

**PONTIFICIA UNIVERSIDAD
CATÓLICA DEL PERÚ**

Escuela de Posgrado



Modelamiento numérico basado en el método de elementos finitos (FEM) de procesos de transporte de pulpas minerales en tuberías circulares horizontales

Tesis para obtener el grado académico de Magíster en Energía que presenta:

Sergio Pedro Peralta Ventocilla

Asesor:

Dr. Cesar Celis Perez

Co-asesor:

Dr. Danmer Maza Quiñonez

Lima, 2021

Resumen

El desarrollo de una herramienta computacional basada en el método de elementos finitos (FEM) para modelar numéricamente el proceso de transporte de pulpas minerales en tuberías circulares horizontales es el tema principal en este trabajo. Las pulpas minerales son consideradas aquí como un fluido monofásico con propiedades reológicas de fluidos no Newtonianos. La herramienta computacional es implementada siguiendo un paradigma de programación orientada a objetos, usando C++ como lenguaje de programación principal, y una metodología de descomposición de dominio para su paralelización. La referida herramienta es validada realizando simulaciones numéricas de múltiples casos de estudio involucrando flujos de fluidos Newtonianos y no Newtonianos. En esta etapa de validación, errores máximos de 3% en tuberías circulares horizontales transportando pulpas minerales reales son obtenidos. Luego de ser validada, la herramienta computacional es utilizada para estudiar parámetros importantes en el diseño de sistemas de transporte de pulpas minerales. Más específicamente, parámetros relativos a la viscosidad, grado de concentración de partículas, velocidad de la fase continua y caída de presión son particularmente analizados. El principal aporte de este trabajo es el desarrollo de una nueva herramienta computacional basada en FEM para modelar adecuadamente flujos viscosos no Newtonianos, permitiendo resolver problemas prácticos de diseño de tuberías circulares horizontales transportando pulpas minerales reales. Además, comparado con otros enfoques paralelos reportados en la literatura, el utilizado aquí es relativamente fácil de implementar en herramientas de dinámica de fluidos computacional. Así, otra de las contribuciones de este trabajo es el desarrollo de un algoritmo en paralelo adecuado para herramientas basadas en FEM que modelen pulpas minerales. Finalmente, otra de las contribuciones de este trabajo está asociada con el estudio numérico por primera vez de pulpas minerales reales recientemente caracterizadas en la literatura.

Palabras clave: Dinámica de fluidos computacional, método de elementos finitos, flujos de fluidos no Newtonianos, pulpas minerales, C++, computación en paralelo.

Dedicatoria

*A toda la familia Ventocilla Olaya, y en particular a Olga Isabel Ventocilla Olaya, mi madre,
por su infinito amor.*

*A mis abuelos, María Olga Olaya Zapata y Pedro Ventocilla Janampa.
Quienes en vida fueron mi ejemplo de bondad, honradez y trabajo duro.*

Agradecimientos

A mi asesor, Dr. Cesar Celis, por compartir su valioso conocimiento y experiencia en CFD conmigo. También le agradezco por su constante disposición de ayudarme durante todo el desarrollo del presente trabajo.

A mi co-asesor, Dr. Danmer Maza, por enseñarme el método FEM y compartir su valiosa experiencia conmigo.

A mis compañeros del grupo de investigación FPCE por su trabajo, recomendaciones, ayuda y amistad durante el desarrollo del trabajo.

A mis familiares y amigos por su apoyo incondicional.

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

Índice

Resumen	1
Dedicatoria	2
Agradecimientos	3
Lista de símbolos	8
Variables	8
Abreviaturas	9
Lista de tablas	11
Lista de figuras	12
Introducción	16
Antecedentes	16
Objetivo general	18
Objetivos específicos	18
Metodología	19
Alcance	20
Descripción de la tesis	21
Capítulo 1: Modelamiento matemático	22
1.1. Ecuaciones gobernantes	22
1.2. Condiciones de contorno e iniciales	23
1.3. Modelamiento reológico de pulpas minerales	24
1.3.1. Modelo de ley de potencia	25
1.3.2. Modelo Carreau-Yasuda	26
1.3.3. Modelo de ley de potencia truncado	26
Capítulo 2: Modelamiento numérico	27
2.1. El método de los elementos finitos	27
2.2. El método de Newton-Raphson	30
2.3. Discretización del término temporal	34

Capítulo 3: Implementación computacional.....	36
3.1. Contexto de implementación	36
3.2. Jerarquía de clases	37
3.2.1. Utilidades.....	38
3.2.2. Pre procesador	39
3.2.3. Propiedades del fluido	39
3.2.4. Malla computacional.....	40
3.2.5. Condiciones de contorno	41
3.2.6. Funciones base	42
3.2.7. Cuadratura Gaussiana.....	42
3.2.8. Clase principal	43
3.2.9. Post procesador	43
3.3. Implementación de herramienta FEM en paralelo.....	43
3.3.1. Partición del dominio	45
3.3.2. Algoritmo de comunicación.....	46
3.3.3. Condiciones de transmisión.....	49
Capítulo 4: Casos de estudio	52
4.1. Flujo laminar newtoniano entre placas paralelas infinitas.....	52
4.2. Flujo laminar no Newtoniano entre placas paralelas infinitas	53
4.3. Cavidad accionada por tapa	55
4.3.1. Descripción de la configuración	56
4.3.2. Cavidad 2D accionada por tapa con un fluido Newtoniano	57
4.3.3. Análisis de independencia de malla para cavidades 3D conteniendo fluidos Newtonianos y no Newtonianos.....	59
4.3.4. Perfiles de velocidad 2D vs 3D de cavidad accionada por tapa con un fluido Newtoniano.....	61
4.3.5. Cavidad 3D accionada por tapa con un fluido no Newtoniano ley de potencia	62

4.3.6.	Cavidad 3D accionada por tapa con un fluido no Newtoniano Carreau-Yasuda	65
4.3.7.	Cavidad 3D accionada por tapa con una pulpa mineral	68
4.4.	Cámara receptora de pulpas minerales	71
4.5.	Transporte de pulpas minerales reales	74
4.5.2.	Configuraciones canónicas del flujo	74
4.5.3.	Análisis de independencia de la malla y de paso de tiempo	76
4.5.4.	Propiedades reológicas de las pulpas minerales	78
4.5.5.	Resultados cualitativos	81
4.5.6.	Perfiles de velocidad de flujo y viscosidad aparente	82
4.5.7.	Caída de presión y velocidad en la línea de centro	84
4.5.8.	Desempeño en paralelo de la herramienta FEM	86
	Conclusiones	89
	Referencias Bibliográficas	91
	Apéndices	98
	Apéndice 1. Lista de publicaciones	98
	Artículos en revistas indexadas	98
	Publicaciones en actas de conferencias	98
	Apéndice 2. Coordenadas locales y funciones peso isoparametrizadas	99
	Coordenadas locales por elemento	99
	Funciones peso asociadas con la ecuación de conservación de cantidad de movimiento	99
	Funciones peso asociadas con la ecuación de conservación de la masa	101
	Apéndice 3. Archivos de entrada de la herramienta computacional	102
	Archivo de entrada de las condiciones de contorno	102
	Archivo de entrada de la descomposición de dominio FEM	103
	Archivo de entrada del módulo FEM	103
	Archivo de entrada del fluido	103

Archivo de entrada de la malla FEM	104
Archivo de entrada del Post procesador FEM.....	104
Archivo de entrada del modelo reológico	105
Archivo de entrada de la toma de estadísticas.....	105



Lista de símbolos

Variables

A	Arista de la cavidad cúbica accionada por la tapa.
a	Parámetro adimensional que describe el ancho de la región de transición entre la región de tasa de deformación cero y la de ley de potencia.
C^k	Vector que contiene los campos resueltos de velocidades y presiones.
CFL	Número de Courant-Friedrichs-Levy.
g	Término fuerza de cuerpo.
J	Matriz jacobiana del vector residuo.
K	Índice de consistencia.
M	Matriz masa o de consistencia.
NGP	Número de puntos de Gauss.
N_{subd}	Número de subdominios.
$NeighborID$	Vector de subdominios vecinos.
n	Índice de comportamiento.
\hat{n}	Vector normal a un contorno.
P	Presión mecánica del fluido, Pa.
PG	Puntos de Gauss.
R	Función residuo entre la solución exacta de la ecuación diferencial y la solución aproximada de dimensión finita.
\mathbf{R}	Vector de funciones residuo.
Re	Número de Reynolds.
T	Tensión sobre el fluido.
t	Tiempo, s.
U_{mean}	Velocidad media.
u	Componente de la velocidad en el eje x.
u_b	Velocidad de la tapa de la cavidad cúbica.
v	Componente de la velocidad en el eje y.
\vec{V}	Vector velocidad.
w	Componente de la velocidad en el eje z.
Γ	Contorno de un dominio.
$\dot{\gamma}$	Tasa de deformación, 1/s.

