las simulaciones numéricas.	28
Figura 7. Perfiles de velocidad correspondientes a flujos laminares (A) Newtonianos y (B) no-Newtonianos en la configuración de channel flow 2D [49].	31
Figura 8. Perfiles de velocidad correspondiente a flujos laminares (A) Newtoniano y (B) no-Newtoniano en la configuración de channel flow 3D [53].	32
Figura 9. Campos instantáneos de velocidad en el eje X obtenidos con el modelo: (A) Smagorinsky, (B) Wale y (C) Vreman en la primera etapa.	34
Figura 10. Iso-superficies instantáneas de $Q=0.01$ coloreados por la velocidad en el eje X obtenidos con el modelo: (A) Smagorinsky, (B) Wale y (C) Vreman en la primera etapa.	34
Figura 11. Iso-superficies de $Q=0.01$ instantaneos coloreados por la vorticidad en la dirección del streamwise ω_x obtenidos con el modelo: (A) Smagorinsky y (B) Wale. Los colores azul y rojo son utilizados para valores de $\omega_x > 0$ y $\omega_x < 0$, respectivamente.	35
Figura 12. Iso-superficies instantaneos de $Q=0.01$ coloreados por la vorticidad en la dirección del streamwise ω_x utilizando el modelo de Smagorinsky en un flujo: (A) Newtoniano y (B) no-Newtoniano Power-law. Los colores azul y rojo son utilizados para valores de $\omega_x > 0$ y $\omega_x < 0$, respectivamente.	36
Figura 13. Campo medio de velocidades normalizado en la dirección del streamwise correspondiente a un fluido Newtoniano con el modelo: (A) Smagorinsky y (B) Wale, y no-Newtoniano con el modelo Smagorinsky (C).	37
Figura 14. Campo medio de viscosidad turbulenta correspondiente a un fluido Newtoniano con el modelo: (A) Smagorinsky y (B) Wale, y no-Newtoniano con el modelo Smagorinsky (C).	38
Figura 15. Campo medio de viscosidad molecular correspondiente a un fluido: (A) Newtoniano con ambos modelos de turbulencia y (B) no-Newtoniano con el modelo de Smagorinsky.	39
Figura 16. Campo medio de Shear Rate correspondiente a un fluido Newtoniano con el modelo: (A) Smagorinsky y (B) Wale, y no-Newtoniano con el modelo Smagorinsky (C).	40
Figura 17. Perfil de velocidades medios en el streamwise de un fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.	42
Figura 18. Perfil de velocidades medios en el spanwise (Izquierda) y en la dirección perpendicular a la pared (Derecha) del fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.	43

Figura 19. Componentes normales del tensor de Reynolds resuelto del fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.	45
Figura 20. Componentes cortantes del tensor de Reynolds resuelto del fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.	46
Figura 21. Energía cinética turbulenta resuelta del fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.	48



ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Parámetros geométricos.	23
Tabla 2. Resumen de condiciones de contorno.	24
Tabla 3. Números de Reynolds basado en la velocidad media (Re_b) y la velocidad de fricción (Re_τ) para un mismo flujo turbulento [41].	25
Tabla 4. Parámetros adicionales del fluido Newtoniano.	26
Tabla 5. Parámetros adicionales del fluido Power-law.	26
Tabla 6. Parámetros adicionales del fluido Carreau-Yasuda.	26
Tabla 7. Parámetros considerados en el generador de turbulencia sintético RFG.	27
Tabla 8. Resumen de condiciones de contorno para la condición inicial.	27
Tabla 9. Parámetros temporales considerados según la etapa de la simulación.	29



NOTACIONES

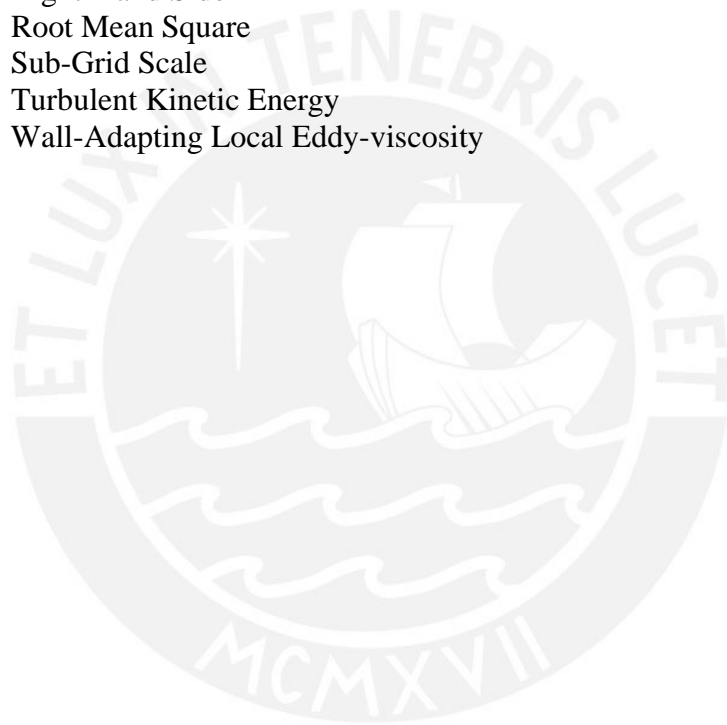
Simbolo	Definición
C_S	Constante de Smagorinsky
C_W	Constante de Wale
ρ	Densidad del fluido
S_{ij}^d	Deviatoria de la tasa de deformación
z^+	Distancia a la pared normalizada
Δx_{min}	Distancia mínima entre los nodos de un elemento
Ω	Dominio genérico
χ_n	Enésima función base de presión
ψ_n	Enésima función base de velocidad
$\langle f(x, t) \rangle_L$	Filtro de Favre de la función f
$\langle f(x, t) \rangle_l$	Filtro de la función f
δ_{ij}	Función delta Kronecker
K, n	Índices del modelo Power-law
Re_b	Número de Reynolds convencional
Re_τ	Número de Reynolds de pared
$\mu_\infty, \mu_0, \lambda, n, a$	Parámetros del modelo Carreau-Yasuda
L, W, H, δ	Parámetros geométricos del channel flow
Δt	Paso de tiempo
x_i	Posición en la dirección i
p	Presión mecánica
P	Presión modificada
R_{mi}^n	Residuo asociado a la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento para n funciones bases de velocidad en la dirección i
R_c^n	Residuo asociado a la ecuación de conservación de la masa para n funciones bases de presión
Γ	Superficie genérica
Δ	Tamaño del filtro
$\dot{\gamma}_{ij}$	Tasa de corte
S_{ij}	Tasa de deformación
τ_w	Tensor de esfuerzos cortantes en la pared
τ_{ij}^{SGS}	Tensor de esfuerzos de Reynolds modelado
σ_{ij}	Tensor de esfuerzos de Reynolds resuelto
T_{ij}, τ_{ij}	Tensor de esfuerzos viscosos
t	Tiempo
t_{FT}	Tiempo de flow-through

τ_{kk}^{SGS}	Trasa del tensor de esfuerzos de Reynolds modelado
u_τ	Velocidad de fricción
U_b	Velocidad en el centro geométrico del channel flow
u_i	Velocidad en la dirección i
ν	Viscosidad cinemática
η	Viscosidad dinámica aparente del fluido
μ_{SGS}	Viscosidad turbulenta



ABREVIATURAS

CFLOWSS	Complex Flows Solver
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
DNS	Direct Numerical Simulation
FEM	Finite element Method
LES	Large Eddy Simulation
LHS	Left-Hand Side
NRMSE	Normalized Root Mean Square Error
RFG	Random Flow Generator
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RHS	Right-Hand Side
RMS	Root Mean Square
SGS	Sub-Grid Scale
TKE	Turbulent Kinetic Energy
WALE	Wall-Adapting Local Eddy-viscosity



INTRODUCCIÓN

A lo largo de la historia, para su desarrollo, la civilización ha aprendido a utilizar los minerales como materia prima. Actualmente existe un consumo creciente de minerales que está permitiendo mantener el estilo de vida de la civilización y contribuir al desarrollo económico de países emergentes [1]. Sin embargo, a pesar de que los minerales son esenciales en la sociedad moderna, su producción involucra impactos negativos sobre la salud y el medio ambiente. Uno de los factores responsables por estos impactos negativos es el elevado consumo de recursos energéticos [2], cuya reducción es impulsada no solamente por motivos económicos sino por un interés público en los cambios climáticos, emisión de gases de efecto invernadero, y huella de carbono [3]. El Perú es uno de principales productores de minerales metálicos a nivel mundial [1]. Adicionalmente, en el año 2019, el sector minero representó cerca del 30% del consumo eléctrico nacional peruano [4]. Esto ha ocasionado una constante búsqueda de avances tecnológicos que permitan reducir el consumo intensivo de energía en este sector.

En la producción de minerales, grandes rocas de materia prima son inicialmente extraídas de una mina y luego trasladadas a plantas concentradoras para ser sometidas a una serie de procesos que incluyen reducción de tamaño, separación y flotación, hasta obtener el mineral de interés. El transporte y molienda de pulpas minerales son procesos vitales y frecuentes en plantas concentradoras modernas [3]. El transporte, en particular, no solamente es importante porque permite trasladar partículas minerales de manera económica y con menor generación de polvos, sino porque ocurre en procesos cruciales como la molienda y la flotación. La molienda generalmente involucra flujos complejos de pulpa mineral y representa el mayor gasto energético de la planta [5]. En este trabajo, las pulpas minerales son consideradas como mezclas homogéneas de partículas de roca molida y líquidos [6]. Las características físicas de estas mezclas dependen

de varios factores tales como el tamaño y la distribución de partículas, la concentración de sólidos en la fase líquida, el nivel de turbulencia, la temperatura y la viscosidad del fluido de transporte [7]. Aunque se pueden utilizar técnicas experimentales o numéricas para estudiar el efecto de estos factores en el transporte de pulpas minerales, realizar ensayos experimentales en el laboratorio suele ser más caro que la realización de simulaciones numéricas. Además, el rápido incremento de la capacidad computacional permite actualmente realizar simulaciones numéricas cada vez más realistas y sofisticadas.

El transporte de pulpas minerales es un flujo complejo que generalmente involucra mezclas bifásicas, incluyendo una fase líquida (continua) y partículas sólidas [6]. Dependiendo de la concentración de partículas en esta, las pulpas minerales pueden presentar un comportamiento reológico no-Newtoniano [7]. En la práctica, los flujos de pulpa mineral son usualmente turbulentos [8]. Por lo tanto, para describir adecuadamente la física involucrada en el transporte de pulpas minerales, el modelamiento numérico de estos procesos debe considerar no solamente la interacción entre dos fases distintas, sino también la reología no-newtoniana del medio continuo y la turbulencia asociada. Existen varios métodos numéricos que pueden ser utilizados para resolver las ecuaciones gobernantes de estos flujos complejos, incluido el método de elementos finitos (FEM) [9] que es caracterizado por resolver de manera robusta estas ecuaciones [10],[11].

En el pasado, diversos esfuerzos han sido realizados para analizar la turbulencia en fluidos no-Newtonianos. En donde, el uso de modelos reológicos ha permitido expandir la teoría de la turbulencia a fluidos que describen un comportamiento no-Newtoniano. La mayoría de los estudios fueron realizados utilizando la técnica de Navier-Stokes promediado de Reynolds (RANS) y un modelo k-epsilon modificado, entre ellos destacan los trabajos de Malin [12], Cruz & Pinho [13], y Kyoungchul & Hongsun [14]. Sin embargo, al modelar toda la turbulencia, esta técnica no

describe detalladamente el fenómeno turbulento como en la simulación numérica directa (DNS) [15]. Múltiples resultados DNS de fluidos no-Newtonianos fueron presentados en los trabajos de Rudman et al [16],[17],[18] y Gavrilov & Rudyak [19] que sirven como base de referencia para otras simulaciones numéricas. No obstante, debido al elevado costo computacional, la aplicación de la técnica DNS es limitada a flujos turbulentos de bajo número de Reynolds y geometrías simples [20]. En los últimos años, el estudio de flujos turbulentos de fluidos no-Newtonianos ha prestado mayor atención a la simulación de grandes escalas (LES). Molla & Paul [21] evaluaron diferentes modelos reológicos para describir la turbulencia en fluidos no-Newtonianos con el modelo dinámico de Smagorinsky. De manera similar, Gnambode et al [15] y Joubary et al [20] examinaron el efecto de la reología no-Newtoniana en flujos turbulentos utilizando el modelo dinámico de Germano y Wale, respectivamente. Por otro lado, Ohta & Miyashita [22], así como Inagaki [23], propusieron una modificación al modelo de turbulencia que utilizaron para analizar flujos turbulentos de fluidos no-Newtonianos. El presente trabajo está direccionado al desarrollo de modelos turbulentos tipo LES teniendo en consideración el comportamiento reológico no-Newtoniano a fin de poder describir adecuadamente los flujos de pulpa mineral.

Objetivo General

- Desarrollar modelos de turbulencia LES utilizados en simulaciones numéricas de flujos turbulentos complejos presentes en la industria minera.

Objetivos Específicos

- Determinar el estado del arte relativo al modelamiento numérico de flujos turbulentos complejos.
- Formular matemáticamente modelos de turbulencia LES usados para caracterizar flujos turbulentos complejos.

- Implementar en una herramienta computacional los modelos de turbulencia formulados previamente.
- Verificar los modelos de turbulencia implementados considerando flujos complejos como los encontrados en la industria minera.

Metodología

El trabajo, cuyos resultados son resumidos en este documento, ha sido realizado en 4 etapas, tal como descrito a continuación.

- Determinación del estado del arte:

En esta primera etapa, la revisión bibliográfica de flujos turbulentos complejos como la pulpa mineral fue cubierta en su mayoría. Además, la familiarización con los fundamentos básicos de la dinámica de fluidos computacionales (CFD), lenguajes de programación y el método de los elementos finitos (FEM) fueron cubiertos para el desarrollo de los modelos computacionales en este trabajo.

- Formulación de modelos de turbulencia LES:

A fin de modelar flujos turbulentos, las ecuaciones gobernantes de los flujos de pulpa mineral utilizados en la herramienta computacional CFLOWSS fueron tratadas bajo el enfoque de la Simulación de las grandes escalas (LES). De esta manera, los modelos turbulentos fueron matemáticamente descritos teniendo en consideración el método de discretización usado en el módulo FEM de la herramienta CFLOWSS. Adicionalmente, el comportamiento reológico complejo que describe a los flujos de interés en esta tesis es desarrollado en esta segunda etapa.

- Implementación de modelos de turbulencia LES.

Para desarrollar los modelos turbulentos en la herramienta computacional CFLOWSS, la familiarización con este entorno de trabajo, desarrollado en el lenguaje de programación C++, fue necesario. Por ello, la estructura de trabajo de esta herramienta fue inicialmente analizada. Luego, conceptos básicos de paralelismo y de la programación orientada a objetos fue estudiada a fin de reutilizar los métodos desarrollados y procesar información durante la ejecución del código. Por último, los modelos de turbulencia son desarrollados acorde al método de los elementos finitos implementado en la herramienta computacional.

- Verificación de modelos de turbulencia LES.

En esta última etapa, simulaciones numéricas de flujos turbulentos fueron realizadas en la herramienta CFLOWSS para verificar la funcionalidad de los modelos desarrollados. En donde, la configuración clásica de placas planas paralelas o *channel flow* es considerada. Además, resultados numéricos y/o experimentales disponibles en la literatura son utilizados como punto de referencia. Por motivos de la complejidad involucrada, los resultados Newtonianos son primero evaluados y luego aquellos no-Newtonianos.

Alcance

En este trabajo, el modelamiento de la turbulencia en los flujos complejos de pulpa mineral es realizado en el módulo FEM de la herramienta computacional CFLOWSS (Complex Flows Solver) en desarrollado en la PUCP. Estos flujos son analizados considerando únicamente las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento lineal. Además, el efecto de la temperatura sobre el flujo no ha sido considerado en el análisis. Asimismo, los flujos de pulpa mineral han sido tratados como una mezcla homogénea en el que las partículas sólidas se

encuentran completamente suspendidas en el medio líquido. En otras palabras, la interacción entre partículas sólidas y líquido no es considerada más allá de la consideración de un comportamiento no-Newtoniano en la mezcla.

Esquema

El trabajo realizado es resumido en 04 capítulos principales. En el Capítulo 1, la revisión de la literatura relacionada con el estado del arte relativo al modelamiento numérico de flujos turbulentos complejos similares a los de la industria minera es presentada. El enfoque matemático utilizado en el modelamiento de la turbulencia presente en este tipo de fluidos complejos es descrito en el Capítulo 2, con un énfasis particular en las ecuaciones gobernantes. El Capítulo 3 provee las principales consideraciones numéricas de los flujos turbulentos estudiados aquí, i.e., mallas computacionales, aspectos geométricos, condiciones iniciales y de contorno. Finalmente, en el Capítulo 4, los principales resultados obtenidos en este trabajo son discutidos y comparados con otros disponibles en la literatura.

CAPÍTULO 1 - REVISIÓN DE LA LITERATURA

A pesar de que los fluidos no-Newtonianos son ampliamente usados en la industria, el estudio de la turbulencia en flujos involucrando estos fluidos aún es un campo en desarrollo. Por ello, el primer capítulo de este trabajo provee una breve descripción de los principales esfuerzos realizados en el modelamiento de flujos turbulentos no-Newtonianos. Note que, en la mayoría de los trabajos realizados en esta área, para representar la reología no-Newtoniana, modelos Newtonianos generalizados, i.e., uso de viscosidad aparente no lineal que depende únicamente de la tasa de corte, han sido utilizados. Por esta razón, trabajos anteriores en turbulencia y fluidos Newtonianos generalizados son abordados en este capítulo.