Δt	Paso de tiempo, s .
ΔX_i	Desplazamiento espacial de un límite del dominio a otro.
δ_{ij}	Función delta de Kronecker.
η	Viscosidad dinámica aparente.
λ	Tiempo de relajación del fluido, s .
μ	Viscosidad dinámica del fluido.
μ_0	Viscosidad dinámica a una tasa de deformación cero.
μ_∞	Viscosidad dinámica a una tasa de deformación infinito.
ξ	Coordenada isoparametrizada.
ρ	Densidad del fluido.
σ_{ij}	Tensor de esfuerzo de Cauchy.
τ	Esfuerzo de corte.
χ	Sub-espacio de funciones peso relacionadas con la conservación de la masa.
ψ	Sub-espacio de funciones peso relacionadas con la conservación de cantidad de movimiento.
Ω	Dominio computacional.
ω	Sub-espacio de funciones peso.

Abreviaturas

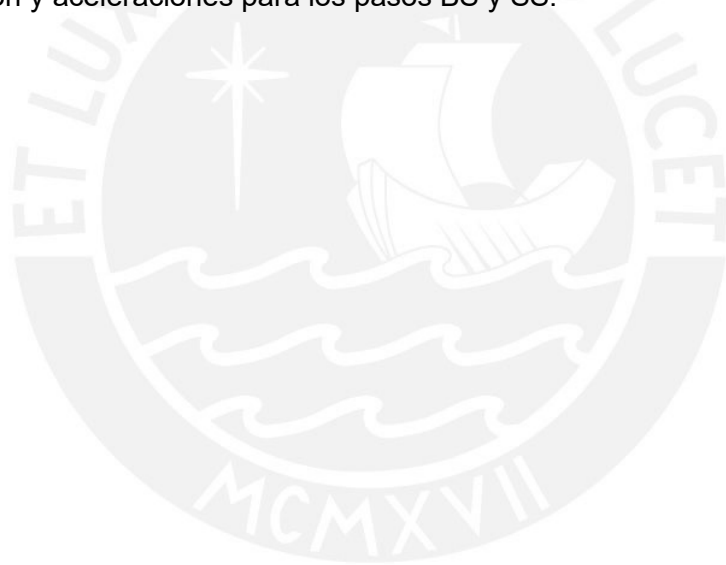
CFD	Dinámica de fluidos computacional.
CF	Flujo en un canal.
CT	Tubo circular.
CY	Modelo Carreau-Yasuda.
D	Diámetro.
DDM	Método de descomposición de dominios.
FEM	Método de los elementos finitos.
FVM	Método de los volúmenes finitos.
GASM	Método aditivo de Schwarz generalizado.
GMRSE	Método de residuo mínimo generalizado.
H	Altura.
L	Largo.
MPI	Message Passing Interface.

NRMSE	Error medio cuadrático normalizado.
OOP	Programación orientada a objetos.
PD	Caída de presión .
PL	Modelo de ley de potencia.
PSD	Distribución del tamaño de partícula en una pulpa.
RMSE	Error medio cuadrático medio.
TC	Condiciones de transmisión.
VC	Velocidad en el centro del dominio.
W	Ancho.



Lista de tablas

Tabla 1. Argumentos ξ y pesos de Gauss PG para $NGP = 3$ usados en este trabajo para hacer las integraciones numéricas [29].	29
Tabla 2. Valores de los parámetros para el modelo de Carreau Yasuda [25].	66
Tabla 3. Parámetros geométricos de las configuraciones canónicas	75
Tabla 4. Condiciones de contorno de las configuraciones canónicas.	76
Tabla 5. Coeficientes materiales del modelo Carreau-Yasuda según [8].	79
Tabla 6. Coeficientes materiales del modelo de ley de potencia según [7].	79
Tabla 7. Costos computacionales de los pasos MP, BS y SS del Algoritmo 1 como porcentajes del costo computacional total de las iteraciones de Newton-Raphson y aceleraciones para los pasos BS y SS.	88



Lista de figuras

Figura 1. Representación esquemática del comportamiento de un fluido pseudo plástico [5].	25
Figura 2. Elemento finito tri cuadrático y enumeración de sus nodos.	29
Figura 3. Esquema gráfico del método de Newton-Raphson [29].	31
Figura 4. Módulos principales del CFLOWSS (Complex FLOWS Solver).	37
Figura 5. Jerarquía de clases del módulo FEM.	38
Figura 6. Etapas generales de los métodos de descomposición de dominio (DDM) para propósitos de paralelismo, adaptado de [17].	44
Figura 7. Descomposición de un dominio tri dimensional en forma de paralelepípedo.	46
Figura 8. Identificación de vecinos para un subdominio en forma de paralelepípedo arbitrario.	48
Figura 9. Esquema de algoritmo de condiciones de transmisión para dos subdominios contiguos.	51
Figura 10. (a) Geometría tomada en cuenta para calcular los flujos laminares Newtonianos entre dos placas paralelas infinitas. (b) Perfiles de velocidad x sobre una línea recta paralela al eje y obtenidos analítica y numéricamente utilizando la herramienta computacional basada en FEM.	53
Figura 11. Perfiles de velocidad de flujos no Newtonianos obtenidos utilizando los modelos de ley de potencia, Carreau-Yasuda y ley de potencia truncado a diferentes gradientes de presión. (a) 1 Pa / m, (b) 5 Pa / m, (c) 75 Pa / m.	54
Figura 12. Dominio computacional de cavidad tridimensional accionada por tapa y malla computacional.	56
Figura 13. (a) RMSE vs número de elementos de malla. Contornos de velocidad en una cavidad cuadrada bidimensional impulsada por una tapa y patrones de línea de flujo calculados por la herramienta basada en FEM para (b) $Re=100$ y (c) $Re=400$.	58
Figura 14. (a) velocidades u a lo largo de la línea vertical y (b) velocidades v a lo largo de la línea horizontal que pasa por el centro geométrico de la cavidad cuadrada para $Re = 100$ y $Re = 400$.	59

Figura 15. RMSE versus Número de elementos de malla para una cavidad 3D accionada por tapa conteniendo un fluido Newtoniano.	60
Figura 16. RMSE versus Número de elementos de malla para una cavidad 3D accionada por tapa conteniendo un fluido no Newtoniano. (Modelo reológico: ley de potencia).	61
Figura 17. Perfil de velocidad de flujo de fluido Newtoniano en $Re = 100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.	62
Figura 18. Perfil de velocidad de flujo de fluido Newtoniano en $Re = 100$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.	62
Figura 19. Perfil de velocidad de flujo de fluido no Newtoniano modelado con el modelo ley de potencia en $Re=400$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.	63
Figura 20. Perfil de velocidad de flujo de fluido no Newtoniano modelado con el modelo ley de potencia en $Re=400$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.	64
Figura 21. Perfiles de velocidad en función del índice de consistencia de tres fluidos no Newtonianos modelados con el modelo ley de potencia en $Re=100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.	65
Figura 22. Perfiles de velocidad en función del índice de consistencia de tres fluidos no Newtonianos modelados con el modelo ley de potencia en $Re = 100$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.	65
Figura 23. Perfiles de velocidad en función del índice de consistencia de cuatro fluidos no Newtonianos modelados con el modelo Carreau-Yasuda en $Re=100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.	66
Figura 24. Perfiles de velocidad en función del índice de consistencia de cuatro fluidos no Newtonianos modelados con el modelo Carreau-Yasuda en $Re=100$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.	67
Figura 25. Perfiles de velocidad en función del tiempo de relajación de cuatro fluidos no Newtonianos modelados con el modelo Carreau-Yasuda en $Re=100$	67

a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

Figura 26. Perfiles de velocidad en función del tiempo de relajación de cuatro fluidos no Newtonianos modelados con el modelo Carreau-Yasuda en $Re=100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

68

Figura 27. Líneas de corriente en una cavidad cúbica impulsada por la tapa (izquierda) y contornos de velocidad a lo largo del plano de simetría (derecha) para flujos similares a pulpas minerales modelados como fluidos Newtonianos (superior) y no Newtonianos con el modelo ley de potencia (inferior).

70

Figura 28. Perfil de velocidad de flujo similar a pulpa mineral modelado con el modelo ley de potencia para $Re=100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad impulsada por la tapa cúbica.

71

Figura 29. Perfil de velocidad de flujo similar a una pulpa mineral modelado con el modelo ley de potencia en $Re=100$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

71

Figura 30. (a) Configuración geométrica de la cámara receptora de pulpa mineral (unidades en mm). (b) RMSE versus número de elementos de malla.