1.1 Modelamiento DNS no-Newtoniano

Una gran parte de los estudios hechos en el campo de la turbulencia involucrando fluidos Newtonianos generalizados han sido realizados en base a simulaciones numéricas directas (DNS). Estos estudios han otorgado al cuerpo científico un nuevo horizonte de conocimientos que va desde una descripción detallada de la turbulencia en fluidos no-Newtonianos hasta el tratamiento de los nuevos términos que aparecen en enfoques no-DNS.

Entre los estudios DNS de fluidos Newtonianos generalizados resaltan las contribuciones de Rudman et al. [16],[17],[18] y Arosemena et al. [24],[25], las cuales involucran las configuraciones clásicas de *pipe flow* y *channel flow*, respectivamente. En particular, en [24], los efectos reológicos sobre los flujos turbulentos de fluidos Newtonianos Generalizados son estudiados. En el cual, dos comportamientos distintos son obtenidos según su dependencia con el *shear rate* o tasa de corte, *shear-thickening* y *shear-thinning*. En el primero, la viscosidad y la tasa de corte son directamente proporcionales; mientras que, en el segundo, la proporcionalidad contraria es descrita. En sus resultados, los autores evidencian que los efectos reológicos afectan principalmente a los fluidos

del tipo *shear-thinning* mediante la reducción de estructuras turbulentas, inhibición de la generación de eventos turbulentos y a diferentes características de reducción de arrastre. Por lo que, posteriormente en [25], profundizan el estudio de la turbulencia en fluidos del tipo *shear-thinning*. En la Figura 1, una de las principales consecuencias de la reducción del arrastre es mostrada, el incremento de la velocidad en la dirección principal del flujo o *streamwise*. Aquí n es el índice de comportamiento del fluido y para valores menores a la unidad, representa un fluido del tipo *shear-thinning*.

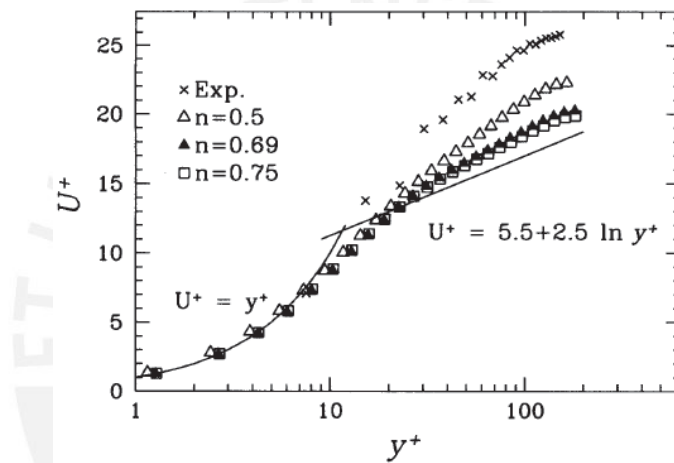


Figura 1. Perfil de velocidad normalizado para tres fluidos Power-law con un $Re_b = 5500$ [17].

Una de las complejidades asociada al uso de abordajes numéricos no-DNS en flujos turbulentos no-Newtonianos es la aparición de nuevos términos en las ecuaciones gobernantes. Sin embargo, a través de trabajos DNS, estos términos pueden ser construidos y la información necesaria para su tratamiento puede ser obtenida. Por lo general, estos términos son aquellos relacionados con los tensores de Reynolds σ_{ij} y de la viscosidad variable T_{ij} . En el trabajo DNS de Ohta et al. [22], los términos adicionales son formados considerando la técnica de simulación de las grandes escalas (LES). En particular, en el referido trabajo, una gráfica (Figura 2) comparando los perfiles de las componentes σ_{12} y T_{12} para un fluido del tipo Newtoniano, Power-law *shear-*

thinning ($n=0.85$) y *Power-law shear-thickening* ($n=1.15$) es proporcionada. Esta gráfica muestra que los valores del tensor T_{ij} son menores que aquellos asociados con el tensor de Reynolds σ_{ij} . El aporte realizado por Ohta et al. [22] ha permitido a los investigadores tener un mayor conocimiento de cómo estos términos adicionales que aparecen en las ecuaciones de transporte cuando fluidos no-Newtonianos son considerados deberían ser tratados.

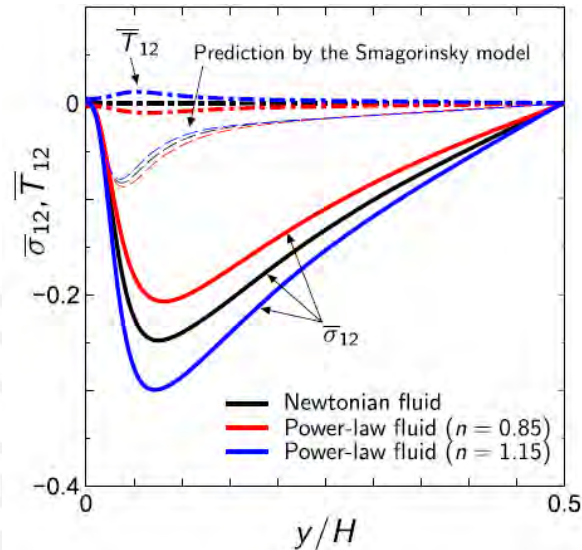


Figura 2. Perfil de los tensores T_{12} (líneas discontinuas con puntos) y de Reynolds σ_{12} (líneas continuas) [22].

1.2 Modelamiento LES no-Newtoniano

Simulaciones numéricas DNS permiten describir adecuadamente la turbulencia en el campo de los fluidos no-Newtonianos. Sin embargo, el uso de esta técnica involucra un excesivo costo computacional. De esta forma, algunos investigadores optan por usar una técnica LES en lugar de una DNS. Note que en abordajes tipo LES una parte de la turbulencia es resuelta y la parte restante modelada. Una limitación asociada al uso de técnicas LES proviene del hecho de que los modelos sub-malla, los cuales son usados para tratar la turbulencia en estos abordajes, fueron desarrollados para flujos de fluidos Newtonianos. Por lo tanto, el modelamiento LES de flujos turbulentos Newtonianos generalizados requiere el tratamiento de los términos adicionales que

surgen en las ecuaciones de transporte, los cuales son producidos por la viscosidad variable T_{ij} y el tensor de Reynolds σ_{ij} .

Para fluidos Newtonianos generalizados, uno de los primeros modelos de turbulencia tipo LES, si no el primero, es el propuesto por Ohta et al. [22]. En el referido modelo, considerando que la formulación tradicional de modelos sub-malla para fluidos Newtonianos no permite describir adecuadamente las estructuras turbulentas de fluidos con una viscosidad variable, una forma extendida del modelo clásico de Smagorinsky es propuesta. Además, los efectos de los términos adicionales T_{ij} son incluidos en el modelo extendido. Cuando comparado con la versión estándar del modelo clásico de Smagorinsky, este nuevo modelo extendido reproduce mejor resultados DNS (Figura 3.A).

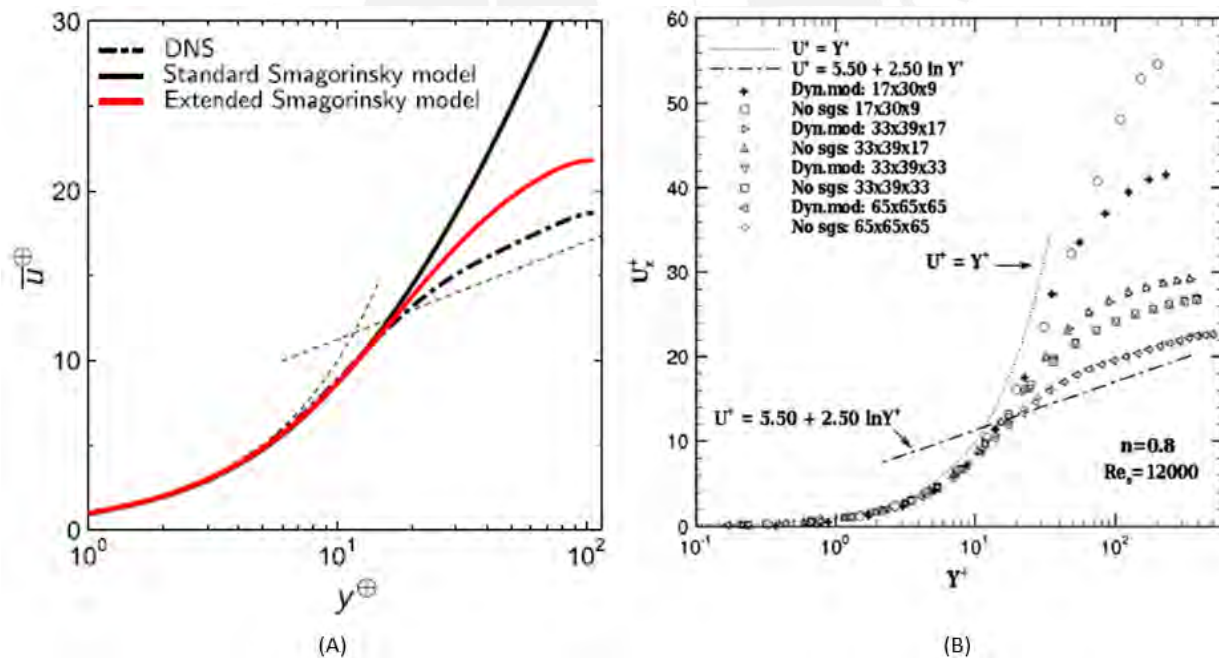


Figura 3. Perfiles de velocidades normalizados utilizando (A) el modelo dinámico de Smagorinsky [22] y (B) mallas progresivamente más refinadas [15].

En otro trabajo anterior, Gnamboide et al. [15] consideran que los efectos del término T_{ij} sobre el flujo turbulento no-Newtoniano son despreciables en comparación a los del tensor σ_{ij} (ver

Figura 2). Por lo tanto, en lugar de extender algún modelo de turbulencia sub-malla, mallas computacionales más refinadas son utilizadas. En las simulaciones numéricas LES realizadas, algunas involucraron el modelo dinámico de Smagorinsky estándar, y otras ningún modelo. Según los resultados asociados (Figura 3.B), tanto las simulaciones con modelo sub-malla como las que no involucraron ningún modelo convergen hacia un mismo perfil de velocidad. Evidentemente, a medida que el refinamiento de la malla aumenta, más escalas turbulentas son resueltas y el modelo de turbulencia sub-malla tiene un menor efecto sobre el flujo turbulento.

Más recientemente, para estudiar el efecto de la concentración de pulpas de eucalipto en flujos turbulentos, Jouybari et al. [20] realizaron simulaciones numéricas LES utilizando el modelo reológico Power-law y el modelo de turbulencia WALE estándar. Estudios similares han sido realizados en el campo de la medicina. Por ejemplo, Molla & Paul [21] y Dey et al. [26] analizaron la situación de una estenosis arterial (estrangulación de la sangre) utilizando diferentes fluidos Newtonianos generalizados con modelos de turbulencia sub-malla en su forma estándar.

CAPÍTULO 2 - MODELO MATEMÁTICO

Las principales características del modelo matemático utilizado en este trabajo para describir flujos de pulpa mineral son resaltadas en este capítulo. Más específicamente, las ecuaciones que gobiernan a estos flujos de interés son inicialmente descritas, con un énfasis particular en los modelos reológicos asociados. Estas ecuaciones y sus modelos reológicos son luego tratados considerando un enfoque de modelamiento de turbulencia basado en LES (*large eddy simulation*). Finalmente, los modelos de sub-malla requeridos en este tipo de abordajes son descritos.

2.1 Ecuaciones gobernantes

En este trabajo, flujos de pulpa mineral son considerados como flujos tridimensionales, transitorios, turbulentos y no-Newtonianos. Es decir, flujos cuyos comportamientos reológicos difieren de aquellos involucrando fluidos Newtonianos. En consecuencia, tal como ocurre en el flujo de fluidos Newtonianos, estos flujos son gobernados por ecuaciones de conservación de masa (1) y cantidad de movimiento (2) [27],[28],[29],

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad i = 1,2,3. \quad (2)$$

Las ecuaciones de transporte (1) y (2) describen variaciones espaciales ($x \equiv x_i$, $i = 1,2,3$) y temporales (t) de la densidad del fluido $\rho \equiv \rho(x, t)$, velocidad $u \equiv u_i(x, t)$ y presión mecánica $p \equiv p(x, t)$. En este caso, a diferencia de lo que ocurre en flujos de fluidos Newtonianos, el tensor de esfuerzos viscosos τ_{ij} no presenta una relación lineal con la tasa de corte $\dot{\gamma}_{ij}$ [30]. En flujos no-Newtonianos como los de la pulpa mineral estudiados aquí, este tensor de esfuerzos viscosos es obtenido de,

$$\tau_{ij} = \eta(\dot{\gamma}_{ij}) \dot{\gamma}_{ij}, \quad (3)$$

$$\dot{\gamma}_{ij} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (4)$$

donde el parámetro $\eta(\dot{\gamma}_{ij})$ en el lado derecho (RHS) de la ecuación (3) depende de la tasa de corte $\dot{\gamma}_{ij}$ y representa la viscosidad aparente del fluido en estudio. En la literatura, existen varios abordajes matemáticos que permiten caracterizar, basados en modificaciones y ajustes en el cálculo de $\eta(\dot{\gamma}_{ij})$, el comportamiento de flujos no-Newtonianos [30].

2.2 Modelamiento reológico

En este trabajo, para calcular la viscosidad aparente η en función de la tasa de corte $\dot{\gamma}_{ij}$, dos modelos reológicos, Power-law y Carreau-Yasuda, son utilizados. El modelo Power-law es un modelo de dos parámetros que representa de manera simplificada la viscosidad aparente de fluidos no-Newtonianos. Este modelo involucra una expresión [30] de la forma,

$$\eta(\dot{\gamma}) = K |\dot{\gamma}_{ij}|^{n-1}; \quad (5)$$

en donde K y n representan, respectivamente, a los índices de consistencia y comportamiento del fluido. Sin embargo, la simplicidad de esta expresión puede no representar adecuadamente el comportamiento del fluido en valores de tasa de corte relativamente bajos y altos [30]. A pesar de esta limitación, el modelo Power-law es utilizado con precaución en aplicaciones involucrando fluidos similares a pulpas minerales.

El modelo Carreau-Yasuda, a su vez, es un modelo de cinco parámetros usado cuando existen grandes desviaciones en el modelo Power-law a tasas de corte altas y bajas [30]. De esta

manera, las propiedades reológicas de flujos de pulpa mineral pueden ser también descritas por el modelo Carreau-Yasuda. En este modelo, la viscosidad aparente es estimada de,

$$\eta(\dot{\gamma}_{ij}) = \mu_{\infty} + (\mu_0 - \mu_{\infty}) \left(1 + (\lambda |\dot{\gamma}_{ij}|)^a\right)^{\frac{n-1}{a}}; \quad (6)$$

donde μ_0 es la viscosidad de tasa de corte cero, μ_{∞} es la viscosidad de tasa corte infinito, λ es el tiempo de relajación del fluido, y a es un parámetro adimensional que describe el ancho de la región de transición entre las zonas de tasa de corte cero y Power-law. Es importante notar que cuando reemplazamos el valor del exponente $n = 1$ en las ecuaciones (5) o (6), los modelos reológicos describen el comportamiento de un fluido Newtoniano. La ecuación (6) también puede representar a un fluido Newtoniano cuando $\lambda = 0$.

2.3 Modelamiento de la turbulencia

En flujos turbulentos, las ecuaciones gobernantes (1) y (2) no suelen ser resueltas directamente. Esto ocurre debido al excesivo costo computacional que involucra resolver todas las escalas temporales y espaciales que caracterizan la turbulencia [27],[32]. Para captar estas escalas en su totalidad, resoluciones de malla computacional extremadamente finas y pasos de tiempo muy pequeños son requeridos. El rápido incremento de la capacidad computacional permite actualmente modelar flujos turbulentos con precisiones cada vez mayores. Tal es el caso de los enfoques basados en la simulación de grandes escalas (LES), los cuales están siendo utilizados últimamente para describir flujos turbulentos complejos. En enfoques LES, las ecuaciones gobernantes del flujo son filtradas usando una operación de filtraje de la forma [27],

$$\langle f(x, t) \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x', t) F(x', x) dx', \quad (7)$$

donde $\langle f(x, t) \rangle_l$ es el valor filtrado de $f(x, t)$, y $F(x', x)$ representa la función de filtro. Además, como los flujos de pulpa mineral pueden involucrar variaciones de densidad [33], el filtro de Favre es introducido en el proceso de filtraje a través de la expresión,

$$\langle f(x, t) \rangle_L = \frac{\langle \rho f(x, t) \rangle_l}{\langle \rho \rangle_l}, \quad (8)$$

en donde $\langle f(x, t) \rangle_L$ es el valor filtrado de Favre de $f(x, t)$. Cuando estos flujos son modelados como flujos incompresibles, la ecuación (8) es reducida a $\langle f(x, t) \rangle_L = \langle f(x, t) \rangle_l$. En consecuencia, la forma filtrada de las ecuaciones que gobiernan a los flujos turbulentos estudiados en este trabajo de tesis son las siguientes,

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle_l}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_j \rangle_L}{\partial x_j} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_i \rangle_L}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L}{\partial x_j} = - \frac{\partial \langle p \rangle_l}{\partial x_i} + \frac{\partial \langle \tau_{ij} \rangle_l}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{SGS}}{\partial x_j}, \quad (10)$$

en donde $\tau_{ij}^{SGS} = \langle \rho \rangle_l \langle u_j u_i \rangle_L - \langle \rho \rangle_l \langle u_j \rangle_L \langle u_i \rangle_L$ representa al tensor de esfuerzos sub-malla (SGS, sub-grid scale), el cual debe ser modelado. La obtención detallada de las ecuaciones de gobierno en su forma LES, ecuaciones (9) y (10), es desarrollada en el Apéndice B.