72

Figura 31. Contornos de velocidad y patrones de línea de corriente que caracterizan los flujos Newtonianos ($n = 1.0$) ((a) a (c)) y de pulpas minerales ($n = 0.4$) que pasan a través de la cámara receptora para las posiciones de salida Y de 0 mm ((a), (d)), 200 mm ((b), (e)) y 400 mm ((c), (f)). (g) Caída de presión versus posición relativa de salida para diferentes velocidades de entrada impuestas y propiedades reológicas. (h) Caída de presión versus velocidad de entrada a la cámara receptora para flujos Newtonianos y de pulpas minerales en $Y = 250$ mm.

73

Figura 32. Dominios computacionales: flujo en un canal entre dos placas paralelas (izquierda) y tubo circular (derecha).

75

Figura 33. Perfiles de velocidad en la línea central a lo largo del eje z en comparación con sus correspondientes soluciones analíticas. (a) CF y (b) CT.

78

Figura 34. Distribución de tamaño de partícula (PSD) caracterizando las pulpas minerales discutidas en [7] y [8].

79

Figura 35. Resultados de viscosidad aparente vs tasa de deformación obtenidos de las pruebas reológicas de las pulpas minerales discutidas en [7] y [8].	80
Figura 36. Campos de velocidad que caracterizan las configuraciones de flujo de CF (izquierda) y CT (derecha) obtenidos con las 4 pulpas minerales CY estudiadas. De abajo hacia arriba, concentraciones en peso de sólido en peso de 50, 60, 66 y 70 %.	81
Figura 37. Perfiles de velocidad normalizados a lo largo de la línea central paralela al eje Z. (a) CF y (c) CT con pulpas minerales Carreau-Yasuda. (b) CF y (d) CT con pulpas minerales de ley de potencia.	82
Figura 38. Perfiles de viscosidad aparente normalizados a lo largo de la línea de centro paralela al eje z. (a) CF y (c) CT con pulpas minerales Carreau-Yasuda. (b) CF y (d) CT con pulpas minerales ley de potencia.	85
Figura 39. Caída de presión a lo largo del eje x y velocidad del flujo en el centro geométrico de (a) CF y (b) CT, cuando pulpas minerales tipo Carreau-Yasuda y ley de potencia son transportadas.	86
Figura 40. Desempeño en paralelo de simulaciones numéricas involucrando el transporte de pulpas minerales Carreau-Yasuda en el CF y CT con un 70% de concentración en peso de sólidos. (a) Escalamiento y (b) Eficiencia en paralelo en función del número de procesadores utilizados en las simulaciones.	87

Introducción

Antecedentes

La minería en el Perú es uno de los principales sectores económicos que contribuye al desarrollo del país. De hecho, importantes cantidades de minerales son exportados desde el Perú. Durante el 2020, por ejemplo, Perú ocupó el segundo lugar en la producción mundial de cobre y plata, tercero en zinc, y cuarto en plomo, estaño y molibdeno [1]. Debido a la gran envergadura de este sector, las compañías mineras continuamente asignan muchos recursos para optimizar los procesos asociados a la extracción de minerales. Esto ocurre porque los costos energéticos y las emisiones de gases de efecto invernadero pueden ser significativamente reducidos a través de la referida optimización. El transporte de pulpas minerales a través de tuberías es un proceso esencial en plantas concentradoras de minerales [2]. Asimismo, procesos de transporte y molienda de pulpa mineral son los que consumen la mayor cantidad de energía en el procesamiento de minerales [3]. Por lo tanto, a fin de reducir los costos energéticos y emisiones contaminantes asociados, esfuerzos necesitan ser realizados para optimizar las operaciones relativas al transporte de pulpas minerales. En particular, las pulpas minerales deben ser cuidadosamente caracterizadas y estudiadas.

Las pulpas minerales pueden ser físicamente descritas como mezclas bifásicas de un fluido portador (agua, generalmente) junto con sólidos suspendidos (rocas con minerales) [4]. Parámetros relativos a la viscosidad, grado de concentración de sólidos, velocidad de la fase continua y caída de presión de la mezcla son considerados como parámetros clave para el diseño de sistemas de transporte de estos fluidos [5]. En muchas situaciones, estas pulpas minerales pueden ser modeladas numéricamente de forma satisfactoria utilizando principios de la mecánica del continuo, con propiedades reológicas de fluidos no-Newtonianos [6]. Ejemplos de la caracterización reológica de pulpas minerales reales pueden ser encontrados en [7] y [8].

Métodos avanzados de modelamiento numérico y simulación basada en dinámica de fluidos computacional (CFD) son usados en las nuevas prácticas de ingeniería para estudiar procesos de transporte de fluidos complejos [9]. El CFD es continuamente utilizado en distintas industrias para implementar soluciones de ingeniería [10], y la minería no es la excepción [11]. Una revisión bibliográfica de las diferentes aplicaciones de CFD en el sector minero es presentada por Xu et al. [12]. Ventilación minera, combustión espontánea, control

de polvos y procesamiento de minerales son algunos ejemplos mencionados en el referido trabajo. En la práctica, experimentos en laboratorios, o a gran escala, pueden ser también utilizados para estudiar los procesos de extracción de minerales. Sin embargo, comparado con los experimentos en laboratorios, el CFD permite realizar experimentos numéricos a un menor costo, con una razonable exactitud y poca incertidumbre [12].

Herramientas computacionales de CFD están usualmente estructuradas en torno a algoritmos numéricos que pueden resolver diversos problemas de flujo de fluidos [13]. El método de los elementos finitos (FEM) constituye uno de los enfoques numéricos referidos [14]. La ejecución de experimentos numéricos de flujos complejos, como lo son las pulpas minerales, utilizando herramientas de CFD basadas en FEM, puede demandar cantidades importantes de recursos computacionales y tiempos de ejecución prolongados. Para obtener resultados numéricos fiables en el menor tiempo computacional posible, y maximizar el uso de los recursos computacionales involucrados, las herramientas computacionales basadas en FEM deben poder compilarse (transformarse de código fuente a lenguaje de máquina). De esta forma, un paradigma de programación adecuado debe ser primero seleccionado antes de implementar una herramienta computacional CFD basada en FEM. La programación orientada a objetos (OOP) ha sido elegida en el pasado para llevar a cabo la implementación de algunos códigos basados en FEM [15]. También, como destacan Chen et al. [16], el aumento de la potencia computacional generalmente es logrado aumentando el número de procesadores de la computadora, no necesariamente con procesadores más rápidos. Por lo tanto, actualmente, la mayoría de los algoritmos computacionales son implementados en paralelo para aprovechar múltiples unidades (núcleos) de procesamiento. Un aspecto particular que influye directamente en el rendimiento de la computación paralela es la escalabilidad del código. La escalabilidad puede ser entendida como la distribución de una carga de trabajo relativamente constante por procesador, en cuyo caso, la carga de trabajo total que podría ser realizada aumentaría con la cantidad de procesadores [14]. Por lo tanto, cuando es necesario resolver numéricamente problemas complejos como el de transporte de pulpas minerales, mejorar la escalabilidad de una herramienta de CFD es crucial.

Existen múltiples abordajes y metodologías para implementar en paralelo una herramienta CFD basada en FEM. Sin embargo, el método de descomposición de dominio (DDM) es el más comúnmente utilizado hoy en día [14]. El DDM consiste en descomponer un dominio computacional en subdominios y distribuir el trabajo asociado en entornos paralelos [17].

Una revisión completa de la aplicación de DDM en varios problemas de flujo, incluidos los flujos multifásicos y no Newtonianos, es presentada en [18]. Aproximadamente 400 referencias involucrando esfuerzos de DDM realizados en los últimos 40 años fueron revisados en ese trabajo. Según lo indicado en [18], los algoritmos de los DDM pueden basarse en actualizaciones iterativas de las condiciones de contorno en las interfaces entre subdominios, las llamadas condiciones de transmisión [19].

El desarrollo de una herramienta computacional basada en FEM para modelar numéricamente el proceso de transporte de pulpas minerales en tuberías circulares horizontales es el tema principal en este trabajo. Las pulpas minerales son consideradas como un fluido monofásico con propiedades reológicas de fluidos no Newtonianos. La herramienta computacional es implementada siguiendo un paradigma de OOP y una metodología de descomposición de dominio para su paralelización. La referida herramienta es validada a través de la realización de simulaciones numéricas de alta fidelidad de múltiples casos de estudio involucrando flujos de fluidos Newtonianos y no Newtonianos. Luego de ser validada, la herramienta computacional es utilizada para estudiar parámetros importantes en el diseño de sistemas de transporte de pulpas minerales. Más específicamente, parámetros relativos a la viscosidad, grado de concentración de partículas, velocidad de la fase continua y caída de presión son particularmente analizados. La herramienta FEM desarrollada permite resolver problemas prácticos de diseño de tubos circulares horizontales transportando pulpas minerales, como el cálculo de la energía para mover un caudal dado de pulpa mineral, evitando la necesidad de usar expresiones empíricas poco confiables.