2.3.1 Modelamiento del tensor de esfuerzos viscosos

Al filtrar las ecuaciones (3) y (4), la forma filtrada del tensor de esfuerzos viscosos, cuyo gradiente aparece en el segundo término del lado derecho de la ecuación (10), es obtenida. Sin embargo, nótese que, al realizar la operación de filtraje en estas dos ecuaciones, y debido al comportamiento no lineal que tiene este tensor respecto a la tasa de corte, nuevos términos aparecen en las ecuaciones resultantes,

$$\langle \tau_{ij} \rangle_l = \langle \eta(\dot{\gamma}_{ij}) \rangle_l \langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L + \{ \langle \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{ij} \rangle_l - \langle \eta(\dot{\gamma}_{ij}) \rangle_l \langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L \}, \quad (11)$$

$$\langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L = \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle_L}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \langle u_k \rangle_L}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (12)$$

Estos términos adicionales, ilustrados entre llaves en el lado derecho de la ecuación (11), son difíciles de determinar. Por lo tanto, con la finalidad de incorporar estos términos en las ecuaciones gobernantes, otros enfoques de modelamiento son requeridos [15]. Por ejemplo, en flujos no-Newtonianos, Ohta et al. [22] añadieron los efectos de difusión viscosa a través de una modificación en el tensor de esfuerzos sub-malla τ_{ij}^{SGS} .

A su vez, la forma filtrada de la viscosidad aparente $\langle \eta(\dot{\gamma}_{ij}) \rangle_l$ que aparece en la ecuación (11) es obtenida luego de aplicar el proceso de filtraje a las ecuaciones (5) o (6). Cuando este término $\langle \eta(\dot{\gamma}_{ij}) \rangle_l$ es calculado a través del modelo reológico Power-law, la expresión asociada toma la siguiente forma,

$$\langle \eta(\dot{\gamma}_{ij}) \rangle_l = K |\langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_l|^{n-1} + \left\{ K \langle |\dot{\gamma}_{ij}|^{n-1} \rangle_l - K |\langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_l|^{n-1} \right\}. \quad (13)$$

Similarmente, cuando el modelo Carreau-Yasuda es utilizado, la expresión de $\langle \eta(\dot{\gamma}_{ij}) \rangle_l$ es expresada como,

$$\begin{aligned} \langle \eta(\dot{\gamma}_{ij}) \rangle_l = & \mu_\infty + (\mu_0 - \mu_\infty) \left(1 + (\lambda |\langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_l|)^a \right)^{\frac{n-1}{a}} \\ & + \left\{ (\mu_0 - \mu_\infty) \langle (1 + (\lambda |\dot{\gamma}_{ij}|)^a)^{\frac{n-1}{a}} \rangle_l \right. \\ & \left. - (\mu_0 - \mu_\infty) (1 + (\lambda |\langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_l|)^a)^{\frac{n-1}{a}} \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

En las ecuaciones (13) y (14), los términos del lado derecho que están encerrados en llaves surgen como producto del proceso de filtraje. Siguiendo lo realizado en esfuerzos pasados

[22],[15],[21], en este trabajo, estos términos son ignorados. Finalmente, la magnitud de la tasa de corte es calculada a través de,

$$|\langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L| = \sqrt{0.5 \langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L : \langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L}. \quad (15)$$

Es importante notar aquí que este trabajo la tasa de corte $\langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L$ es estimada localmente y sus componentes son obtenidos del campo de velocidad resuelto.

2.3.2 Modelamiento del tensor de esfuerzos sub-malla

La mayoría de los modelos de tensores de esfuerzos sub-malla asumen que las escalas turbulentas pequeñas son aproximadamente isotrópicas y homogéneas, y que las escalas más grandes, las de la mayor energía, son dependientes de las características del flujo. Esto significa que solamente un porcentaje de la energía cinética turbulenta necesita ser resuelto y que el resto puede ser modelado. Típicamente, el 80% de esta energía debe ser resuelta para que una simulación LES pueda ser considerada adecuada. En consecuencia, el tensor de esfuerzos sub-malla es calculado a partir de [34] (Ver Apéndice C),

$$\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{SGS} = -2\mu_{SGS} \left(\langle S_{ij} \rangle_L - \frac{1}{3} \delta_{ij} \langle S_{kk} \rangle_L \right), \quad (16)$$

$$\langle S_{ij} \rangle_L = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle_L}{\partial x_i} \right), \quad (17)$$

donde μ_{SGS} es la viscosidad turbulenta sub-malla y $\langle S_{ij} \rangle_L$ es la tasa de deformación del campo resuelto. Note que la ecuación (16) puede ser también reescrita utilizando la tasa de corte $\langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L$ como indicado a seguir,

$$\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{SGS} = -\mu_{SGS} \langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L. \quad (18)$$

De esta manera, al reemplazar la ecuación (18) en la ecuación (10), un término de presión filtrada modificada es introducido, el cual es expresado como,

$$\langle P \rangle_l = \langle p \rangle_l + \frac{1}{3} \tau_{kk}^{SGS}, \quad (19)$$

en donde $\langle p \rangle_l$ es la presión mecánica filtrada y τ_{kk}^{SGS} es la traza del tensor sub-malla. Finalmente, al sustituir las ecuaciones (11), (12), (18), y (19) en las ecuaciones gobernantes filtradas, ecuaciones (9) y (10), estas toman la forma,

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle_l}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_j \rangle_L}{\partial x_j} = 0, \quad (20)$$

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_i \rangle_L}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_j \rangle_L \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} = - \frac{\partial \langle P \rangle_l}{\partial x_i} + \frac{\partial \left(\langle \eta(\dot{\gamma}) \rangle_l + \mu_{SGS} \langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L \right)}{\partial x_j}, \quad (21)$$

las cuales requieren el modelamiento de la viscosidad turbulenta sub-malla μ_{SGS} para su resolución.

2.3.3 Modelos sub-malla

En este trabajo de tesis, tres modelos enfocados en la determinación de la viscosidad turbulenta sub-malla, modelos SGS, han sido utilizados. Estos modelos incluyen el modelo de Smagorinsky [37], el modelo WALE [38] y el modelo de Vreman [39]. El modelo de Smagorinsky [37] es el modelo SGS más simple, el cual ha servido como base para el desarrollo de otros modelos sub-malla. Este modelo calcula la viscosidad turbulenta sub-malla con una expresión de la forma,

$$\mu_{SGS} = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \langle S_{ij} \rangle_L : \langle S_{ij} \rangle_L}, \quad (22)$$

donde $C_S = 0.17$ es la constante de Smagorinsky, Δ es el tamaño del filtro, y $\langle S_{ij} \rangle_L$ es la tasa de deformación del campo resuelto. A fin de describir adecuadamente el comportamiento de la

viscosidad turbulenta sub-malla en regiones próximas de superficies sólidas, la constante de Smagorinsky es usualmente ponderada usando funciones de amortiguamiento. Entre estas funciones, la más popular es la propuesta por Van Driest [27],[34],[40],

$$f(z^+) = \sqrt{\left(1 - e^{-z^+/A}\right)^3}, \quad (23)$$

$$z^+ = \frac{y u_\tau}{\nu}, \quad (24)$$

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}, \quad (25)$$

donde z^+ es la distancia (en unidades de pared) normal a la pared z , $A = 25$ es una constante empírica, u_τ es la velocidad de fricción, τ_w es el tensor de esfuerzos cortantes en la pared, ν y ρ son la viscosidad cinemática y la densidad del fluido, respectivamente. Otra manera de describir adecuadamente regiones de pared es la propuesta por Germano [41], la cual utiliza un procedimiento dinámico para calcular espacial y temporalmente la constante C_S . Sin embargo, la extensión de este procedimiento dinámico a flujos complejos no es un proceso trivial.

Modelos SGS como el modelo WALE o el modelo de Vreman aparecen como alternativas para predecir razonablemente bien la viscosidad turbulenta sin usar procedimientos dinámicos o funciones de amortiguamiento adicionales. En particular, el modelo WALE [38] aproxima a la viscosidad turbulenta de la siguiente manera,

$$\mu_{SGS} = (C_W \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d : S_{ij}^d)^{3/2}}{(\langle S_{ij} \rangle_L : \langle S_{ij} \rangle_L)^{5/2} + (S_{ij}^d : S_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (26)$$

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} (\langle g_{ij} \rangle_L^2 + \langle g_{ij} \rangle_L^2) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \langle g_{kk} \rangle_L^2, \quad (27)$$

$$\langle g_{ij} \rangle_L^2 = \langle g_{ik} \rangle_L \langle g_{kj} \rangle_L \quad (28)$$

$$\langle g_{ij} \rangle_L = \frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} \quad (29)$$

donde $C_W = 0.33$ es la constante del modelo WALE. A su vez, la viscosidad turbulenta propuesta en el modelo de Vreman [39] es expresada como,

$$\mu_{SGS} = C \sqrt{\frac{B_\beta}{\alpha_{ij} \cdot \alpha_{ij}}}, \quad (30)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j}, \quad (31)$$

$$\beta_{ij} = \Delta_m^2 \alpha_{mi} \alpha_{mj}, \quad (32)$$

$$B_\beta = \beta_{11}\beta_{22} - \beta_{12}^2 + \beta_{11}\beta_{33} - \beta_{13}^2 + \beta_{22}\beta_{33} - \beta_{23}^2, \quad (33)$$

donde $C = 2.5 C_S^2$ está relacionada con la constante de Smagorinsky C_S . Es importante notar aquí que todos los modelos SGS anteriormente descritos requieren de la primera derivada del campo resuelto de velocidades y del tamaño del filtro Δ , el cual es calculado de la siguiente forma,

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta_x \Delta_y \Delta_z}, \quad (34)$$

donde Δ_i es la distancia en la dirección i que tendría la mínima escala resuelta. Los modelos descritos en este capítulo han sido implementados en una herramienta computacional actualmente en desarrollo. Los detalles de esta implementación, incluyendo la configuración de flujo canónica usada para la evaluación de estos modelos, son descritos en el capítulo siguiente.

CAPÍTULO 3 - MODELO NUMÉRICO

El presente capítulo describe el modelo numérico utilizado en las simulaciones numéricas de flujos turbulentos realizadas en este trabajo. En ese sentido, una breve descripción de la herramienta computacional es incluida inicialmente en este capítulo. Luego, la configuración geométrica, las condiciones de contorno y la malla computacional son discutidas. La estrategia de simulación y el post procesamiento de los resultados obtenidos también forman parte de este capítulo.

3.1 Herramienta computacional

Las ecuaciones gobernantes (Capítulo 2), las cuales describen el comportamiento de los flujos turbulentos estudiados aquí, son resueltas en una herramienta computacional llamada CFLOWSS (*Complex Flows Solver*). Específicamente, los modelos de turbulencia tipo LES han sido implementados en el módulo FEM (*Finite Element Method*) de esta herramienta computacional. El módulo FEM está basado en el método de los residuos ponderados, con la particularidad de que tanto las funciones base como las funciones peso son idénticas. Esta particularidad ocasiona que el método de los residuos ponderados sea conocido como método de Galerkin. De esta manera, la inclusión de los modelos de turbulencia tipo LES en el módulo FEM requiere la aplicación del método de Galerkin a las ecuaciones (20) y (21), lo cual resulta en:

$$R_c^n = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \langle \rho \rangle_l}{\partial t} \chi_n + \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_j \rangle_L}{\partial x_j} \chi_n \right\} d\Omega = 0 \quad n = 1, \dots, M \quad (35)$$

$$\begin{aligned} R_{mi}^n = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_i \rangle_L}{\partial t} \psi_n + \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_j \rangle_L \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} \psi_n \right. \\ \left. + \frac{\partial \psi_n}{\partial x_j} [\langle P \rangle_l \delta_{ij} + (\langle \eta \dot{\gamma} \rangle_l + \mu_{SGS}) \langle \dot{\gamma}_{ij} \rangle_L] \right\} d\Omega - \int_{\Gamma} \psi_n \langle f_i \rangle_l d\Gamma \\ = 0 \quad n = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (36)$$

Nótese que en estas dos últimas ecuaciones R_c^n y R_{mi}^n representan los residuos asociados a las ecuaciones de conservación de masa (20) y cantidad de movimiento (21), respectivamente. En donde Ω representa a un dominio genérico, Γ es una superficie genérica, y χ_n , así como ψ_n , son un conjunto de funciones base. Además, las funciones base χ_n utilizadas en este trabajo son del tipo lineal, mientras que las funciones base ψ_n son del tipo tri-cuadrático. Los términos temporales que aparecen en las ecuaciones (35) y (36) son calculados a través del método implícito de Euler.

3.2 Configuración geométrica

Los flujos entre placas planas paralelas, cuya configuración geométrica habitual es aquella usada en el estudio de *channel flows*, corresponden a un caso particular de los flujos de pared. Este tipo de flujos son considerados en este trabajo. Esto implica que la configuración geométrica utilizada en este trabajo tiene la forma de un ducto rectangular de altura $H = 2\delta$ (ver Figura 4). Además, para que el flujo turbulento pueda desarrollarse adecuadamente, el ducto debe tener una longitud $L \gg \delta$ y un ancho $W \gg \delta$. Consecuentemente, siguiendo el trabajo realizado por Ohta [22], las dimensiones del dominio computacional utilizado en las simulaciones numéricas realizadas en este trabajo son aquellas resaltadas en la Tabla 1.

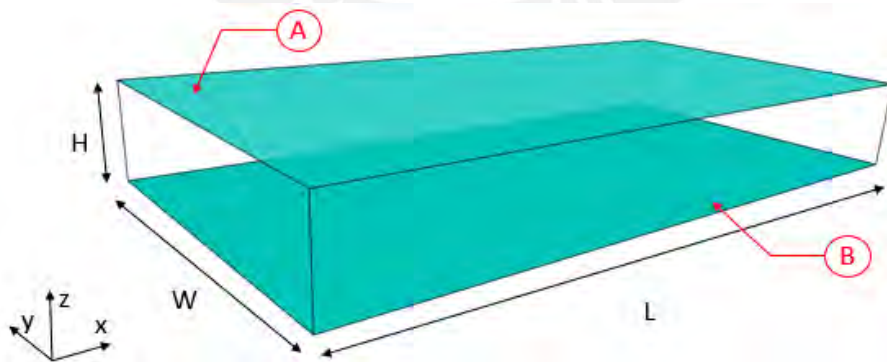


Figura 4. Aspectos geométricos del dominio computacional

Tabla 1. Parámetros geométricos.

H (m)	L (m)	W (m)
1.0	7.68	3.84

3.3 Condiciones de contorno

Como indicado en la Sección 3.2, la configuración clásica de *channel flow* involucra un flujo en el interior de un ducto rectangular de longitud y ancho relativamente grandes en comparación a su altura. Sin embargo, resolver un dominio computacional de tamaño excesivamente grande es computacionalmente costoso. Por lo tanto, condiciones de contorno de tipo periódicas son generalmente utilizadas. En términos amplios, esta periodicidad involucra conectar dos (2) contornos (límites o fronteras) opuestos del dominio computacional. De esta manera, el flujo que ingresa por un contorno sale por el contorno opuesto, y viceversa. En este trabajo, condiciones de contorno de periodicidad son impuestas en las fronteras E-F y en C-D (ver Figura 5), mientras que condición de pared sin deslizamiento es impuesta en las fronteras A-B (ver Figura 4). Cabe mencionar que el flujo medio predominante o *streamwise* está en la dirección del eje x , e ingresa por la frontera E y sale por la frontera F. El flujo secundario o *spanwise* atraviesa las fronteras C-D.

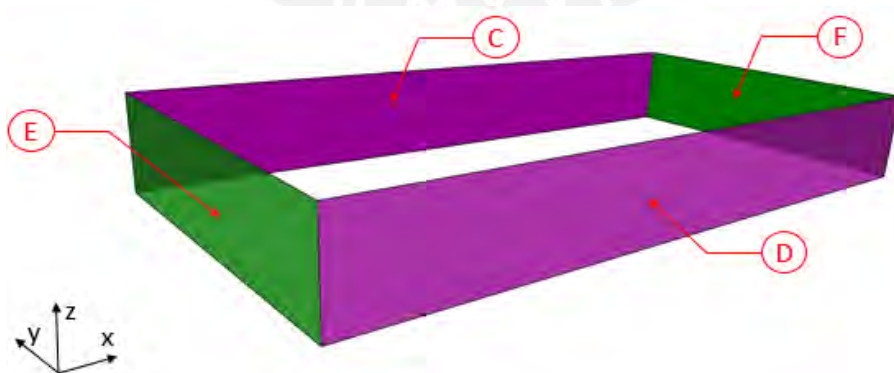


Figura 5. Ubicación de las condiciones de contorno de periodicidad: *Streamwise* (E-F) y *Spanwise* (C-D)

Tabla 2. Resumen de condiciones de contorno.