Objetivo general

- Modelar numéricamente procesos de transporte de pulpas minerales en tuberías circulares horizontales mediante el uso del método de elementos finitos (FEM).

Objetivos específicos

- Desarrollar un modelo computacional capaz de simular flujos laminares bidimensionales de fluidos Newtonianos y no Newtonianos.
- Extender el modelo computacional desarrollado de forma que permita simular flujos laminares tridimensionales de fluidos Newtonianos y no Newtonianos.
- Implementar en paralelo el modelo computacional desarrollado para reducir el tiempo computacional de las simulaciones numéricas de pulpas minerales.

- Utilizar el modelo computacional desarrollado para simular procesos de transporte de pulpas minerales reales en tuberías circulares horizontales.

Metodología

La metodología seguida para alcanzar los objetivos propuestos en este trabajo es presentada a continuación.

Revisión bibliográfica: La revisión bibliográfica fue continua durante todo el proyecto. Aun así, la mayor parte de esta fue realizada en la primera etapa del proyecto. Conceptos básicos de la mecánica de fluidos fueron revisados [20]. Procesos de familiarización con conceptos avanzados de flujos multifásicos fueron realizados a continuación. En particular, diferentes métodos de discretización numérica fueron evaluados de forma a seleccionar el método adecuado para la implementación del modelo computacional propuesto aquí. Trabajos anteriores disponibles en la literatura discutiendo modelos numéricos de pulpas minerales, incluyendo partículas sólidas en la fase continua, fueron revisados de forma a determinar el estado del arte relativo al modelamiento de este tipo de flujos. Adicionalmente, procesos de familiarización con técnicas y lenguajes de programación orientada a objetos y algoritmos de paralelismo fueron realizados para implementar el modelo computacional propuesto en este trabajo.

Desarrollo de modelo computacional para flujos laminares bidimensionales: Un primer modelo computacional para simular flujos bidimensionales (2D) a través de tuberías horizontales fue desarrollado en la segunda etapa del proyecto. Flujos laminares, bidimensionales e incompresibles fueron inicialmente considerados. El método de los elementos finitos fue usado para la discretización. La primera versión del modelo fue desarrollada usando un software matemático comercial [21]. El modelo numérico fue luego implementado usando C++ como lenguaje de programación principal [22]. Fluidos Newtonianos y no Newtonianos fueron simulados con el primer modelo mencionado. Los modelos fueron implementados en un entorno de programación basado en códigos de fuente abierta. El hardware utilizado estuvo disponible en la PUCP.

Extensión de modelo computacional para casos involucrando flujos tridimensionales laminares: El modelo computacional básico fue luego extendido para simular flujos de fluidos de forma más realista, es decir, flujos tridimensionales (3D) y no estacionarios. Esto es requerido pues el transporte de pulpas minerales en tubos circulares horizontales con regímenes no necesariamente estacionarios es considerado. En esta etapa del trabajo, la

precisión de la herramienta computacional fue verificada con configuraciones canónicas ampliamente estudiadas en la literatura.

Implementación del modelo computacional con algoritmos en paralelo para poder

usar múltiples procesadores: En una etapa de implementación adicional, el modelo computacional fue mejorado con algoritmos de paralelización. De los muchos abordajes reportados en la literatura, DDM con condiciones de transmisión en los contornos entre subdominios fue seleccionado [18]. A fin de verificar el aprovechamiento de múltiples procesadores durante las simulaciones numéricas, el desempeño en paralelo de la herramienta computacional fue evaluado. Los principales resultados obtenidos con el modelo computacional desarrollado en esta etapa fueron enviados para revisión y publicación en una revista científica (ver Apéndice 1).

Realización de estudios paramétricos con el modelo computacional desarrollado:

Finalmente, varios estudios paramétricos enfocados en cuantificar el consumo de energía en los procesos de transporte de pulpas minerales reales fueron realizados. Más específicamente, parámetros importantes en el diseño de transporte de pulpas minerales relativos a la viscosidad, grado de concentración de partículas, velocidad de la fase continua y caída de presión fueron analizados.

Alcance

El desarrollo de una herramienta computacional basada en FEM para modelar numéricamente el proceso de transporte de pulpas minerales en tuberías circulares horizontales es principalmente abordado en este trabajo. Únicamente, el transporte de pulpas minerales en régimen laminar es considerado aquí. La pulpa mineral es modelada como un fluido monofásico con propiedades reológicas no Newtonianas [6]. La caracterización de las propiedades reológicas de las pulpas minerales no es objeto de estudio en este trabajo. Para realizar las simulaciones numéricas en este trabajo, pulpas minerales de operaciones reales ya caracterizadas fueron seleccionadas de la literatura. Además, solamente flujos de pulpas minerales isotérmicos son considerados aquí. La fluidodinámica del transporte de pulpas minerales es únicamente estudiada. Es decir, la interacción fluido-estructura no es objeto de estudio aquí. A fin de validar los resultados obtenidos, múltiples configuraciones de flujo han sido simuladas numéricamente con la herramienta computacional desarrollada. Incluso cuando existen otros parámetros importantes en el diseño de sistemas de transporte de pulpas minerales [5], solo parámetros

relativos a la viscosidad, grado de concentración de partículas, velocidad de la fase continua y caída de presión son considerados en este trabajo.

Descripción de la tesis

De acuerdo con los objetivos de este trabajo, en el Capítulo 1, el modelamiento matemático es primero descrito. En particular, las ecuaciones gobernantes y las condiciones de contorno son primero expuestas. El modelamiento reológico de pulpas minerales es también detallado en este capítulo. El abordaje particular para resolver numéricamente las ecuaciones gobernantes es discutido en el Capítulo 2. FEM, el método de Newton-Raphson y la discretización temporal son principalmente tratados en este capítulo. El Capítulo 3 está enfocado en describir los detalles de la implementación de la herramienta computacional desarrollada en este trabajo. En particular, el paradigma de programación orientado a objetos, así como los algoritmos para la implementación en paralelo son discutidos con rigurosidad en este capítulo. Los principales casos de estudio, con los resultados obtenidos con la herramienta computacional basada en FEM, son finalmente presentados y analizados en el Capítulo 4. Los primeros casos de estudio están relacionados con la fase de validación de la herramienta computacional. En las últimas secciones del Capítulo 4, los resultados de las simulaciones numéricas que implican el transporte de pulpas minerales reales en tubos circulares horizontales son mostrados y discutidos.

Capítulo 1: Modelamiento matemático

El modelamiento matemático asociado al transporte de pulpas minerales utilizado en este trabajo es descrito en este capítulo. En la Sección 1.1, las ecuaciones gobernantes de flujos de fluidos Newtonianos son expuestas primero. Luego, las condiciones de contorno que deben ser impuestas a estas ecuaciones para resolverlas son tratadas en la Sección 1.2. Finalmente, el modelamiento reológico de pulpas minerales considerado en este trabajo es mostrado y discutido en la Sección 1.3.

1.1. Ecuaciones gobernantes

Las formas diferenciales de las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento son ampliamente utilizadas para estudiar en detalle flujos de fluidos [20]. En este trabajo, flujos tridimensionales, laminares, en régimen no estacionario e incompresibles son considerados. De acuerdo con ello, las ecuaciones que gobiernan el transporte de estos flujos tienen la siguiente forma,

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-P \delta_{ij} + \eta(\dot{\gamma}) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \rho g_i. \quad (2)$$

Las ecuaciones (1) y (2), las cuales representan ecuaciones diferenciales parciales de la conservación de masa y cantidad de movimiento, respectivamente [14], describen las variaciones espaciales (x) y temporales (t) de la velocidad del fluido u , y la presión mecánica P . Note que estas ecuaciones han sido formuladas considerando un sistema de coordenadas cartesiano, en un marco de referencia Euleriano y según la notación indicial [23]. En estas ecuaciones, ρ , $\eta(\dot{\gamma})$, δ_{ij} y g_i representan, respectivamente, densidad del fluido, viscosidad dinámica aparente en función de la tasa de deformación, función delta de Kronecker y fuerza de cuerpo. Nótese que para los fluidos Newtonianos η ya no es función de $\dot{\gamma}$. De hecho, η es, en ese caso, igual a la viscosidad dinámica μ .