$A - B$	$C - D$	E	F
Pared	Periodicidad	Periodicidad	Presión cero

3.4 Condiciones iniciales

Debido al hecho de que la condición de contorno de periodicidad copia la información del flujo que pasa a través de una sección (frontera) y la transcribe en una sección opuesta (frontera opuesta), el uso de esta condición de contorno necesita de un campo resuelto para poder inicializar los cálculos con condiciones periódicas. Este campo resuelto es obtenido aquí cambiando las condiciones de contorno de periodicidad en el *streamwise* por una de velocidad constante en la frontera E y una de tracción nula en la frontera F. El campo resuelto con estas condiciones de contorno modificadas es usado luego para inicializar las simulaciones con condiciones periódicas. Finalmente, esta inicialización permite eventualmente alcanzar un flujo medio turbulento desarrollado en la configuración de *channel flow*. Nótese que esta configuración canónica utiliza como principal parámetro de estandarización al número de Reynolds de pared Re_τ , el cual es definido como,

$$Re_\tau = \frac{u_\tau \delta}{\nu}. \quad (37)$$

En comparación al número de Reynolds convencional Re_b ,

$$Re_b = \frac{U_b H}{\nu}. \quad (38)$$

la velocidad y longitud características utilizadas en el cálculo del número de Reynolds de pared son la velocidad de fricción u_τ y $\delta = H/2$ (ver Figura 4), respectivamente. Nótese que la velocidad de fricción, determinada a través de la ecuación (25), es dependiente del tensor de esfuerzos cortantes en la pared τ_w . Sin embargo, el término τ_w es calculado luego de resolver las ecuaciones

(35) y (36), es decir, después de obtener las soluciones numéricas. En ese sentido, resulta necesario partir de un valor de Re_τ aproximado, como el número de Reynolds Re_b , el cual permita producir el Re_τ de interés. En [40], para un mismo flujo turbulento en una configuración de *channel flow*, los autores proveen los números adimensionales Re_b y Re_τ correspondientes (Tabla 3). En el presente trabajo, las simulaciones numéricas serán realizadas para a un $Re_\tau = 180$, similar al utilizado en [24],[25] y [42].

Tabla 3. Números de Reynolds basado en la velocidad media (Re_b) y la velocidad de fricción (Re_τ) para un mismo flujo turbulento [40].

Re_b	Re_τ
5600	180
13750	395

El número de Reynolds Re_b asociado a un fluido Newtoniano es calculado aquí a través de la ecuación (38). Sin embargo, esta misma expresión no puede ser usada directamente en fluidos con un comportamiento reológico diferente (no-Newtoniano). De esta manera, a fin de poder evaluar el mismo número adimensional en fluidos no-Newtonianos del tipo Power-law y Carreau-Yasuda, siguiendo trabajos anteriores [43], [44], el número Re_b para un fluido tipo Power-law es definido como,

$$Re_b = \frac{\rho H U_b}{K \left(\frac{U_b}{H} \right)^{n-1}}, \quad (39)$$

donde ρ es la densidad del fluido, H es la altura del *channel flow*, U_b es la velocidad media del flujo, y el resto de los parámetros provienen del modelo reológico Power-law definido en la ecuación (5). De manera similar, el número Re_b para un fluido tipo Carreau-Yasuda es calculado a través de la siguiente expresión,

$$Re_b = \frac{\rho H U_b}{\mu_\infty + (\mu_0 - \mu_\infty) \left(1 + \left(\lambda \frac{U_b}{H}\right)^a\right)^{\frac{n-1}{a}}}. \quad (40)$$

Los parámetros describiendo el comportamiento reológico de un fluido Carreau-Yasuda que aparecen en esta última expresión son los indicados en la Sección 2.2. En este trabajo, tres fluidos distintos (Newtoniano, Power-law, y Carreau-Yasuda) son analizados a un mismo número de Reynolds, $Re_b = 5600$. Las propiedades de cada fluido, así como sus correspondientes velocidades medias U_b , están listadas en la Tabla 4, Tabla 5 y Tabla 6, respectivamente. Cabe mencionar que, a excepción de la densidad ρ , las propiedades del fluido descritas en la Tabla 4 y Tabla 5 fueron obtenidas de [22]. A su vez, las propiedades indicadas en la Tabla 6, las cuales corresponden a una pulpa mineral con un porcentaje de sólidos de 70%, fueron extraídas de [45].

Tabla 4. Parámetros adicionales del fluido Newtoniano.

μ (Pa-s)	ρ (kg/m ³)	U_b (m/s)
0.0087	1000	0.04872

Tabla 5. Parámetros adicionales del fluido Power-law.

K (Pa-s ⁿ)	n (-)	ρ (kg/m ³)	U_b (m/s)
0.0087	0.85	1000	0.0722563

Tabla 6. Parámetros adicionales del fluido Carreau-Yasuda.

μ_0 (Pa-s)	μ_∞ (Pa-s)	λ (s)	n (-)	a (-)	ρ (kg/m ³)	U_b (m/s)
0.4	0.045	0.3	0.32	2	1000	2.0367

3.4.1 Generación de turbulencia sintética

Como indicado en el inicio de esta Sección 3.4, un campo turbulento resuelto es requerido para inicializar las simulaciones con condiciones de contorno periódicas. Sin embargo, si el campo

resuelto no es lo suficientemente turbulento, el desarrollo completo de la turbulencia requerirá de un tiempo computacional excesivamente largo [46]. Existen varias maneras de obtener un campo o condición inicial que acelere el desarrollo de la turbulencia. Una de estas maneras involucra el uso de generadores de turbulencia sintética, los cuales, a través de procesos estocásticos y números aleatorios, producen fluctuaciones de velocidad similares a las de un flujo turbulento [47]. Un generador de turbulencia sintética basado en técnicas de Fourier o RFG (*Random Flow Generator*) es utilizado en este trabajo. En [46], Smirnov et al. proporcionan información más detallada sobre este generador particular de turbulencia sintética. A fin de construir un campo de velocidad con turbulencia sintética en la frontera E (ver Figura 5), en el RFG, los parámetros listados en la Tabla 7 han sido utilizados. En esta tabla, $nspec$ representa el número de funciones armónicas consideradas para describir al flujo turbulento, $turbtime$ es la escala temporal de la turbulencia, y $u_i u_j$ son las componentes del tensor de Reynolds considerado. Finalmente, cuando del uso del RFG, las condiciones de contorno utilizadas son aquellas resaltadas en la Tabla 8.

Tabla 7. Parámetros considerados en el generador de turbulencia sintético RFG.

$nspec$	$turbtime$	$u_1 u_1$	$u_2 u_2$	$u_3 u_3$	$u_1 u_2$	$u_1 u_3$	$u_2 u_3$
1000	Δt	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	0	0	0

Tabla 8. Resumen de condiciones de contorno para la condición inicial.

$A - B$	$C - D$	E	F
Pared	Periodicidad	Velocidad constante + RFG	Presión cero

3.5 Generación de malla

Las simulaciones numéricas realizadas en este trabajo involucraron el uso de una malla computacional de 24576 (96x16x16) elementos. La distribución de elementos en la malla estructurada de tipo Cartesiana utilizada es mostrada en la Figura 6. Nótese que, para representar

la velocidad y la presión, cada elemento finito en esta malla involucra el uso de funciones base del tipo tri-quadrático y lineales, respectivamente. En otras palabras, el campo de velocidades es calculado en 210177 (193x33x33) puntos discretos distribuidos en todo el dominio computacional, mientras que la presión es determinada en cada uno de los centros de los elementos de la malla.

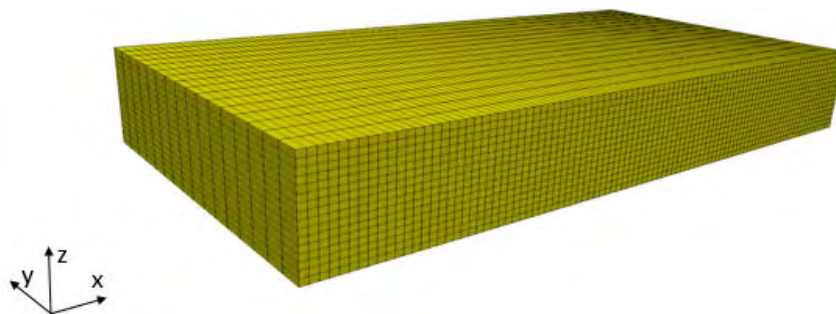


Figura 6. Malla computacional (estructurada, Cartesiana) usada en las simulaciones numéricas.

3.6 Estrategia de simulación

Como descrito en las secciones 3.3 y 3.4, cada uno de los fluidos de interés es numéricamente simulado en dos etapas. En la primera etapa, utilizando las condiciones de contorno descritas en la Tabla 8, las ecuaciones de residuo (35) y (36) son resueltas hasta un tiempo físico tal que el flujo principal pasa a través del *channel flow*. La importancia de esta primera etapa radica en que el campo turbulento final obtenido es utilizado como condición inicial de la segunda etapa. En la segunda etapa, a su vez, las condiciones de contorno indicadas en la Tabla 2 son impuestas en el dominio computacional. A fin de desarrollar completamente la turbulencia asociada al campo inicial, en esta segunda etapa, el flujo principal pasa a través del *channel flow* un número finito de veces, hasta que la convergencia de los resultados instantáneos y medios es asegurada. Los parámetros temporales utilizados en cada una de etapas de las simulaciones numéricas realizadas están resumidos en la Tabla 9. Nótese que estos parámetros son mantenidos invariables cuando distintos modelos de turbulencia son analizados en un mismo fluido.

Tabla 9. Parámetros temporales considerados según la etapa de la simulación.

Fluido	Primera etapa			Segunda etapa	
	Δt (s)	t_{FT} (s)	$t_{max} = 1.1 t_{FT}$	Δt (s)	$t_{max} = 4.1 t_{FT}$
N	0.03	157.63	173.39	0.03	646.3
PL	0.05	106.28	116.91	0.05	435.78
CY	0.00076	3.77	4.15	0.00076	15.46

Nótese que algunos parámetros temporales incluidos en la Tabla 9 están expresados en términos del tiempo de *flow-through* (t_{FT}). Este tiempo de *flow-through* es utilizado comúnmente para establecer, de manera aproximada, el tiempo requerido para que una partícula de fluido atraviese una geometría específica. En este trabajo, el tiempo de *flow-through* es estimado mediante una expresión de la forma,

$$t_{FT} = \frac{L}{U_b}, \quad (41)$$

donde L es el largo del *channel flow* y U_b es la velocidad media correspondiente a un número de Reynolds específico, por ejemplo, $Re_b = 5600$. Además, aun cuando el módulo FEM usa un esquema implícito, el paso de tiempo Δt es determinado a partir de un número de *CFL* (Courant-Friedrichs-Levy) igual a 0.25, el cual es estimado aquí como,

$$CFL = \frac{U_b \Delta t}{\Delta x_{min}}, \quad (42)$$

donde Δt es el paso de tiempo y Δx_{min} es la distancia mínima entre nodos.

CAPÍTULO 4 - RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Este último capítulo describe los principales resultados obtenidos en este trabajo con el módulo FEM de la herramienta computacional CFLOWSS utilizado. Más específicamente, a fin de ilustrar las capacidades de esta herramienta en la cual han sido implementados los modelos de turbulencia, resultados de verificación involucrando flujos laminares Newtonianos y no-Newtonianos son inicialmente presentados. Luego, la funcionalidad de los modelos de turbulencia LES desarrollados aquí es evaluada vía simulaciones numéricas de flujos turbulentos Newtonianos y no-Newtonianos. En particular, resultados DNS disponibles en la literatura son utilizados como medio de comparación. Además, análisis cualitativos y cuantitativos de la turbulencia caracterizando los flujos estudiados son incluidos en este capítulo.

4.1 Verificación de herramienta computacional

A fin de verificar las capacidades de la herramienta computacional FEM para describir adecuadamente flujos laminares, simulaciones numéricas en 2D y 3D de flujos Newtonianos y no-Newtonianos en régimen laminar han sido realizadas. Los resultados de las referidas simulaciones son discutidos en esta sección. En vista de que la configuración clásica de *channel flow* es de interés en este trabajo de tesis, solamente esta configuración canónica es considerada en los flujos laminares analizados aquí. Asimismo, como referencia para la comparación con los resultados numéricos obtenidos, soluciones analíticas de flujos Newtonianos y No-Newtonianos en configuraciones de *channel flow* son utilizados. Otros resultados de flujos laminares obtenidos con esta herramienta, en configuraciones de flujo diferentes a la utilizada en esta sección, pueden ser encontrados en [48] y [49].

4.1.1 Flujos laminares en 2D

Flujos completamente desarrollados en régimen laminar entre placas paralelas infinitas son analizados aquí. Detalles de las simulaciones numéricas correspondientes a estos flujos laminares son proporcionados en [48]. Los perfiles de velocidad del flujo Newtoniano y de aquellos no-Newtonianos (Carreau-Yasuda, Power-law y Power-law truncado) son mostrados en la Figura 7.A y Figura 7.B, respectivamente. De la Figura 7, en términos de perfiles de velocidad, los resultados obtenidos con la herramienta computacional FEM y los analíticos [50],[30],[51] muestran una excelente concordancia. De hecho, cuando comparados con las soluciones analíticas, el perfil de velocidad Newtoniano presenta un error cuadrático medio (RMSE) de $4.9E-08$, y los de Power-law y Power-law truncado un RMSE de $2.6E-07$ y $6.6E-07$, respectivamente. Nótese que el modelo reológico Carreau-Yasuda no posee una solución analítica disponible.

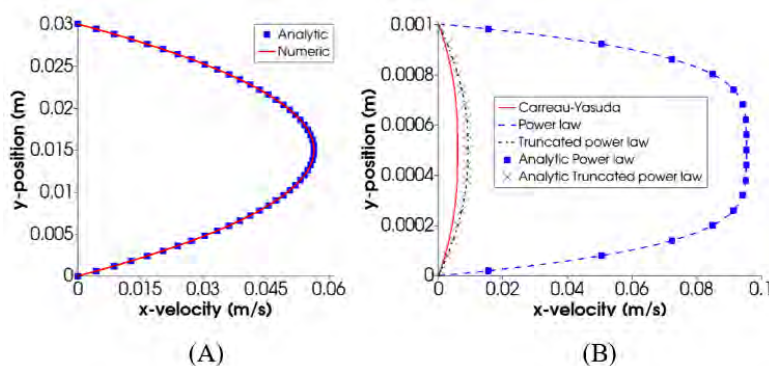


Figura 7. Perfiles de velocidad correspondientes a flujos laminares (A) Newtonianos y (B) no-Newtonianos en la configuración de *channel flow* 2D [48].

4.1.2 Flujos laminares en 3D

Flujos laminares tri-dimensionales de fluidos Newtonianos y no-Newtonianos (Power-law) en la configuración de *channel flow* son evaluados en esta sección. Información detallada de las simulaciones numéricas realizadas es encontrada en [52]. Al igual que en las simulaciones 2D, las comparaciones de las soluciones numéricas con las analíticas obtenidas de [30] corroboran la utilidad de la herramienta FEM en discusión aquí (Ver Figura 8). Es importante notar que, en el

caso de los flujos de fluidos Newtonianos (Ver Figura 8.A), el uso de mallas computacionales progresivamente refinadas no mejoran los resultados obtenidos. Sin embargo, un comportamiento distinto es observado en el fluido Power-law (Ver Figura 8.B). En este caso, el error cuadrático medio normalizado (NRMSE) tiende a disminuir con el aumento en el refinamiento de la malla computacional. Como ilustrado a través de los resultados discutidos en esta Sección 4.1, la herramienta FEM en la cual han sido implementados los modelos de turbulencia tipo LES es capaz de caracterizar adecuadamente flujos laminares bi y tridimensionales de fluidos Newtonianos y no-Newtonianos.

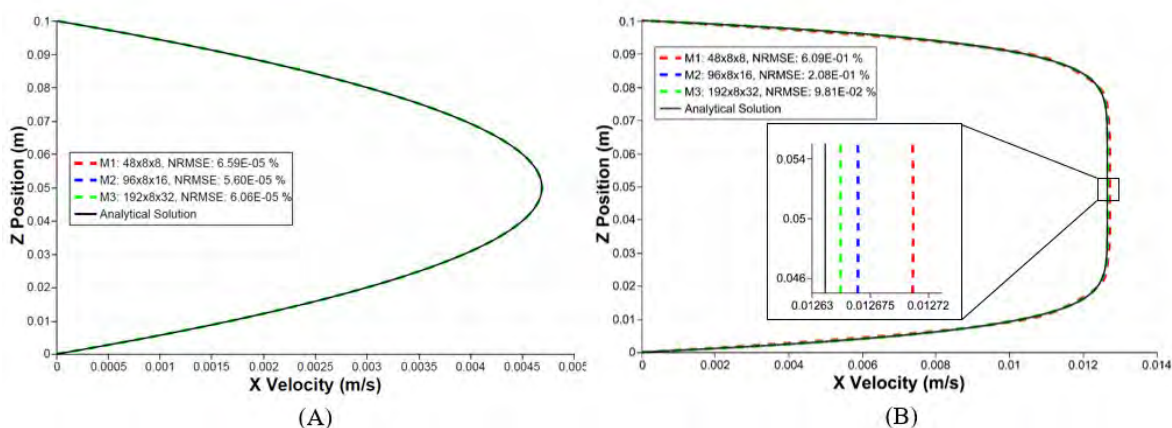


Figura 8. Perfiles de velocidad correspondiente a flujos laminares (A) Newtoniano y (B) no-Newtoniano en la configuración de channel flow 3D [52].