Como fue señalado en la Introducción, para validar el modelo matemático durante las diferentes etapas del desarrollo de la herramienta computacional, en este trabajo, múltiples configuraciones asociadas al flujo de fluidos han sido consideradas. Las ecuaciones (1) y (2) son, en consecuencia, modificadas en función de la configuración particular estudiada. Por ejemplo, algunas de estas configuraciones analizadas son bidimensionales. Note ahora que las ecuaciones (1) y (2) están escritas en notación indicial y por lo tanto son válidas

también para configuraciones en 2D. Otras configuraciones son estacionarias, es decir, u y P no tienen variaciones temporales. En esta situación, el término temporal $\frac{\partial u_i}{\partial t} = 0$. Las distintas configuraciones de flujo que aquí son estudiadas no tienen otras variaciones en las ecuaciones gobernantes. Sin embargo, dichas configuraciones varían significativamente unas de las otras con respecto a las condiciones de contorno e iniciales impuestas para su resolución. En la siguiente sección, las distintas condiciones de contorno e iniciales utilizadas en este trabajo son presentadas.

1.2. Condiciones de contorno e iniciales

Para resolver adecuadamente las ecuaciones (1) y (2), condiciones de contorno e iniciales deben ser impuestas. Las condiciones de contorno de un problema involucrando flujos de fluidos viscosos pueden ser de 2 tipos [14]:

- Condiciones de contorno de Dirichlet o esenciales: el valor de alguna variable principal de las ecuaciones gobernantes, generalmente la velocidad, es especificado en el contorno del dominio.
- Condiciones de contorno de Neumann o naturales: el valor de la derivada de alguna variable principal de las ecuaciones gobernantes, generalmente en términos de fuerza, es especificado en el contorno del dominio.

Las definiciones matemáticas de estas condiciones de contorno son mostradas a continuación,

$$u_i = f_i^v(x_i, t) \text{ sobre } \Gamma_v, \text{ y} \quad (3)$$

$$T_i = \sigma_{ij}(x_i, t) \cdot \hat{n}_i(x_i) = f_i^T(x_i, t) \text{ sobre } \Gamma_T. \quad (4)$$

Nótese que las ecuaciones (3) y (4) representan las condiciones de contorno de Dirichlet y Neumann, respectivamente. En la ecuación (4), σ_{ij} es el tensor de esfuerzo de Cauchy,

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + \eta(\dot{\gamma}) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (5)$$

y \hat{n} es el vector normal al contorno Γ_T .

Para configuraciones conocidas, las funciones $f_i^v(x_i, t)$ y $f_i^T(x_i, t)$ involucran generalmente expresiones simples. Por ejemplo, cuando el fluido está contenido por paredes sólidas no deslizantes, $f_i^v(x_i, t) = 0$. A su vez, cuando $f_i^v(x_i, t) = cte$, el fluido está entrando al dominio con un perfil de velocidad constante. Nótese que estas dos condiciones de contorno no

varían con el tiempo, por lo que también son consideradas como condiciones iniciales. Para condiciones de contorno periódicas, $f_i^v(x_i, t) = u_i(x_i + \Delta X_i, t - \Delta t)$, donde ΔX_i es un desplazamiento espacial de un límite del dominio a otro [14], y $t - \Delta t$ es el paso de tiempo anterior. Cuando se desea imponer una salida de flujo completamente desarrollada, $f_i^T(x_i, t) = 0$. Finalmente, para una condición de contorno de simetría, $f_i^v(x_i, t) = 0$ en la dirección perpendicular al plano de simetría, y $f_\tau^T(x_\tau, t) = 0$ en la dirección tangencial al plano de simetría. Nótese que una simulación numérica bidimensional, por ejemplo, la de un flujo entre dos placas paralelas infinitamente largas, puede ser realizada imponiendo una condición de simetría a lo largo de una dirección de un caso tridimensional.

1.3. Modelamiento reológico de pulpas minerales

Las propiedades reológicas de las pulpas minerales varían de acuerdo con la concentración de sólidos en estas. Además, las pulpas minerales pueden ser transportadas en regímenes homogéneos o heterogéneos. Un ejemplo de régimen homogéneo es la pulpa mineral después de la molienda, donde las partículas son muy finas y la concentración de sólidos en peso es alta (> 40%) [6]. Cuando dicha concentración de sólidos aumenta, la viscosidad dinámica presente en la ecuación (2) no es más constante. En estas situaciones, la viscosidad dinámica se vuelve una viscosidad aparente η , la cual es función del esfuerzo de corte τ y/o de la tasa de deformación $\dot{\gamma}$ [5]. Debido a que η es una función decreciente de $\dot{\gamma}$, como es observado en la Figura 1 [5], las pulpas minerales son consideradas como fluidos pseudo plásticos. Nótese también que, para valores de $\dot{\gamma}$ relativamente altos o bajos, la pulpa mineral puede exhibir un comportamiento Newtoniano. Dicho fenómeno es mostrado en la Figura 1 y es de vital importancia considerarlo en el modelamiento reológico de la pulpa mineral. Por otro lado, la magnitud de $\dot{\gamma}$,

$$|\dot{\gamma}| = \sqrt{2I_S}, \quad (6)$$

es calculada localmente utilizando la segunda invariante del tensor tasa de deformación S , el cual es definido como,

$$S = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (7)$$

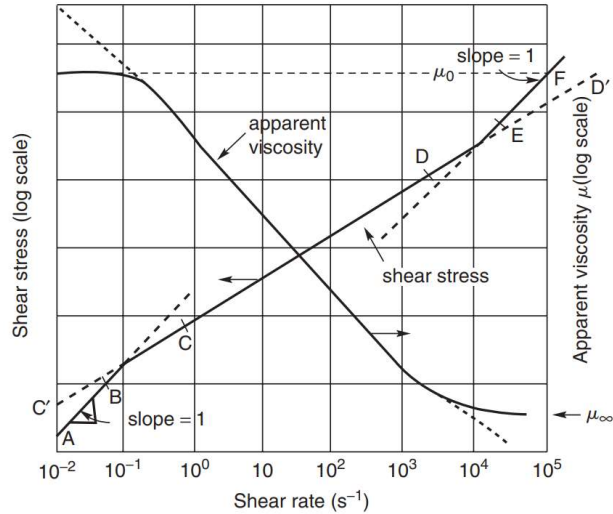


Figura 1. Representación esquemática del comportamiento de un fluido pseudo plástico [5].

1.3.1. Modelo de ley de potencia

La representación más simple de la viscosidad dinámica aparente de un fluido no Newtoniano está dada por el modelo de ley de potencia [5],

$$\eta(\dot{\gamma}) = K|\dot{\gamma}|^{n-1}, \quad (8)$$

donde K y n son los índices de consistencia y comportamiento del flujo obtenidos de forma empírica, respectivamente. Cuanto menor es el valor de n , mayor es el grado de cizallamiento. Para un fluido dilatante, el índice n es mayor que la unidad. Cuando $n = 1$, la ecuación (8) describe el comportamiento de fluidos Newtonianos. Téngase en cuenta que este modelo puede presentar algunos problemas a tasas de deformación relativamente bajas o altas, donde son requeridos parámetros adicionales para caracterizar adecuadamente el comportamiento de los fluidos no Newtonianos [6] (Figura 1). Es importante notar que las dimensiones del coeficiente de consistencia del flujo, K , dependen del valor numérico de n y, por lo tanto, los valores de K no deben compararse cuando los valores de n difieren. Por otro lado, el valor de K puede verse como el valor de la viscosidad aparente a una determinada velocidad de corte y, por lo tanto, dependerá de la unidad de tiempo (por ejemplo, segundo, minuto u hora) empleada. A pesar de estas limitaciones, este es quizás el modelo reológico más utilizado en la literatura para diversas aplicaciones de ingeniería [5]. El modelo de ley de potencia puede ser usado con precaución en aplicaciones de flujos no Newtonianos, como el transporte de pulpas minerales [3].

1.3.2. Modelo Carreau-Yasuda

El modelo Carreau-Yasuda es un modelo de cinco parámetros que es utilizado cuando hay grandes desviaciones de la ley de potencia a tasas de deformación relativamente bajas y altas [24]. El modelo Carreau-Yasuda puede describir las propiedades reológicas no Newtonianas de flujos que transportan partículas sólidas, como las pulpas minerales. En este modelo, la viscosidad dinámica aparente es estimada a partir de [25],

$$\eta(\dot{\gamma}) = \mu_{\infty} + (\mu_0 - \mu_{\infty}) \left(1 + (\lambda|\dot{\gamma}|)^a\right)^{\frac{n-1}{a}}. \quad (9)$$

donde μ_0 es la viscosidad a tasa de deformación cero, μ_{∞} es la viscosidad a una tasa de deformación relativamente grande, λ es el tiempo de relajación del fluido y a es un parámetro adimensional que describe el ancho de la región de transición entre la región de tasa de deformación cero y la de ley de potencia [25]. Nótese que la inversa de λ representa la tasa de deformación crítica a la cual la viscosidad aparente empieza a decrecer [26]. Los flujos Newtonianos pueden ser descritos con este modelo cuando $\lambda = 0$ y/o $n = 1$.