4.2 Resultados cualitativos

Flujos turbulentos tridimensionales, cuyas consideraciones numéricas fueron detalladas en el CAPÍTULO 3, son analizados cualitativamente aquí. En donde, a través de campos instantáneos y medios, los modelos LES desarrollados en la herramienta computacional CFLOWSS son evaluados teniendo en consideración la capacidad para representar flujos turbulentos de fluidos Newtonianos y no-Newtonianos. Luego, con la finalidad de describir el efecto de la viscosidad no-

Newtoniana sobre la turbulencia, los campos obtenidos de fluidos no-Newtonianos son comparados con aquellos Newtonianos.

4.2.1 Campos instantáneos

A fin de conocer cómo los modelos de turbulencia tipo LES están representado a los flujos turbulentos de fluidos Newtonianos, campos instantáneos de velocidad e iso-superficies del criterio de Q son inicialmente extraídos de la primera etapa de las simulaciones, la cual produce un campo turbulento físicamente realista a través de un generador sintético de turbulencia o RFG (*Random flow Generator*). Por lo que, la irregularidad y la presencia de estructuras turbulentas son esperadas en estos campos instantáneos. En la segunda etapa de las simulaciones, el campo turbulento producido en la etapa predecesora es completamente desarrollado al recircular el flujo reiteradas veces en el *channel flow*. Los resultados finales de esta segunda etapa involucrando tanto fluidos Newtonianos como no-Newtonianos son evaluados haciendo uso de las iso-superficies de Q .

Los campos instantáneos de velocidad del fluido Newtoniano al finalizar la primera etapa son mostrados en la Figura 9. Como puede ser observado aquí, cada uno de los modelos LES describe un campo instantáneo diferente. El modelo clásico de Smagorinsky, corregido mediante la función de amortiguamiento de Van driest, y el modelo Wale presentan un grado de irregularidad en el campo de velocidad instantáneo. Este comportamiento irregular o caótico no es observado en los resultados obtenidos con el modelo de Vreman. Además, debido a la formación de una capa límite de espesor casi constante a partir de $x = 3.84$ en la Figura 9.C, el campo obtenido por este último modelo LES es similar a uno que está en régimen laminar. Dicho de otra manera, el modelo de Vreman implementado tiene un comportamiento altamente disipativo, capaz de tornar laminar el flujo turbulento, removiendo la turbulencia introducida por el generador sintético.

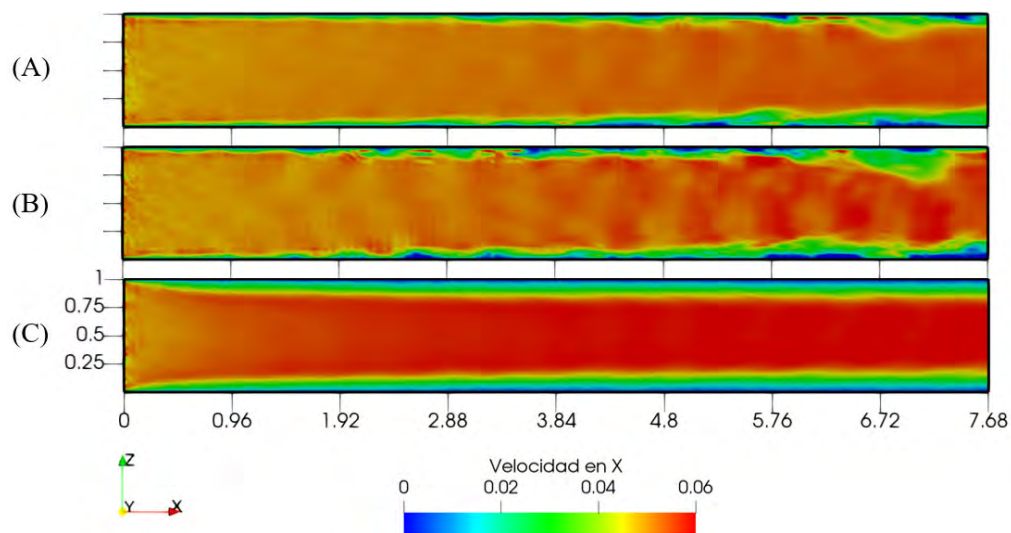


Figura 9. Campos instantáneos de velocidad en el eje X obtenidos con el modelo: (A) Smagorinsky, (B) Wale y (C) Vreman en la primera etapa.

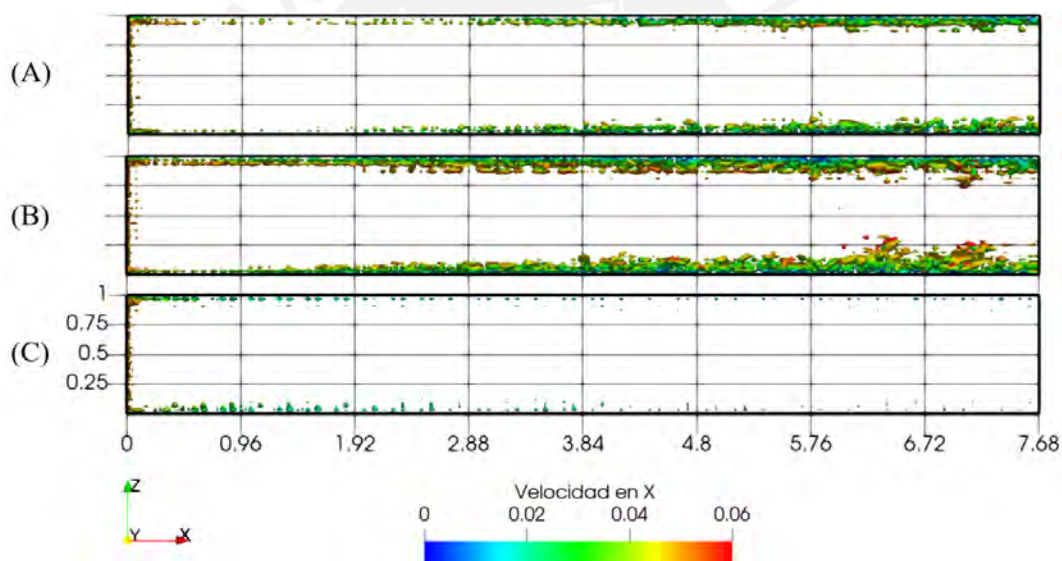


Figura 10. Iso-superficies instantáneas de $Q=0.01$ coloreados por la velocidad en el eje X obtenidos con el modelo: (A) Smagorinsky, (B) Wale y (C) Vreman en la primera etapa.

Una manera alternativa de visualizar el comportamiento turbulento de estos campos instantáneos es mediante la identificación de vórtices. El Q -criterion ha sido utilizado aquí para visualizar estos vórtices o estructuras turbulentas a lo largo del *channel flow*. Como mostrado en la Figura 10, los modelos de Smagorinsky y Wale están asociados a estructuras turbulentas u objetos vorticales. En efecto, a pesar de la función de amortiguamiento, el modelo de Smagorinsky

presenta una menor cantidad de estas estructuras en comparación con las del modelo Wale. Nótese, también, que el modelo Vreman describe una cantidad menor y un tamaño casi despreciable de estructuras comparados con los demás modelos LES. Por esta razón, el modelo de Vreman no será incluido en la presentación de resultados posteriores.

Las estructuras vorticales instantáneas del fluido Newtoniano cuando el flujo turbulento ha sido completamente desarrollado son mostradas en la Figura 11. Por motivos de comparación, las estructuras presentadas están limitadas por $Z^+ \leq 50$ (cercasas a la pared inferior del *channel flow*) y coloreadas por la vorticidad en la dirección del *streamwise*. Note que la región comprendida en $Z^+ \leq 50$ es también conocida como la región de pared viscosa y ha sido considerada aquí por contener la actividad turbulenta más representativa [27]. Los resultados Newtonianos del modelo Smagorinsky (Figura 11.A) está asociado a una sutil menor cantidad de estructuras turbulentas en comparación a las obtenidas con el modelo Wale (Figura 11.B).

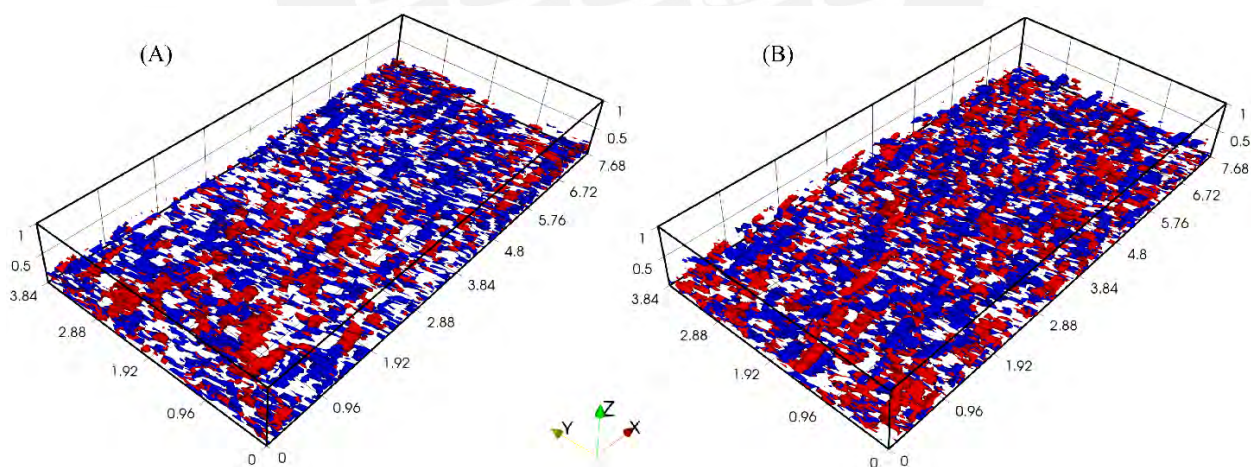


Figura 11. Iso-superficies de $Q=0.01$ instantaneos coloreados por la vorticidad en la dirección del *streamwise* ω_x obtenidos con el modelo: (A) Smagorinsky y (B) Wale. Los colores azul y rojo son utilizados para valores de $\omega_x > 0$ y $\omega_x < 0$, respectivamente.

De manera similar a lo realizado en los resultados Newtonianos, las estructuras del flujo turbulento no-Newtoniano completamente desarrollado son presentadas en la Figura 12. Sin

embargo, debido a que la simulación numérica con el modelo Wale no terminó satisfactoriamente, la comparación entre modelos LES no fue posible. En su lugar, los resultados del flujo Newtoniano (Figura 12.A) y no-Newtoniano Power-law (Figura 12.B) utilizando el modelo de Smagorinsky son puestos en comparación.

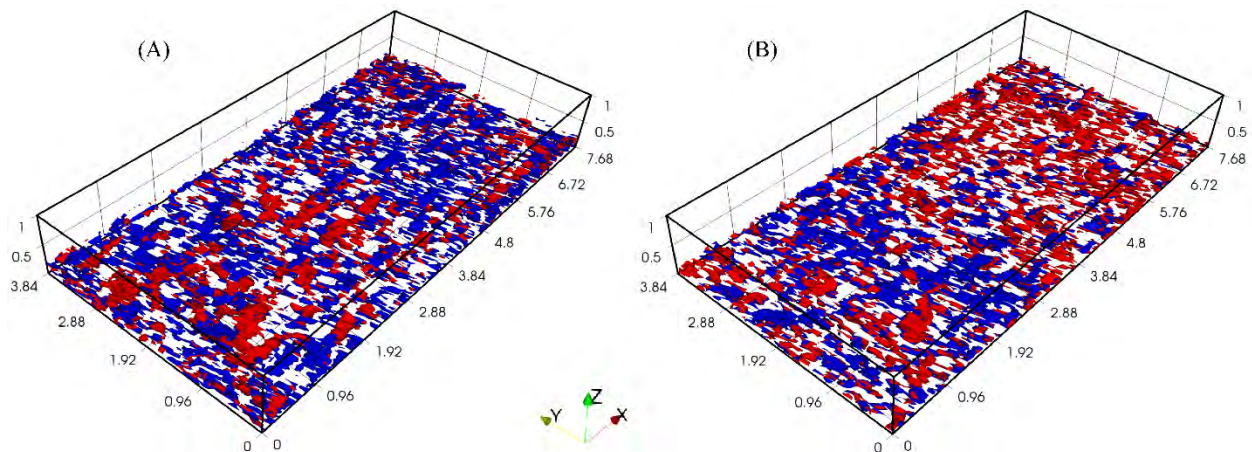


Figura 12. Iso-superficies instantaneos de $Q=0.01$ coloreados por la vorticidad en la dirección del streamwise ω_x utilizando el modelo de Smagorinsky en un flujo: (A) Newtoniano y (B) no-Newtoniano Power-law. Los colores azul y rojo son utilizados para valores de $\omega_x > 0$ y $\omega_x < 0$, respectivamente.

4.2.2 Campos medios

En un flujo turbulento, las variables de interés tienen un comportamiento aleatorio. Por lo que, al repetir el experimento bajo las mismas condiciones, el mismo valor en cada una de estas variables no necesariamente es obtenido [27]. En ese sentido, a fin de comparar resultados en turbulencia, las variables de interés son sometidas a una serie de operaciones estadísticas. Aquí, los resultados cualitativos mostrados serán aquellos que fueron calculados a través de una media temporal. Además, estas operaciones estadísticas fueron realizadas luego de haber una turbulencia completamente desarrollada. Desde la Figura 13-Figura 16, los campos medios pertenecen a uno plano perpendicular al *spanwise* (eje y) que pasa por el centro geométrico del *channel flow*.

En la Figura 13, cada uno de los campos medios de velocidad ha sido normalizado por su velocidad máxima respectiva. Como puede ser apreciado en esta figura, los campos medios describen el comportamiento esperado, similar a los campos bien comportados en régimen laminar. Sin embargo, algunas pequeñas variaciones en la transición de velocidades cercanas a la pared aún son observadas. Por lo que un mayor tiempo físico de estadísticas puede ser considerado.

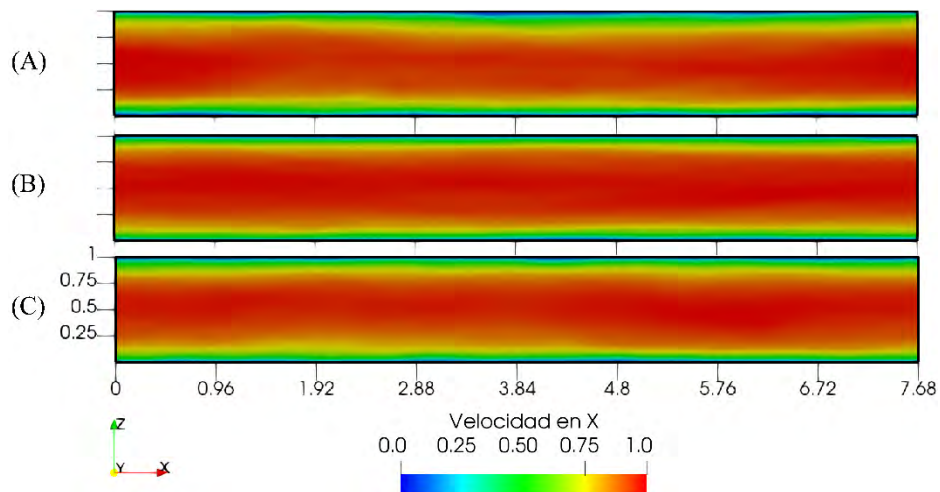


Figura 13. Campo medio de velocidades normalizado en la dirección del streamwise correspondiente a un fluido Newtoniano con el modelo: (A) Smagorinsky y (B) Wale, y no-Newtoniano con el modelo Smagorinsky (C).

El comportamiento medio de la viscosidad turbulenta μ_t , de la viscosidad molecular μ , y del shear rate $|\dot{\gamma}|$ son presentados en la Figura 14, Figura 15 y Figura 16, respectivamente. Es importante recalcar que la viscosidad turbulenta representa el comportamiento disipativo de las escalas pequeñas. Mientras que la viscosidad molecular es la propiedad del fluido relacionada con la resistencia a fluir. En fluidos Newtonianos generalizados, como los considerados en esta tesis, la viscosidad molecular es una variable dependiente del shear rate. Además, al utilizar un índice o exponente $n < 1$, son caracterizados por tener un comportamiento del tipo *shear-thinning* [24]; cuyo incremento está asociado a una disminución de la viscosidad molecular. Este comportamiento

particular del fluido es el causante de uno de los principales fenómenos de interés en el transporte de fluidos, la reducción del arrastre [24], [25] y [53].

Como mostrado en la Figura 14, la viscosidad turbulenta tiene un valor mínimo igual a cero en la pared ($Z = 0$) y un valor máximo a cierta distancia de esta ($Z < 0.25$). El comportamiento de la viscosidad turbulenta comprendida entre estos dos valores es, en general, creciente; mientras que para valores fuera de este rango adquiere un comportamiento decreciente en la dirección del eje Z . Los resultados del flujo turbulento Newtoniano con el modelo de Smagorinsky (Figura 14.A) y el modelo Wale (Figura 14.B) presentan un rango de viscosidades turbulentas similares. Sin embargo, la principal diferencia observada radica en los resultados del modelo de Smagorinsky predominan valores de viscosidad turbulenta mayores a las descritas con el modelo Wale. La Figura 14.C corresponde al flujo turbulento no-Newtoniano Power law utilizando el modelo de Smagorinsky. Aquí, valores de viscosidad turbulenta mayores que los descritos en el fluido Newtoniano con el mismo modelo de turbulencia (Figura 14.A) son observados.

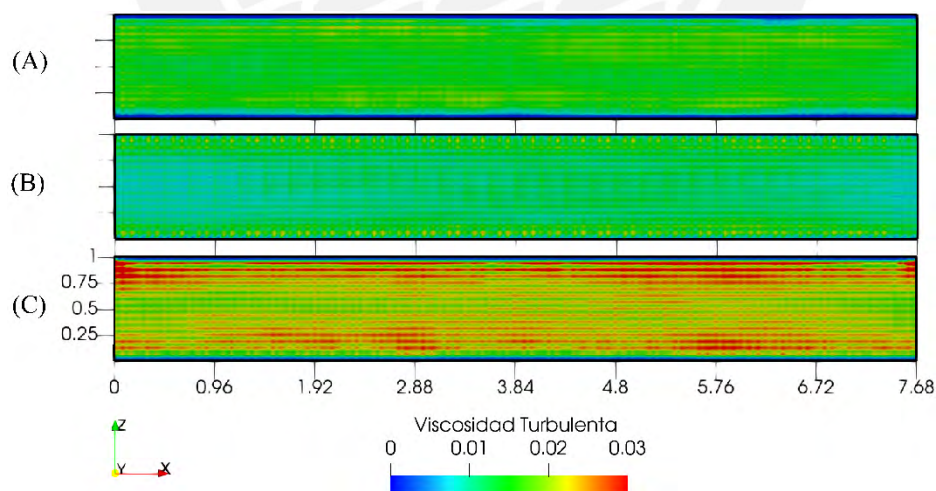


Figura 14. Campo medio de viscosidad turbulenta correspondiente a un fluido Newtoniano con el modelo: (A) Smagorinsky y (B) Wale, y no-Newtoniano con el modelo Smagorinsky (C).

La Figura 15 muestra el comportamiento medio de la viscosidad molecular. Por motivos de comparación, el contorno de viscosidad molecular del flujo turbulento Newtoniano (Figura 15.A) ha sido incluido en esta figura. Nótese que, en un fluido Newtoniano, la viscosidad molecular es constante ($\mu = 0.0087 \text{ Pa} \cdot \text{s}$) e independiente del modelo de turbulencia utilizado. La viscosidad molecular del flujo turbulento no-Newtoniano Power-law es presentada en la Figura 15.B. Como puede ser apreciado en esta figura, la viscosidad del fluido tiene un valor mínimo en la pared ($\mu = 0.0082 \text{ Pa} \cdot \text{s}$) que aumenta hasta llegar a un valor máximo ($\mu = 0.0106 \text{ Pa} \cdot \text{s}$) en la mitad de la altura del *channel flow*. En efecto, hay una región cercana a la pared en donde la viscosidad molecular es menor a la del caso Newtoniano; lo que da lugar a una reducción del arrastre [53].

Los contornos medios de *shear rate* asociados a los flujos turbulentos son ilustrados en la Figura 16. En general, los resultados Newtonianos y no-Newtonianos coinciden en la descripción de valores de *shear rate* elevados en la región próxima a la pared. Asimismo, en el flujo turbulento Power-law, la viscosidad molecular (ver Figura 15.B) y el *shear rate* (ver Figura 16.C) presentan una relación inversamente proporcional. Por lo que el comportamiento asociado a un fluido *shear-thinning*, como los considerados en este trabajo, es corroborado.

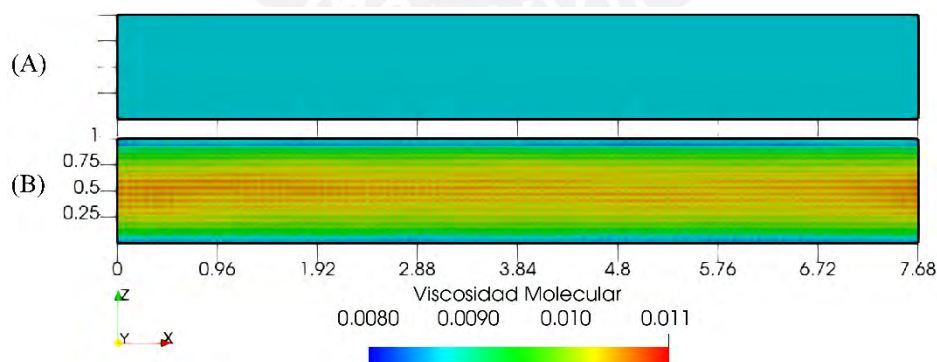


Figura 15. Campo medio de viscosidad molecular correspondiente a un fluido: (A) Newtoniano con ambos modelos de turbulencia y (B) no-Newtoniano con el modelo de Smagorinsky.

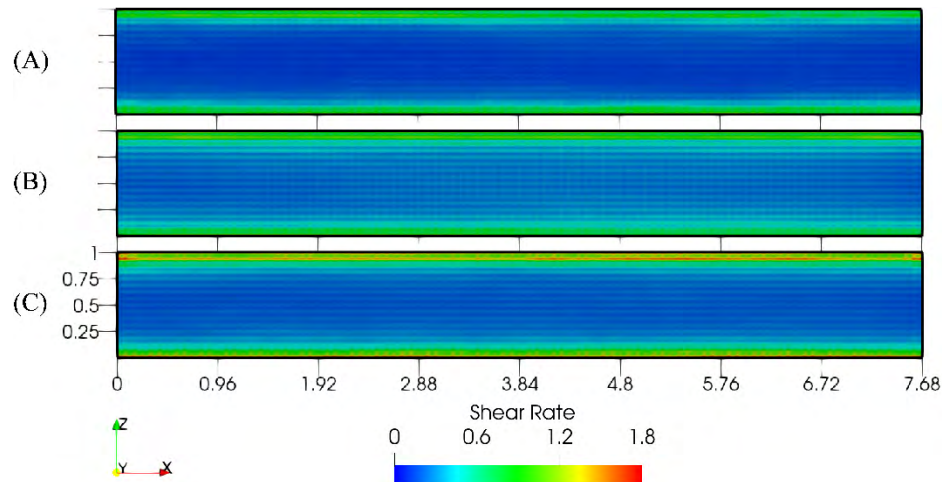


Figura 16. Campo medio de Shear Rate correspondiente a un fluido Newtoniano con el modelo : (A) Smagorinsky y (B) Wale, y no-Newtoniano con el modelo Smagorinsky (C).

4.3 Resultados cuantitativos

Los resultados turbulentos en el *channel flow*, obtenidos con los modelos LES desarrollados, son verificados en esta sección. En donde, la data DNS [42] de un flujo turbulento Newtoniano con igual número de Reynolds ($Re = 5600$) en la misma configuración geométrica ha sido utilizada como referencia. A fin de comparar los resultados LES con la data DNS extraída, las variables estudiadas aquí han sido normalizadas con la velocidad de fricción $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho}$; mientras que la normalización de la distancia a la pared es calculada mediante $Z^+ = u_\tau Z \rho/\mu$. Como mencionado en la Sección 4.2, la comparación de resultados en turbulencia involucra el uso de términos estadísticos. Aquí, los resultados mostrados han sido promediados de manera temporal y espacial. Este último, con la intención de mejorar la calidad de los resultados, realiza un promedio aritmético de todos los valores que tienen una misma posición en Z (dirección perpendicular a la pared).

4.3.1 Perfil de velocidades

El perfil de velocidad turbulenta en la dirección principal o *streamwise* de los fluidos Newtoniano y no-Newtoniano son presentados en la Figura 17. El superíndice + denota la normalización con la velocidad de fricción u_τ . En la figura, las líneas clásicas que describen el comportamiento de la velocidad normalizada en la subcapa viscosa $0 < Z^+ < 5$ y en el de la región de ley logarítmica $30 < Z^+$ han sido incluidas. De los resultados Newtonianos, los perfiles de velocidad U^+ obtenidos con ambos modelos de turbulencia muestran una tendencia similar a las del caso DNS. El perfil de velocidad del modelo Wale, en comparación a la del Smagorinsky, presenta una mejor aproximación a la curva deseada. Por otro lado, el perfil de velocidad del fluido Power-law utilizando el modelo de Smagorinsky presenta un desplazamiento vertical positivo en comparación a la de su contraparte Newtoniana. Este comportamiento del perfil de velocidad en la dirección streamwise también ha sido documentado en [15], [18] y [25]. Nótese que los puntos resueltos de cada uno de los perfiles obtenidos han sido añadidos, en esta gráfica, como figuras geométricas. Por lo que la zona más cercana a la pared que ha sido resuelta es la capa buffer $5 < Z^+ < 30$, que es en donde ocurre la mayor actividad turbulenta [27].

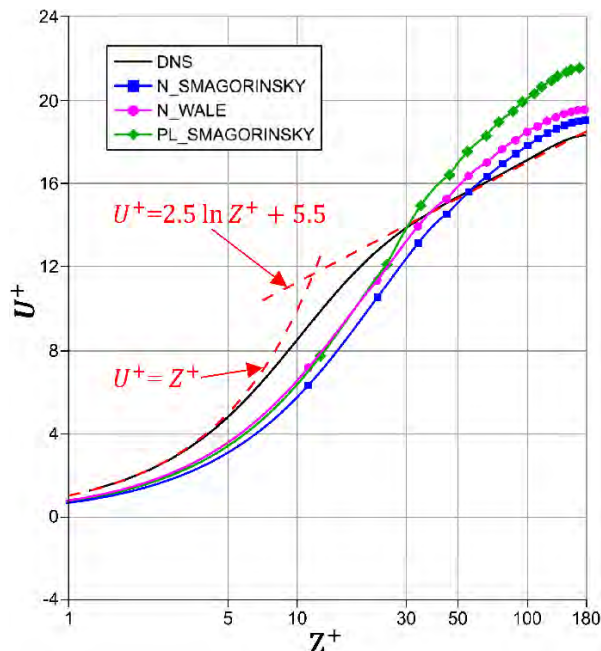


Figura 17. Perfil de velocidades medias en el streamwise de un fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.

De manera similar a lo realizado en el perfil de velocidad principal, los perfiles de velocidad en la dirección *spanwise* y perpendicular a la pared son mostrados en la Figura 18. Por motivos de comparación, ambas gráficas han mantenido el rango de velocidades presentado en la Figura 17. En la gráfica del perfil de velocidades del *spanwise* (Izquierda), para un fluido Newtoniano, el modelo Wale tiene una mejor aproximación a la curva deseada. Mientras que al utilizar el mismo modelo de turbulencia, los perfiles de velocidad del fluido Newtoniano y no-Newtoniano son los que están más alejados del comportamiento deseado. Por otro lado, en la gráfica del perfil de velocidades en la dirección perpendicular a la pared (Derecha), los puntos resueltos del fluido Newtoniano y no-Newtoniano están próximos a la curva deseada. Es importante mencionar que los elementos considerados aquí tienen un tamaño de $0.08 \times 0.24 \times 0.0625 \text{ m}^3$. Por lo que la diferencia de resultados, en el *spanwise*, pueden ser atribuidos a la relación de aspecto del elemento.

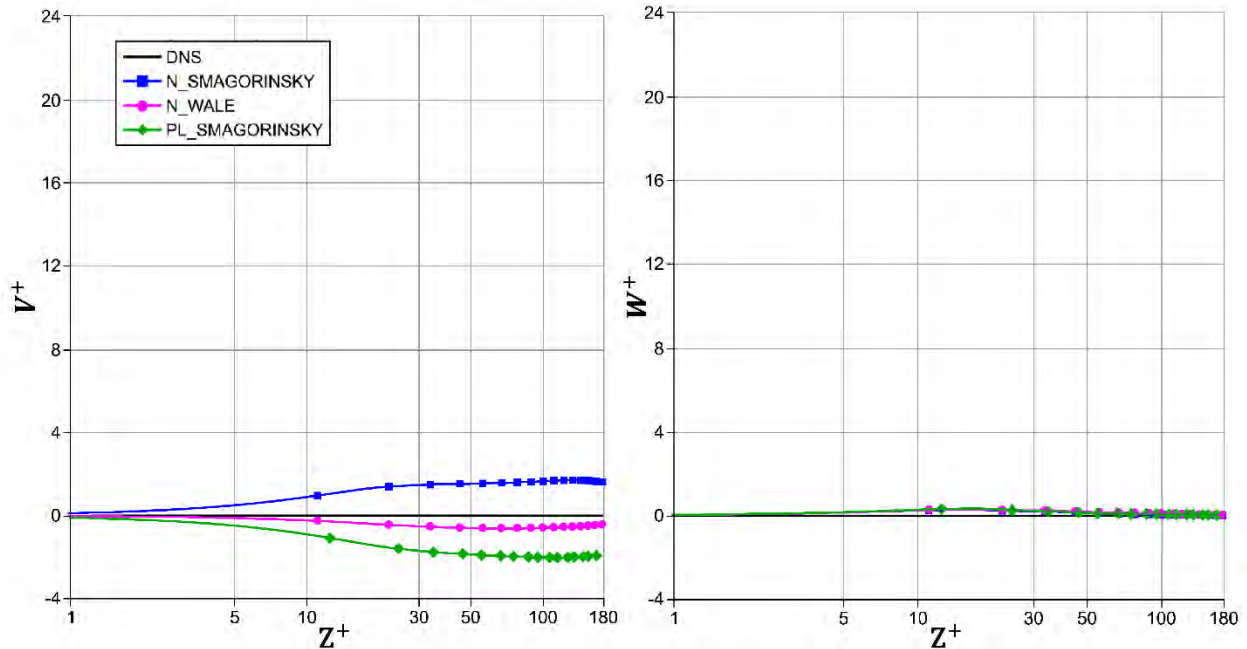


Figura 18. Perfil de velocidades medios en el spanwise (Izquierda) y en la dirección perpendicular a la pared (Derecha) del fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.

4.3.2 Tensores de Reynolds

La Figura 19 presenta los perfiles de las componentes normales (R_{uu} , R_{vv} , R_{ww}) del tensor de esfuerzos de Reynolds resuelto. Las cuales han sido normalizadas por la velocidad de fricción u_τ en su forma RMS, i.e. $U_{rms} = \sqrt{R_{uu}}$. Por motivos de comparación, la misma escala ha sido mantenida en estos perfiles. Nótese que los perfiles DNS de un fluido Newtoniano han sido incluidos en esta gráfica. La cual presenta un pico máximo cercano a la pared ($0 < Z^+ < 60$) en cada una de las componentes normales del referido tensor de esfuerzos. Observe también que la magnitud y ubicación en Z^+ del valor pico es reducida e incrementada, respectivamente, en el orden (Figura 19.A, B y C) en el que son mostrados. De acuerdo con [19], en un fluido Newtoniano, las fluctuaciones de velocidad en el *streamwise* U_{rms} son generadas en la zona cercana a la pared y, luego, transferidos a las demás componentes transversales (V_{rms} y W_{rms}). Sin

embargo, este mecanismo de transferencia de energía es amortiguado en un fluido no-Newtoniano con un índice de comportamiento menor a la unidad [19]. Por lo que es esperado que el perfil de fluctuaciones de velocidad en el *streamwise* U_{rms}/u_τ describa un aumento en comparación al caso Newtoniano. A si como, por el contrario, una disminución en las componentes transversales (V_{rms}/u_τ) y normales a la pared (W_{rms}/u_τ).

En los resultados Newtonianos de la Figura 19, la tendencia del perfil normalizado de U_{rms} (Figura 19.A) y W_{rms} (Figura 19.C) es mejor descrita por el modelo Wale. Mientras que el modelo de Smagorinsky capta la tendencia esperada en el perfil normalizado de V_{rms} (Figura 19.B). Los cuales, además, concuerdan relativamente bien con la ubicación en Z^+ de los valores picos. En relación al resultado no-Newtoniano Power-law, tendencias similares a las proporcionadas por los perfiles DNS Newtonianos son observadas en esta figura. Como mencionado anteriormente, en relación a los resultados Newtonianos obtenidos con el modelo Smagorinsky, el comportamiento esperado en los perfiles no-Newtonianos no ha sido reproducido.