1.3.3. Modelo de ley de potencia truncado

Finalmente, el modelo de ley de potencia truncado de cuatro parámetros representa una mejora en el modelo de ley de potencia para todos los rangos de velocidad de corte [24]. La viscosidad aparente es calculada en este caso como,

$$\eta(\dot{\gamma}) = \begin{cases} \mu_0, & |\dot{\gamma}| < \dot{\gamma}_1, \\ K|\dot{\gamma}|^{n-1}, & \dot{\gamma}_1 < |\dot{\gamma}| < \dot{\gamma}_2, \\ \mu_{\infty}, & \dot{\gamma}_2 < |\dot{\gamma}|. \end{cases} \quad (10)$$

En este modelo, las tasas de deformación relativas a los límites de baja y alta viscosidad son estimados, respectivamente, de,

$$\dot{\gamma}_1 = \left(\frac{K}{\mu_0}\right)^{\frac{1}{1-n}}, \quad \dot{\gamma}_2 = \left(\frac{K}{\mu_{\infty}}\right)^{\frac{1}{1-n}}. \quad (11)$$

Las ecuaciones presentadas en este capítulo solo pueden ser resueltas de forma analítica en algunas situaciones muy particulares [20]. Soluciones aproximadas de estas ecuaciones, para una gran cantidad de aplicaciones, pueden ser obtenidas con ayuda de los métodos numéricos. En el siguiente capítulo, la resolución numérica del modelo matemático presentado en este capítulo es discutida.

Capítulo 2: Modelamiento numérico

En este capítulo, el modelamiento numérico usado para resolver las ecuaciones gobernantes, incluyendo su respectivo modelamiento reológico, es descrito. Más específicamente, el abordaje particular basado en el método de los elementos finitos (FEM) usado para resolver las ecuaciones (1) y (2) es primero mostrado en la Sección 2.1. A su vez, el método de Newton-Raphson, el cual es utilizado para la resolución del sistema de ecuaciones que resulta de la formulación FEM, es detallado en la Sección 2.2. La discretización temporal de las ecuaciones asociadas, siguiendo un esquema implícito, es finalmente abordada en la Sección 2.3 de este capítulo.

2.1. El método de los elementos finitos

El método de los elementos finitos (FEM) ha probado ser de utilidad en la solución numérica de diversos problemas involucrando flujo de fluidos. El objetivo principal del FEM es construir soluciones aproximadas de ecuaciones diferenciales parciales, como son las ecuaciones (1) y (2), usando el método de los residuos ponderados [14]. En general, para un dominio cualquiera Ω , la formulación por el método de los residuos ponderados implica resolver una ecuación de la forma,

$$\int_{\Omega} \omega R d\Omega = 0, \quad (12)$$

donde ω es un sub-espacio de funciones peso y R es el residuo entre la solución exacta de la ecuación diferencial y la solución aproximada de dimensión finita [27]. Este método es conocido con diferentes nombres de acuerdo con las funciones base y funciones peso utilizadas. Cuando el espacio de las funciones peso es idéntico al de las funciones base, el método de los residuos ponderados es llamado método de Galerkin. La aplicación del método de Galerkin a las ecuaciones (1) y (2) resulta en,

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \chi^m d\Omega = 0, \text{ siendo, } m = 1, \dots, M, \quad (13)$$

$$\int_{\Omega} \rho \psi_i^m \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial \psi_i^m}{\partial x_j} \left[-P \delta_{ij} + \eta(\dot{\gamma}) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \rho \psi_i^m g_i d\Omega - \quad (14)$$

$$\int_{\Gamma} \psi_i^m T_i d\Gamma = 0, \text{ siendo, } m = 1, \dots, N.$$

En las ecuaciones (13) y (14), χ^m y ψ_i^m son las funciones peso relacionadas con la conservación de la masa y cantidad de movimiento, respectivamente. En este trabajo, funciones lineales han sido consideradas para las M ecuaciones algebraicas de la

conservación de masa. De forma análoga, funciones tri cuadráticas han sido utilizadas para las N ecuaciones algebraicas de la conservación de cantidad de movimiento. Es importante resaltar aquí que las funciones base χ y ψ_i no pueden ser elegidas arbitrariamente. En la formulación empleada en este trabajo, para asegurar aproximaciones consistentes de las derivadas espaciales, las referidas funciones base han sido elegidas de tal forma que estas satisfacen la condición de Babuska-Brezzi [28]. Nótese que la integral de línea $\int_{\Gamma} \psi_i^m T_i d\Gamma$ presentada en la ecuación (14) permite imponer condiciones de contorno del tipo Neumann sobre el dominio Ω . Es importante señalar también que las ecuaciones (13) y (14) son consideradas como una formulación débil, o integral, de las ecuaciones gobernantes (1) y (2) [14].

En abordajes FEM, las ecuaciones (13) y (14) tienen que ser impuestas en cada uno de los nodos de los elementos finitos que componen el dominio computacional. En este trabajo los elementos finitos son considerados como elementos tri cuadráticos para la velocidad y lineales discontinuos en la presión. Obsérvese que esto está directamente relacionado con las funciones peso expuestas líneas arriba. Una representación esquemática de un elemento finito usado en este trabajo es mostrada en la Figura 2. Como es apreciado en esta figura, este elemento finito está formado por 27 nodos, enumerados de una forma determinada. En cada uno de los nodos, 3 grados de libertad asociados a las tres componentes de la velocidad son almacenados. Adicionalmente, el grado de libertad de la presión es almacenado en el nodo central (nodo 18) junto con sus gradientes en las tres direcciones, y esa presión en el nodo central es considerada como si esta actuase sobre todo el elemento. De esto se puede concluir que cada elemento finito tendrá 85 grados de libertad, 81 asociados a la velocidad y 4 a la presión.

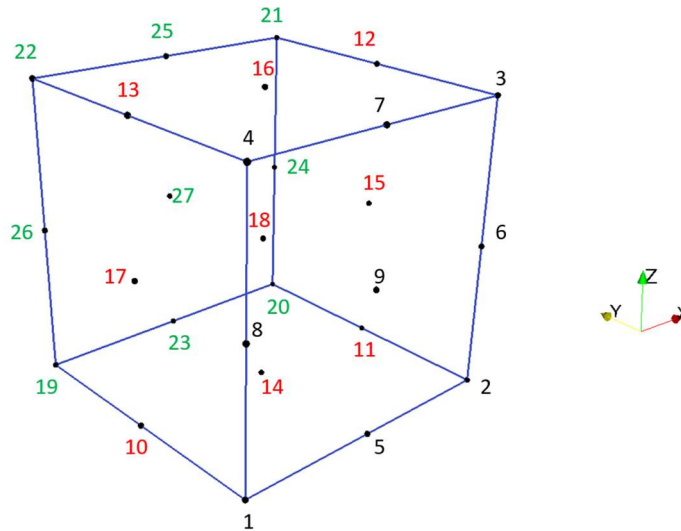


Figura 2. Elemento finito tri cuadrático y enumeración de sus nodos.

El cálculo de las integrales de las ecuaciones (13) y (14) no puede ser hecho de forma analítica, más bien, dichas integrales deben ser calculadas numéricamente usando métodos como el de cuadratura Gaussiana. Incluso cuando hay muchos otros métodos de integración numérica, la cuadratura Gaussiana ha demostrado ser efectiva y precisa lo suficiente para calcular numéricamente integrales presentes en varios problemas de FEM [27]. La fórmula genérica de la cuadratura Gaussiana puede ser escrita como,

$$\int_{-1}^1 f(\xi) d\xi = \sum_{i=1}^{NGP} f(\xi) PG. \quad (15)$$

En la ecuación (15), ξ es una variable isoparametrizada que varía de -1 a 1, NGP es el número de puntos de Gauss usados para la integración numérica y PG es el valor del peso de Gauss en el punto en cuestión. El error de truncamiento de este método de integración está definido por el NGP . Mientras más NGP , el cálculo numérico será más preciso. Sin embargo, el tiempo computacional asociado al cálculo será también mayor. Luego de varios experimentos numéricos, en este trabajo fue determinado que 3 puntos de Gauss es el número óptimo de puntos que aseguran la exactitud en el cálculo numérico de la integral con el menor costo computacional. En la Tabla 1, los valores de ξ y PG para $NGP = 3$ utilizados en este trabajo para realizar todas las integraciones numéricas son resumidos.

Tabla 1. Argumentos ξ y pesos de Gauss PG para $NGP = 3$ usados en este trabajo para hacer las integraciones numéricas [29].

NGP	ξ	PG
3	$-\sqrt{3/5}$	5/9

	0.0	8/9
	$\sqrt{3/5}$	5/9

En las ecuaciones (13) y (14), para su resolución, las variables principales deben ser descritas en términos de las funciones base. Dicha descripción es calculada aquí como,

$$u = \sum_{i=1}^{27} U_i \psi_i(\xi, \eta, \zeta), \quad (16)$$

$$v = \sum_{i=1}^{27} V_i \psi_i(\xi, \eta, \zeta), \quad (17)$$

$$w = \sum_{i=1}^{27} W_i \psi_i(\xi, \eta, \zeta), \quad (18)$$

$$P = \sum_{i=1}^4 P_i \chi_i(\xi, \eta, \zeta). \quad (19)$$

En las ecuaciones (16)-(19), ψ_i y χ_i son las funciones peso relacionadas con la conservación de cantidad de movimiento y masa, respectivamente. Además, u , v y w son las tres componentes de la velocidad. Nótese que ahora estas funciones peso son dependientes de las coordenadas isoparametrizadas ξ , η y ζ . Las funciones peso dependientes de las variables isoparametrizadas son detalladas en el Apéndice 2. De forma similar, las derivadas de la velocidad también pueden ser descritas de la forma,

$$\frac{\partial u}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{27} U_i \frac{\partial \psi_i(\xi, \eta, \zeta)}{\partial x_j}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{27} V_i \frac{\partial \psi_i(\xi, \eta, \zeta)}{\partial x_j}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial w}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{27} W_i \frac{\partial \psi_i(\xi, \eta, \zeta)}{\partial x_j}. \quad (22)$$

2.2. El método de Newton-Raphson

El esquema numérico expuesto en la Sección 2.1 conlleva necesariamente a la resolución de un sistema de ecuaciones no lineales. Un método comúnmente utilizado para determinar las raíces de sistemas de ecuaciones no lineales es el método de Newton-Raphson [29].

Este método consiste en la actualización iterativa de la función $f(x)$ alrededor de la solución x_{i+1} . Como puede notarse gráficamente en la Figura 3, una tangente a la función en el punto x_i es extrapolada hasta el eje x para obtener una estimación de la raíz en x_{i+1} . Esta formulación genérica es descrita de la siguiente manera,

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad (23)$$

y es conocida como la fórmula general de Newton-Raphson [29].

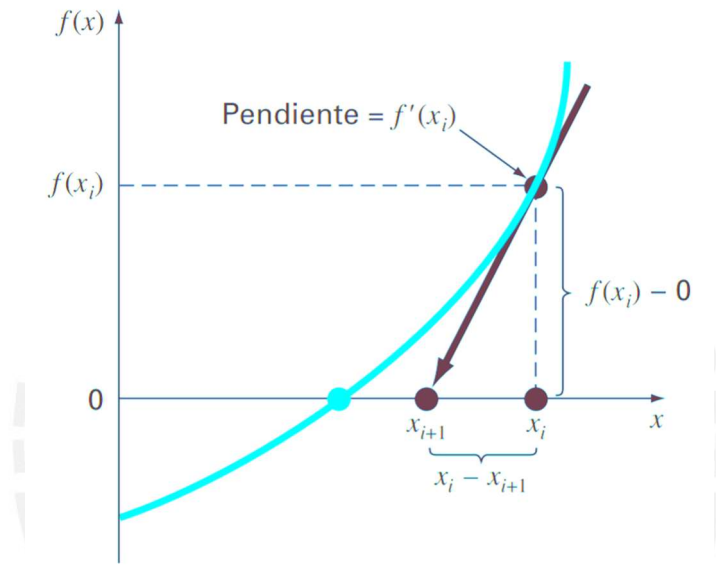


Figura 3. Esquema gráfico del método de Newton-Raphson [29].

Si es de interés hallar la raíz de un sistema de ecuaciones, la ecuación (23) puede ser reescrita de forma matricial, tal como es mostrado a continuación,

$$f'(x^k) (x^{k+1} - x^k) = -f(x^k). \quad (24)$$

En esta ecuación f , x^{k+1} y x^k son los vectores de la función a evaluar, la raíz estimada y el punto de evaluación actual, respectivamente. El término $(x^{k+1} - x^k)$ normalmente es reemplazado por un único término denominado como Δx^{k+1} . f' es conocida como la matriz jacobiana de f , y está definida como,

$$f'(x^k) = J_{ij}(x^k) = \frac{\partial f_i(x^k)}{\partial x_j}, \quad (25)$$

donde los subíndices i y j indican las filas y columnas, respectivamente, de la matriz jacobiana J . Es importante señalar ahora que la matriz J es una matriz dispersa, es decir, la gran mayoría de sus elementos son ceros [30].

La ecuación (24) es aplicable a cualquier sistema de ecuaciones. De esta forma, la ecuación que será particularmente utilizada en este trabajo para resolver el sistema formado por las ecuaciones (13) y (14) es obtenida reacomodando los términos de la ecuación (24),

$$J(\mathbf{C}^k)\Delta\mathbf{C}^{k+1} = -\mathbf{R}(\mathbf{C}^k), \quad (26)$$

donde \mathbf{R} es el vector de las funciones residuo discutidas en la sección 2.1. \mathbf{C}^k es, a su vez, el vector que contiene los campos resueltos de velocidades y presiones que satisfacen el sistema de ecuaciones en la iteración k del método de Newton. Finalmente, $\Delta\mathbf{C}^{k+1}$, es definido como,

$$\Delta\mathbf{C}^{k+1} = \mathbf{C}^{k+1} - \mathbf{C}^k. \quad (27)$$

Es importante señalar aquí que el criterio de convergencia de la ecuación (26) será,

$$\text{norma } |\mathbf{R}(\mathbf{C}^{k+1})| \leq \text{tol}, \quad (28)$$

donde tol es la tolerancia permisible entre la solución exacta y la analítica, es decir, un valor positivo muy cercano a cero. En consecuencia, el valor de la norma de $\mathbf{R}(\mathbf{C}^{k+1})$ debe tender cada vez más a cero a medida que el cálculo iterativo de Newton avanza. El algoritmo de solución asociado con el método de Newton-Raphson empleado aquí es resumido en Algoritmo 1.

Nótese que, tal como indicada, la ecuación (26) representa un sistema de ecuaciones lineales básico de la forma,

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (29)$$

donde \mathbf{A} es la matriz de coeficientes, \mathbf{b} es el vector del lado derecho y \mathbf{x} es el vector de soluciones. En consecuencia, métodos iterativos para resolver este tipo de sistemas de ecuaciones pueden ser utilizados debido a su bajo consumo de recursos computacionales y relativa buena exactitud [30].

El método de mínimos residuos generalizado (GMRSE) es un método del tipo Krylov ampliamente utilizado para resolver grandes sistemas dispersos de ecuaciones lineales [31]. El referido método ha demostrado ser robusto y rápido para la solución de sistemas lineales dispersos como los considerados aquí. Sin embargo, muchas modificaciones al

algoritmo original han sido hechas a lo largo de los años para mejorar su efectividad. Por ejemplo, para mejorar el esquema clásico del GMRSE, en [32], una técnica de pre condicionamiento variable basado en la estimación de vectores de Schur y técnicas de deflación, conocido como “deflated GMRSE”, fue implementada.

A pesar de que el esquema GMRSE, o alguna de sus modificaciones, suele ser muy robusto, en muchas ocasiones el esquema sufre de problemas de convergencia en aplicaciones de mecánica de fluidos [30]. De esta forma, el uso de pre condicionamiento es de vital importancia cuando se quiere evitar los mencionados problemas de convergencia del método iterativo. En particular, en aplicaciones de descomposición de dominio, el pre condicionador basado en el método aditivo de Schwarz generalizado (GASM) ha mostrado ser efectivo en la mejora de la convergencia de los métodos iterativos de Krylov [33]. Ambos, el “deflated GMRSE” y el GASM, son usados en este trabajo como método iterativo y pre condicionador, respectivamente, para resolver la ecuación (26). Los algoritmos asociados a los “deflated GMRSE” y GASM no son desarrollados en este trabajo, pues está fuera del alcance de este. La librería matemática PETSc [34] es utilizada aquí, pues esta cuenta con múltiples esquemas numéricos para resolver sistemas lineales dispersos, incluidos los “deflated GMRSE” y GASM.