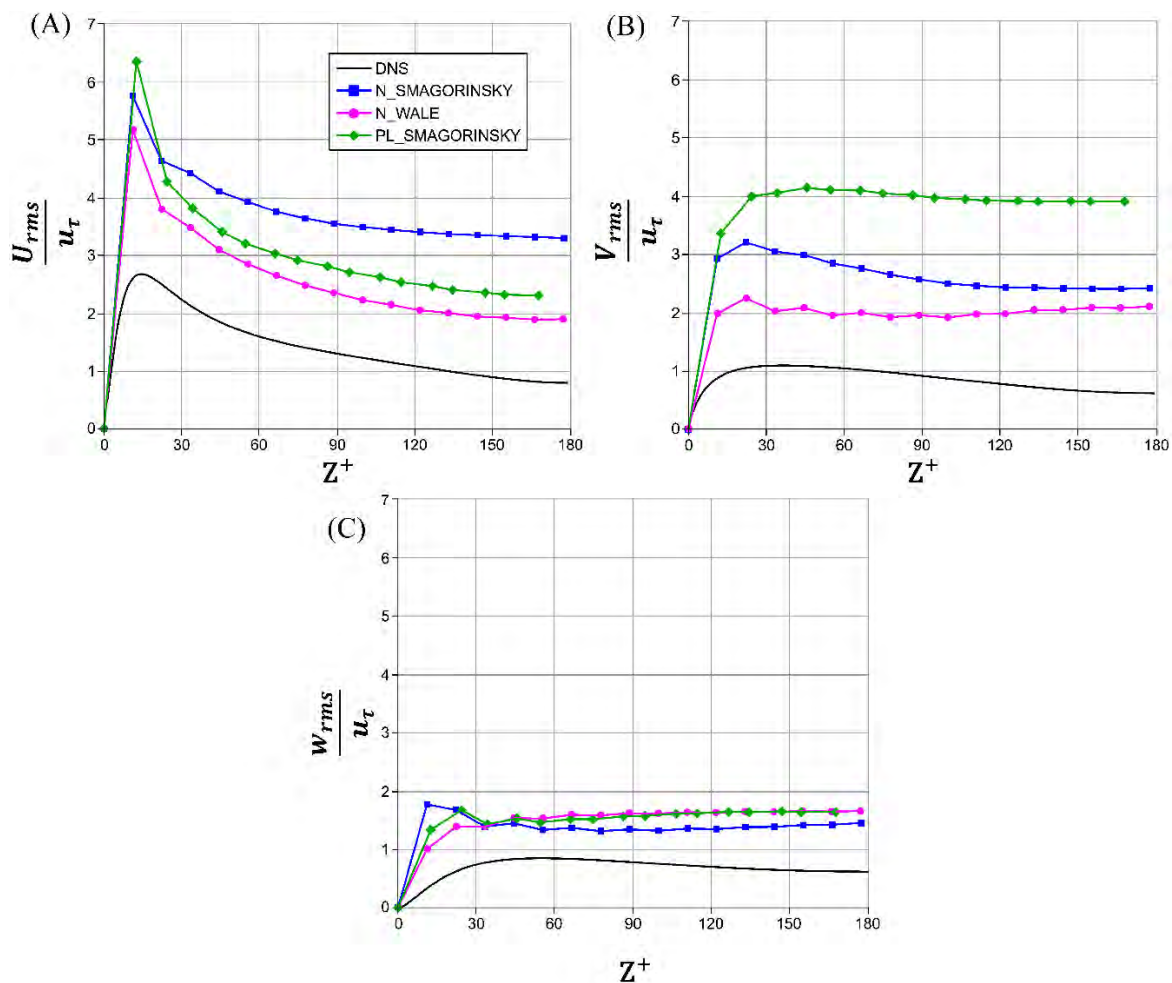


Figura 19. Componentes normales del tensor de Reynolds resuelto del fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.

Las componentes cortantes del tensor de Reynolds resuelto (R_{uv} , R_{uw} , R_{vw}) son presentadas en la Figura 20. Similar a lo realizado en las componentes normales, las componentes mostradas aquí han sido normalizadas por u_τ^2 . Además, a fin de ilustrar la contribución de cada componente al tensor de Reynolds, una misma escala ha sido utilizada en todos los perfiles. Nótese que, en los perfiles DNS Newtonianos, solo la componente que relaciona las fluctuaciones de velocidad en el *streamwise* y normal a la pared (Figura 20.B) muestra un pico mínimo en la vecindad de $Z^+ = 30$. Mientras que en los demás perfiles (Figura 20.A y Figura 20.C), un comportamiento constante igual a cero es mantenido. Esto implica que las fluctuaciones de velocidad en la dirección del

streamwise y normal a la pared son independientes de aquellas en el *spanwise* [54]. En un fluido no-Newtoniano con un índice de comportamiento menor a la unidad, la magnitud del perfil de esfuerzo cortante turbulento R_{uw}/u_τ^2 es reducida en comparación a su referente Newtoniano. Esto ocurre debido a la caída en la intensidad de las fluctuaciones normales a la pared W_{rms} [19].

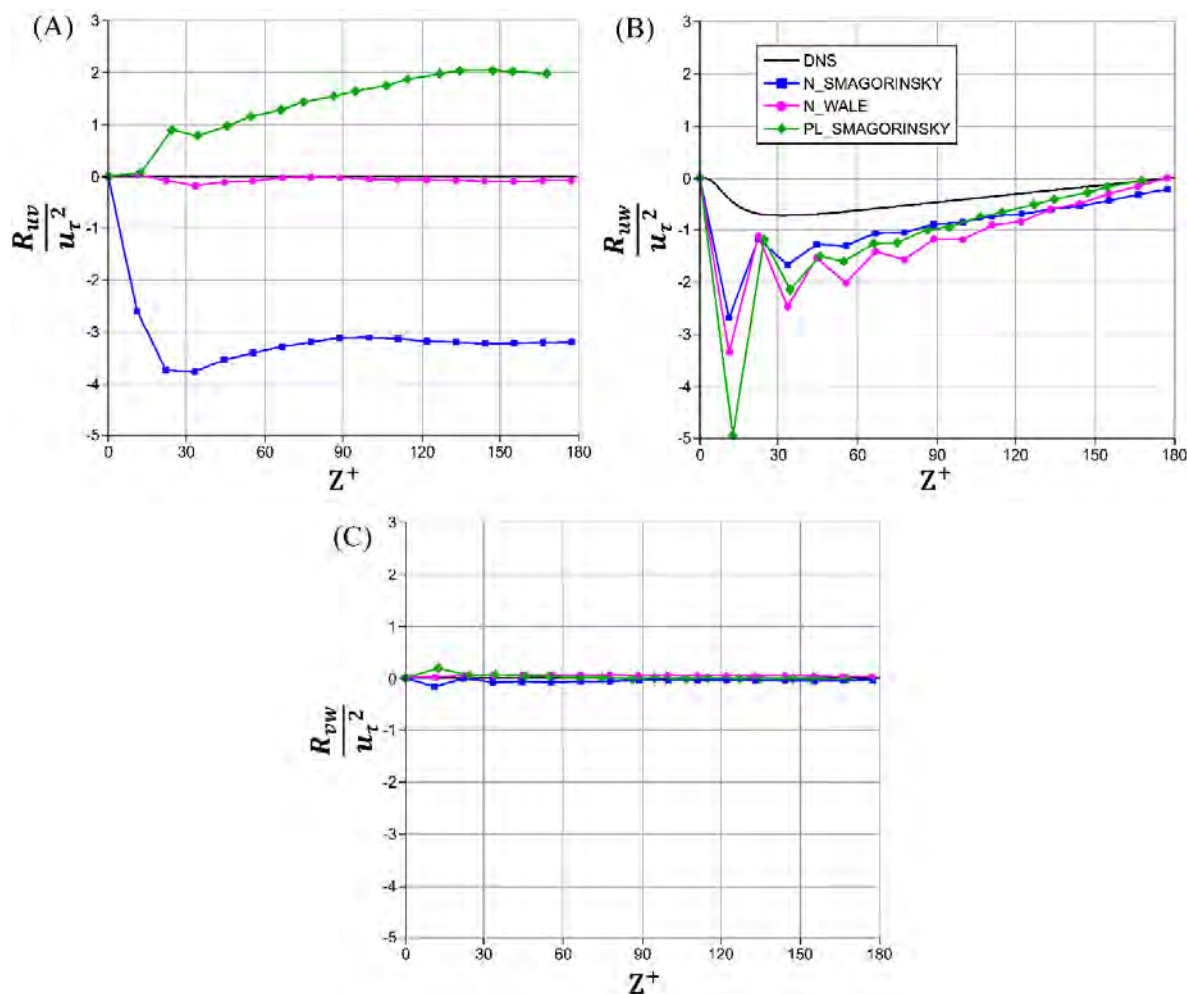


Figura 20. Componentes cortantes del tensor de Reynolds resuelto del fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.

En relación a los resultados Newtonianos de la Figura 20, el modelo Wale reproduce la tendencia esperada en el perfil de los tensores cruzados R_{uv}/u_τ^2 (Figura 20.A) y R_{vw}/u_τ^2 (Figura 20.C). Mientras que el modelo de Smagorinsky captó la pendiente esperada del perfil cruzado R_{uw}/u_τ^2 (Figura 20.B) en la región $30 < Z^+ < 180$. Nótese que la ubicación en Z^+ de los picos

de R_{uw}/u_τ^2 descritos por ambos modelos pertenecen a un rango $Z^+ < 30$ diferente al de la data DNS. En el resultado no-Newtoniano Power-law, las fluctuaciones de velocidad en el streamwise y spanwise R_{uv}/u_τ^2 (Figura 20.A) muestran aún una dependencia estadística. Lo contrario, es observado en el perfil de esfuerzo cortante R_{vw}/u_τ^2 (Figura 20.C) que, a pesar de tener un punto resuelto discordante, tiene la tendencia esperada. Por otro lado, con respecto al esfuerzo cortante R_{uw}/u_τ^2 , un perfil con menor magnitud de valores no fue obtenido.

4.3.3 Energía cinética turbulenta

La energía cinética turbulenta (TKE) asociada a los flujos de fluido Newtoniano y no-Newtoniano es mostrada en la Figura 21. Aquí, esta energía turbulenta es calculada a través de la traza del tensor de Reynolds, i.e. $TKE = 0.5(R_{uu} + R_{vv} + R_{ww})$. Además, al involucrar un producto de fluctuaciones, la normalización de esta variable es realizada mediante el valor de u_τ^2 . En el caso del fluido Newtoniano, es esperado un comportamiento del TKE similar a la data DNS incluida en esta figura; es decir, un pico máximo en la vecindad de $Z^+ = 15$. Mientras que, para un fluido no-Newtoniano del tipo *shear thinning*, debido al incremento de las fluctuaciones de velocidad en el streamwise, el valor del pico máximo es mayor a la de su referente Newtoniana alcanzada.

Como apreciado en la Figura 21, los perfiles de TKE del fluido Newtoniano obtenidos con ambos modelos de turbulencia, Smagorinsky y Wale, reproducen la tendencia esperada. Así como también la ubicación en Z^+ del valor pico deseado. Sin embargo, ambos modelos sobrestiman el valor de la energía cinética de las fluctuaciones. En relación al resultado no-Newtoniano Power-law, la tendencia de TKE descrita concuerda con el referente DNS Newtoniano y, además, el valor

de este perfil es mayor a su contraparte Newtoniano con el mismo modelo de turbulencia. Similar a los resultados Newtonianos, los valores TKE también han sido sobrestimados.

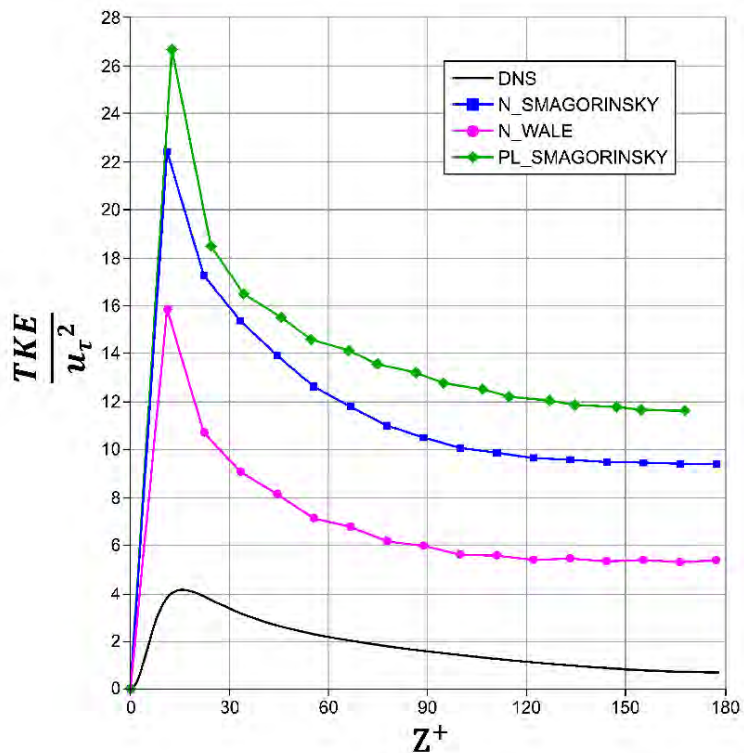


Figura 21. Energía cinética turbulenta resuelta del fluido Newtoniano (“N”) y no-Newtoniano Power-law (“PL”) utilizando los modelos LES.

CONCLUSIONES

En este trabajo, modelos de turbulencia basados en el enfoque de la simulación de las grandes escalas (LES), útiles en la simulación numérica de flujos turbulentos no-Newtonianos como los presentes en el transporte de pulpas minerales, fueron desarrollados. Estos modelos de turbulencia LES proporcionan el cierre al problema de clausura de Reynolds que ocurre en el proceso de filtraje de las ecuaciones gobernantes de estos flujos de interés. A través de los años, para fluidos Newtonianos, varios modelos de turbulencia LES con distinto grado de rigurosidad han sido planteados. Sin embargo, solamente algunos de estos modelos son utilizados en simulaciones numéricas de flujos no-Newtonianos. El desarrollo de los referidos modelos de turbulencia fue direccionado hacia el uso de modelos matemáticos con la capacidad de reproducir el comportamiento esperado del flujo en la región de pared, y con la facilidad de adaptarse al método de los elementos finitos (FEM) utilizado en la resolución de las ecuaciones gobernantes.

A pesar de los esfuerzos realizados para el desarrollo de los modelos de turbulencia LES, no ha sido posible desarrollar un modelo capaz de reproducir todas las características esperadas en los flujos de fluidos Newtonianos y no-Newtonianos estudiados. Además, diferencias significativas han sido observadas en los resultados cuantitativos, en especial en las estadísticas de más alto orden, i.e., el tensor de esfuerzos de Reynolds y la energía cinética turbulenta. Asimismo, es importante mencionar que el modelo de Vreman disipó, casi en totalidad, la energía del flujo turbulento Newtoniano, motivo por el cual este modelo no fue considerado en las simulaciones no-Newtonianas posteriores. Similarmente, el modelo Wale presentó problemas de estabilidad numérica cuando fue utilizado en flujos de fluidos no-Newtonianos. Trabajos pasados en LES han enfatizado problemas relacionados con el operador de filtraje que tiene en cuenta las características de la malla computacional y del método numérico empleados. Errores de discretización asociados

con el método numérico utilizado, los cuales pueden abrumar los efectos del modelo de turbulencia LES o reducir la precisión de los resultados, han sido también reportados. Por lo tanto, es concluido que queda aún trabajo por realizar para desarrollar modelos LES capaces de representar los comportamientos deseados en los flujos de interés considerados.

A fin de mejorar los resultados obtenidos en este trabajo, varias alternativas pueden ser exploradas. En general, estas alternativas apuntan al uso de una mayor cantidad de elementos finitos en el dominio computacional, específicamente en la región de pared de los flujos. Esto es debido al hecho de que la herramienta computacional usada en este trabajo aún está en fase de desarrollo, lo cual no ha permitido que la malla utilizada presente el refinamiento deseado. Entre las alternativas potenciales para la mejora de los resultados obtenidos aquí está también el mapeamiento de soluciones pasadas y la descomposición de dominio computacional. La primera de ellas utiliza algoritmos para interpolar campos resueltos (velocidad y presión, por ejemplo) de una malla más gruesa a una más refinada. Mientras que la segunda divide el dominio en cargas de trabajo iguales y reduce el número de incógnitas del sistema de ecuaciones resuelto.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Davy, A., & Tang-Lee, D. (2018). Social Progress in Mining-Dependent Countries: Analysis through the Lens of the SDGs. *International Council on Mining and Metal*.
- [2] Levesque, M., Millar, D., & Paraszczak, J. (2014). Energy and mining—the home truths. *Journal of cleaner production*, 84, 233-255.
- [3] Wu, J., Graham, L., Wang, S., & Parthasarathy, R. (2010). Energy efficient slurry holding and transport. *Minerals Engineering*, 23(9), 705-712.
- [4] Ministerio de Energía y Minas (MINEN). (2019). Balance Nacional de la Energía.
- [5] Fueyo, L. Equipos de Trituración Molienda y Clasificación: Tecnología. *Diseño y Aplicación (Edit. Rocas y Minerales Industriales, Madrid, 1999)*, 23-54.
- [6] Yeoh, G. H., & Tu, J. (2019). *Computational techniques for multiphase flows*. Butterworth-Heinemann.
- [7] Baha Abulnaga, P. E. (2021). *Slurry systems handbook*. McGraw-Hill Education.
- [8] Jacobs, B. E. (1991). *Design of slurry transport systems*. Crc Press.
- [9] Reddy, J. N., & Gartling, D. K. (2010). *The finite element method in heat transfer and fluid dynamics*. CRC press.
- [10] McCallen, R. C., Gresho, P. M., Leone Jr, J. M., & Kollmann, W. (1993). *Large-eddy simulation using the finite element method* (No. UCRL-JC-114593; CONF-940659-3). Lawrence Livermore National Lab., CA (United States).
- [11] Maza, D., & Carvalho, M. S. (2015). Transient response of two-layer slot coating flows to periodic disturbances. *AIChE Journal*, 61(5), 1699-1707.
- [12] Malin, M. R. (1997). Turbulent pipe flow of power-law fluids. *International communications in heat and mass transfer*, 24(7), 977-988.
- [13] Cruz, D. O. A., & Pinho, F. T. (2003). Turbulent pipe flow predictions with a low Reynolds number k- ϵ model for drag reducing fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 114(2-3), 109-148.
- [14] Ro, K., & Ryou, H. (2012). Development of the modified k- ϵ turbulence model of power-law fluid for engineering applications. *Science China Technological Sciences*, 55(1), 276-284.
- [15] Gnambo, P. S., Orlandi, P., Ould-Rouiss, M., & Nicolas, X. (2015). Large-eddy simulation of turbulent pipe flow of power-law fluids. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 54, 196-210.
- [16] Rudman, M., & Blackburn, H. M. (2006). Direct numerical simulation of turbulent non-Newtonian flow using a spectral element method. *Applied mathematical modelling*, 30(11), 1229-1248.
- [17] Rudman, M., & Blackburn, H. M. (2003). Turbulent pipe flow of non-Newtonian fluids. In *Computational Fluid Dynamics 2002* (pp. 687-692). Springer, Berlin, Heidelberg.

- [18] Singh, J., Rudman, M., Blackburn, H. M., Chryss, A., Pullum, L., & Graham, L. J. (2016). The importance of rheology characterization in predicting turbulent pipe flow of generalized Newtonian fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 232, 11-21.
- [19] Gavrilov, A. A., & Rudyak, V. Y. (2016). Direct numerical simulation of the turbulent flows of power-law fluids in a circular pipe. *Thermophysics and Aeromechanics*, 23(4), 473-486.
- [20] Jouybari, N. F., Engberg, B., & Persson, J. (2020). Large eddy simulation of turbulent pulp flow in a channel. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 285, 104409.
- [21] Molla, M. M., Hossain, A., Wang, B. C., & Kuhn, D. C. (2012). Large-eddy simulation of pulsatile non-Newtonian flow in a constricted channel. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 12(4), 231-242.
- [22] Ohta, T., & Miyashita, M. (2014). DNS and LES with an extended Smagorinsky model for wall turbulence in non-Newtonian viscous fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 206, 29-39.
- [23] Inagaki, M. (2021). Large eddy simulation of non-Newtonian viscous fluids with low grid dependency using an anisotropy-resolving subgrid-scale model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 295, 104603.
- [24] Arosemena, A. A., Andersson, H. I., & Solsvik, J. (2021). Turbulent channel flow of generalized Newtonian fluids at a low Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 908.
- [25] Arosemena, A. A., Andersson, R., Andersson, H. I., & Solsvik, J. (2021). Effects of shear-thinning rheology on near-wall turbulent structures. *Journal of Fluid Mechanics*, 925.
- [26] Dey, S., Ibtida, T., Roy, C. K., & Sakib, N. (2020). Difference between Non-Newtonian Carreau and Casson Blood Viscosity Models to Predict Hemodynamics in Idealized Eccentric Arterial Stenosis: Large Eddy Simulation Modeling.
- [27] Pope, S.B., *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [28] Reddy, J. N., & Gartling, D. K. (2010). *The finite element method in heat transfer and fluid dynamics*. CRC press.
- [29] Poinso, T., Veynante, D.: *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd edn. R. T. Edwards Inc. (2005).
- [30] Chhabra, R. P., & Richardson, J. F. (2011). *Non-Newtonian flow and applied rheology: engineering applications*. Butterworth-Heinemann.
- [31] Wang, C. H., & Ho, J. R. (2011). A lattice Boltzmann approach for the non-Newtonian effect in the blood flow. *Computers & Mathematics with Applications*, 62(1), 75-86.
- [32] Moukalled F, Mangani L, Darwish M (2016) *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab®*.
- [33] Abulnaga, B. E. (2002). *Slurry systems handbook*. McGraw-Hill.

- [34] Garnier, E., Adams, N., & Sagaut, P. (2009). *Large eddy simulation for compressible flows*. Springer Science & Business Media.
- [35] J. Ferziger and M. Peric, Computational methods for fluid dynamics, Springer, 1996.
- [36] Sagaut, P. (2006). Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction. Springer Science & Business Media.
- [37] Smagorinsky, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment. *Monthly weather review*, 91(3), 99-164.
- [38] Nicoud, F., & Ducros, F. (1999). Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, turbulence and Combustion*, 62(3), 183-200.
- [39] Vreman, A. W. (2004). An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. *Physics of fluids*, 16(10), 3670-3681.
- [40] Adams, N. (2007). Mathematics of Large Eddy Simulation of Turbulent Flows. By LC Berselli, T. Iliescu & WJ Layton. Springer, 2006.
- [41] Germano, M., Piomelli, U., Moin, P., & Cabot, W. H. (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3(7), 1760-1765.
- [42] Vreman, A. W., & Kuerten, J. G. (2014). Comparison of direct numerical simulation databases of turbulent channel flow at $Re_{\tau} = 180$. *Physics of Fluids*, 26(1), 015102.
- [43] Chhabra, R. P., Soares, A. A., & Ferreira, J. M. (2004). Steady non-Newtonian flow past a circular cylinder: a numerical study. *Acta Mechanica*, 172(1), 1-16.
- [44] Jouybari, N. F., Engberg, B., & Persson, J. (2020). Large eddy simulation of turbulent pulp flow in a channel. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 285, 104409.
- [45] Celis, C., Antoniou, A., Cuisano, J., Pillihuaman, A., & Maza, D. (2021). Experimental characterization of chalcopyrite ball mill grinding processes in batch and continuous flow processing modes to reduce energy consumption. *Journal of Materials Research and Technology*, 15, 5428-5444.
- [46] Smirnov, A., Shi, S., & Celik, I. (2001). Random flow generation technique for large eddy simulations and particle-dynamics modeling. *J. Fluids Eng.*, 123(2), 359-371.
- [47] Rodi, W., Constantinescu, G., & Stoesser, T. (2013). Large-eddy simulation in hydraulics.
- [48] Peralta, S., Cordova, J., Celis, C., & Maza, D. (2020, June). Development of an Object-Oriented Programming Tool Based on FEM for Numerical Simulation of Mineral-Slurry Transport. In International Conference on Computational Science (pp. 163-177). Springer, Cham.
- [49] Peralta, S., Córdoba, J., Celis, C., & Maza, D. (2020, November). Numerical Modelling of Mineral-Slurry Like Flows in a 3D Lid-Driven Cavity Using a Finite Element Method Based Tool. In ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition (Vol. 84584, p. V010T10A023). American Society of Mechanical Engineers.
- [50] Wang, C. Y. (1991). Exact solutions of the steady-state Navier-Stokes equations. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 23(1), 159-177.

- [51] Lavrov, A. (2015). Flow of truncated power-law fluid between parallel walls for hydraulic fracturing applications. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 223, 141-146.
- [52] Peralta, S., Córdova, J., Celis, C., & Maza, D. (2022). Parallel domain decomposition of a FEM based tool for mineral-slurry like flows numerical modeling. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* (En revisión).
- [53] Lumley, J. L. (1969). Drag reduction by additives. *Annual review of fluid mechanics*, 1(1), 367-384.
- [54] Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson education.
- [55] Peyret, R., & Krause, E. (Eds.). (2000). *Advanced turbulent flow computations* (pp. 110-254). Wien: Springer.



APÉNDICES

Apéndice A: Lista de publicaciones

1. Peralta, S., Cordova, J., Celis, C., & Maza, D. (2020, June). Development of an Object-Oriented Programming Tool Based on FEM for Numerical Simulation of Mineral-Slurry Transport. In International Conference on Computational Science (pp. 163-177). Springer, Cham.
2. Peralta, S., Córdoba, J., Celis, C., & Maza, D. (2020, November). Numerical Modelling of Mineral-Slurry Like Flows in a 3D Lid-Driven Cavity Using a Finite Element Method Based Tool. In ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition (Vol. 84584, p. V010T10A023). American Society of Mechanical Engineers.
3. Peralta, S., Córdoba, J., Celis, C., & Maza, D. (2022). Parallel domain decomposition of a FEM based tool for mineral-slurry like flows numerical modeling. International Journal of Computational Fluid Dynamics (En revisión).



Apéndice B: Filtraje LES de las ecuaciones gobernantes

En el modelamiento de la turbulencia del CAPÍTULO 2, las ecuaciones de conservación de la masa y cantidad de movimiento pasaron a través de una operación de filtraje. Además, a fin de incluir los efectos de la densidad variable, el concepto del filtro de Favre fue introducido. Por motivos de brevedad, las ecuaciones mencionadas fueron mostradas en su forma filtrada final. Aquí, el desarrollo de este proceso de filtraje ha sido incluido de manera detallada.

La ecuación de conservación de la masa considerada en este trabajo es presentada en su forma diferencial mediante la siguiente ecuación,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0. \quad (43)$$

Al realizar el proceso de filtraje de esta ecuación, el LHS (lado izquierdo) y el RHS (lado derecho) de esta son afectados por el filtro, i.e.,

$$\left\langle \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} \right\rangle_l = \langle 0 \rangle_l. \quad (44)$$

A partir de este momento, el uso de las propiedades fundamentales del filtro es necesario. En ese sentido, al aplicar la propiedad de linealidad [36] y la de conservación de constantes [36] en el LHS y el RHS de la ecuación (44), respectivamente, esta queda reducida a otra ecuación de la forma,

$$\left\langle \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle_l + \left\langle \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} \right\rangle_l = 0. \quad (45)$$

Luego, utilizando la propiedad de conmutación con derivación [36] en ambos términos del LHS de la ecuación (45), obtenemos,

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle_l}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho u_j \rangle_l}{\partial x_j} = 0 \quad (46)$$

Finalmente, hay un término en el LHS de la ecuación (46) que está asociado al filtraje de la ponderación de una variable por la densidad, i.e., $\langle \rho u_j \rangle_l$. Por lo que, a fin de resolver el sistema ecuaciones, es necesario reducir este término a un producto de variables filtradas. Esta reducción es obtenida a través del filtro de Favre, i.e. $\langle f(x, t) \rangle_L \langle \rho \rangle_l = \langle \rho f(x, t) \rangle_l$. Nótese la diferencia en los subíndices utilizados, donde L hace referencia al filtro de Favre. La aplicación del concepto de Favre en la ecuación (46) es presentada en la siguiente expresión,

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle_l}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_j \rangle_L}{\partial x_j} = 0 \quad (47)$$

El mismo proceso realizado en la ecuación de conservación de la masa puede ser usado en la de cantidad de movimiento. Aquí, a fin de evitar repetir lo ya mencionado, las ecuaciones desarrolladas no han sido comentadas.

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (48)$$

$$\left\langle \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} \right\rangle_l = \left\langle -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right\rangle_l, \quad (49)$$

$$\left\langle \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} \right\rangle_l + \left\langle \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} \right\rangle_l = -\left\langle \frac{\partial p}{\partial x_i} \right\rangle_l + \left\langle \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right\rangle_l, \quad (50)$$

$$\frac{\partial \langle \rho u_i \rangle_l}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho u_i u_j \rangle_l}{\partial x_j} = -\frac{\partial \langle p \rangle_l}{\partial x_i} + \frac{\partial \langle \tau_{ij} \rangle_l}{\partial x_j}, \quad (51)$$

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_i \rangle_L}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle_l \langle u_i u_j \rangle_L}{\partial x_j} = -\frac{\partial \langle p \rangle_l}{\partial x_i} + \frac{\partial \langle \tau_{ij} \rangle_l}{\partial x_j}, \quad (52)$$

En la ecuación (52) nótese que el término $\langle u_i u_j \rangle_L$ debe ser reducido para resolver el sistema de ecuaciones y, además, el término $\langle \tau_{ij} \rangle_l$ aún debe ser desarrollado.

La reducción del término $\langle u_i u_j \rangle_L$ comienza con la introducción de una variable ϕ , que en LES está conformado por una parte resuelta $\langle \phi \rangle_L$ y una parte sin resolver ϕ'' . Nótese que como en este caso la variable de interés es la velocidad, el filtro de Favre es utilizado. En ese sentido, el término $\langle u_i u_j \rangle_L$ es descompuesto hasta a una expresión de la forma,

$$\langle u_i u_j \rangle_L = \langle (\langle u_i \rangle_L + u_i'') (\langle u_j \rangle_L + u_j'') \rangle_L \quad (53)$$

$$\langle u_i u_j \rangle_L = \langle (\langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L + \langle u_i \rangle_L u_j'' + u_i'''' \langle u_j \rangle_L + u_i'' u_j'') \rangle_L \quad (54)$$

$$\langle u_i u_j \rangle_L = \langle \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L \rangle_L + \langle \langle u_i \rangle_L u_j'' \rangle_L + \langle u_i'''' \langle u_j \rangle_L \rangle_L + \langle u_i'' u_j'' \rangle_L. \quad (55)$$

En donde si restamos el término $\langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L$ en ambos lados de la ecuación (55), obtenemos que el término del LHS contiene la contribución de tres grupos, (i) los esfuerzos de Leonard L_{ij} , (ii) los esfuerzos cruzados C_{ij} , y (iii) los esfuerzos de Reynolds R_{ij} , respectivamente [54].

$$\begin{aligned} \langle u_i u_j \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L &= (\langle \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L) + (\langle \langle u_i \rangle_L u_j'' \rangle_L + \langle u_i'''' \langle u_j \rangle_L \rangle_L) \\ &+ \langle u_i'' u_j'' \rangle_L \end{aligned} \quad (56)$$

En los últimos años, debido al trabajo de Meinke et al. [55], el efecto de los esfuerzos L_{ij} y C_{ij} ha sido atribuido al tensor de esfuerzos de Reynolds R_{ij} . Por lo que la ecuación (56) queda reducida a la forma siguiente,

$$\tau_{ij}^{SGS} = (\langle u_i u_j \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L) = \langle u_i'' u_j'' \rangle_L. \quad (57)$$

El proceso de filtraje del tensor de esfuerzos viscosos filtrado $\langle \tau_{ij} \rangle_L$ es ahora realizado. Por lo que resulta necesario definir la ecuación asociada a este tensor,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) = \mu (\dot{\gamma}_{ij}). \quad (58)$$

Nótese que la viscosidad dinámica del flujo μ es dependiente de la densidad. De esta forma, al filtrar el término τ_{ij} de la ecuación (58) obtenemos,

$$\langle \tau_{ij} \rangle_l = \langle \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \rangle_l, \quad (59)$$

$$\langle \tau_{ij} \rangle_l = \langle \mu \rangle_l \left\langle \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right\rangle_L, \quad (60)$$

$$\langle \tau_{ij} \rangle_l = \langle \mu \rangle_l \left(\left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\rangle_L + \left\langle \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\rangle_L - \left\langle \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right\rangle_L \right), \quad (61)$$

$$\langle \tau_{ij} \rangle_l = \langle \mu \rangle_l \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle_L}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \langle u_k \rangle_L}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \quad (62)$$

Apéndice C: Aplicación de la hipótesis de Boussinesq en un enfoque LES

De acuerdo con la hipótesis de Boussinesq, la viscosidad turbulenta es matemáticamente análoga a la relación entre los esfuerzos y la tasa de deformación de un fluido Newtoniano [28].

Esta relación mencionada es descrita por la siguiente ecuación,

$$\tau_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (63)$$

en donde τ_{ij} es el tensor de esfuerzos, p es la presión, μ es la viscosidad dinámica del fluido, y δ_{ij} es la función delta Kronecker. Por lo que el tensor de esfuerzos de Reynolds τ_{ij}^{SGS} y la viscosidad turbulenta μ_{SGS} están relacionados a través de una expresión de la forma,

$$\tau_{ij}^{SGS} = -\langle p_{SGS} \rangle_l \delta_{ij} + \mu_{SGS} \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle_L}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \langle u_k \rangle_L}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (64)$$

$$\tau_{ij}^{SGS} = \langle u_i'' u_j'' \rangle_L, \quad (65)$$

en donde $\langle p_{SGS} \rangle_l$ es un término obtenido al igualar la traza de los tensores definidos a través de las ecuaciones (64) y (65), esto es,

$$tr(\tau_{ij}^{SGS}) = -3\langle p_{SGS} \rangle_l = \langle u_k'' u_k'' \rangle_L, \quad (66)$$

$$\langle p_{SGS} \rangle_l = -\frac{1}{3} \langle u_k'' u_k'' \rangle_L. \quad (67)$$

Por lo que la ecuación (64) queda reducida a una que es expresada como,

$$\tau_{ij}^{SGS} = \frac{1}{3} \langle u_k'' u_k'' \rangle_L + \mu_t \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle_L}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \langle u_k \rangle_L}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (68)$$

a partir de la cual, al reemplazar los términos $\tau_{kk}^{SGS} = \langle u_k'' u_k'' \rangle_L$ y $\langle S_{ij} \rangle_L = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle_L}{\partial x_i} \right)$, la relación final,

$$\tau_{ij}^{SGS} = \frac{1}{3} \tau_{kk}^{SGS} + 2\mu_t \left(\langle S_{ij} \rangle_L - \frac{1}{3} \langle S_{kk} \rangle_L \delta_{ij} \right), \quad (69)$$

es obtenida. Esta última ecuación es una similar a la presentada en [34].