Algoritmo 1. Algoritmo de solución basado en el método de Newton-Raphson

```

for  $t = 0$  to  $T_{max}$  do
  Initialize objects.
  for  $k = 0$  to  $convergence$  do
    Build system:  $\mathbf{J}(\mathbf{C}^k)$  and  $\mathbf{R}(\mathbf{C}^k)$ 
    Solve system:  $\mathbf{J}(\mathbf{C}^k)\Delta\mathbf{C}^{k+1} = -\mathbf{R}(\mathbf{C}^k)$ ,
    Update:  $\mathbf{C}^{k+1} = \mathbf{C}^k + \Delta\mathbf{C}^{k+1}$ 
  end
  Update  $\mathbf{C}$  with temporal Euler backward difference.
  Message-passing between subdomains from parallel domain
  decomposition.
end

```

2.3. Discretización del término temporal

Diferentes esquemas de aproximación usados para la discretización del término temporal de la ecuación (14) pueden ser encontrados en la literatura [14]. En este trabajo, el esquema de diferencia finita hacia atrás (backward difference),

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u - u_{prev}}{\Delta t} = f(u, t), \quad (30)$$

es utilizado. En la ecuación (30), f es calculada en función de la variable u en el instante de tiempo actual. Por esa razón, este método de solución es considerado del tipo implícito. De acuerdo con ello, la derivada temporal de la ecuación (14) es estimada como,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{i=1}^{27} \frac{U_i - U_i^{prev}}{\Delta t} \psi_i(\xi, \eta, \zeta), \quad (31)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \sum_{i=1}^{27} \frac{V_i - V_i^{prev}}{\Delta t} \psi_i(\xi, \eta, \zeta), \quad (32)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \sum_{i=1}^{27} \frac{W_i - W_i^{prev}}{\Delta t} \psi_i(\xi, \eta, \zeta). \quad (33)$$

Cuando el esquema de discretización de diferencia finita hacia atrás es aplicado en la ecuación (14), la ecuación (26) es reescrita de la siguiente forma,

$$\left[\frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}(\mathbf{C}^k) + \mathbf{J}(\mathbf{C}^k) \right] \Delta \mathbf{C}^{k+1} = -\mathbf{R}(\mathbf{C}^k, \mathbf{C}_{prev}^k). \quad (34)$$

En la ecuación (34), \mathbf{M} es conocida como la matriz masa o de consistencia, pues es consistente con el término temporal de la formulación débil de la ecuación (14) [14]. \mathbf{C}_{prev}^k es, a su vez, el vector que contiene los campos resueltos de velocidades y presiones del paso de tiempo anterior. La actualización del vector \mathbf{C} , con el esquema mostrado en la ecuación (30), puede ser escrita como,

$$\mathbf{C} = \frac{2\Delta t(\mathbf{C} - \mathbf{C}_{prev})}{\Delta t} + \mathbf{C}_{prev}. \quad (35)$$

Es importante señalar que en la ecuación (34), \mathbf{M} y \mathbf{J} no son dependientes de \mathbf{C}_{prev}^k . Esto debido a que ambas matrices son derivadas del vector \mathbf{R} con respecto a sus variables principales, es decir, la velocidad y la presión en el paso de tiempo actual. Por lo tanto, los términos que tengan U_i^{prev} , V_i^{prev} y W_i^{prev} son eliminados en este proceso de derivación.

En este capítulo, todos los detalles de la formulación numérica por el método de los elementos finitos han sido descritos. En el siguiente capítulo, el detalle de la implementación de la herramienta de CFD basada en FEM será discutido considerando lo expuesto aquí.



Capítulo 3: Implementación computacional

La implementación de la herramienta computacional de CFD basada en FEM es detallada en este capítulo. El contexto de implementación es primero descrito en la Sección 3.1. Los principales módulos de la herramienta computacional son también comentados en esta sección. Posteriormente, la jerarquía de clases más importante del módulo FEM de la herramienta computacional es explicada en la Sección 3.2. Nótese que esta jerarquía de clases está directamente relacionada con el desarrollo de código computacional involucrando los conceptos introducidos en el Capítulo 2. La implementación en paralelo de la herramienta computacional basada en FEM es finalmente discutido en la Sección 3.3

3.1. Contexto de implementación

La herramienta FEM discutida aquí constituye uno de los módulos de un paquete computacional más grande en desarrollo llamado CFLOWSS (Complex Flows Solver) [35]. Como su nombre lo indica, CFLOWSS tiene como objetivo resolver numéricamente diferentes flujos complejos, incluyendo pulpas minerales. Actualmente, varios módulos involucrando abordajes eulerianos y lagrangianos están siendo implementados en el CFLOWSS. La viabilidad de llevar a cabo fácilmente el acoplamiento unidireccional o bidireccional entre diferentes enfoques numéricos representa, por lo tanto, una de las características más importantes del CFLOWSS. Como es destacado en la Figura 4, algunas de las técnicas numéricas eulerianas inicialmente consideradas incluyen métodos de volúmenes finitos (FVM) [13] y FEM [14]. Nótese que se decidió implementar un módulo FEM en CFLOWSS debido a su probada aplicabilidad para el modelamiento numérico de flujos no Newtonianos [36]. Los abordajes lagrangianos incluyen, a su vez, métodos de elementos discretos (DEM) [37] e hidrodinámica de partículas suavizadas (SPH) [38]. Otras técnicas numéricas como los métodos espectrales (SM) [39], y los métodos de partículas finitas (PFEM) [40], también serán considerados en el futuro. Obsérvese que los diversos fenómenos físicos involucrados en el modelamiento numérico de flujos complejos justifican la inclusión de las técnicas numéricas indicadas anteriormente.

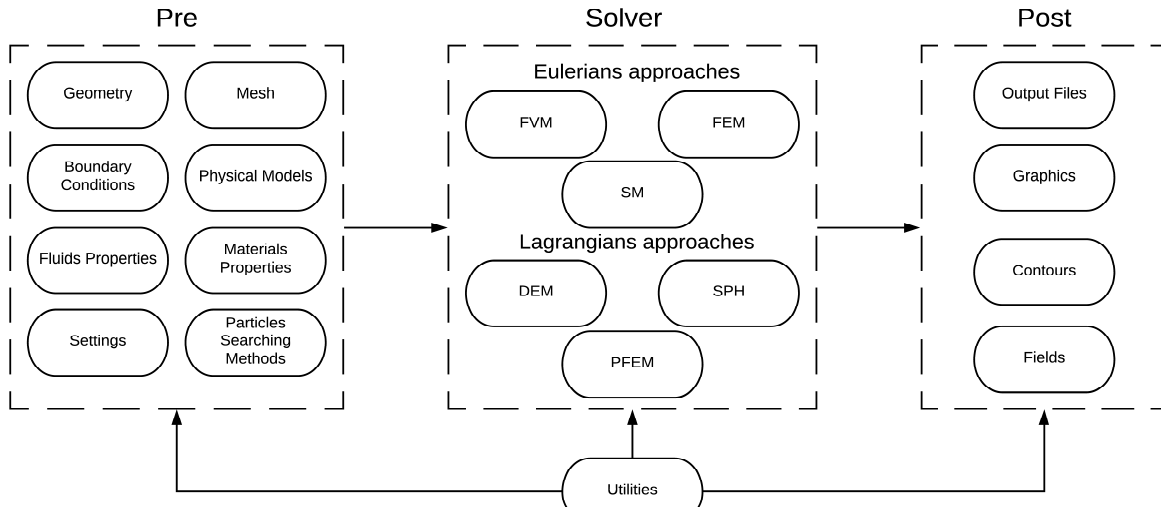


Figura 4. Módulos principales del CFLOWSS (Complex FLOWS Solver).

CFLOWSS es implementado utilizando un paradigma OOP y C++ como el lenguaje de programación principal. Continuamente, módulos, modelos y algoritmos numéricos son desarrollados en el CFLOWSS para mejorar la precisión de las predicciones realizadas con su ayuda. Tres módulos principales componen el CFLOWSS, (i) Pre, (ii) Solver y (iii) Post (Figura 4). La geometría, la malla, los modelos físicos y otros ajustes necesarios para iniciar un caso de simulación son definidos en el módulo Pre del CFLOWSS. El módulo Solver del CFLOWSS incluye a su vez los enfoques eulerianos y lagrangianos disponibles para la simulación numérica de flujos complejos. Una de estas técnicas numéricas (FEM), así como sus modelos y módulos asociados, son especialmente analizados en este trabajo. Finalmente, el módulo Post del CFLOWSS está orientado principalmente a la creación de archivos de salida que contienen resultados que pueden ser entendidos por herramientas de post procesamiento como ParaView [41].

3.2. Jerarquía de clases

En esta sección, detalles sobre la jerarquía de clases relacionada con el módulo FEM implementado en la herramienta computacional CFLOWSS son proporcionados. Nótese primero que el paradigma OOP es utilizado aquí para la implementación del módulo FEM. Este paradigma de programación favorece la implementación computacional de metodologías FEM, debido a que FEM es esencialmente un método modular [42]. En consecuencia, muchos objetos y datos abstractos han sido directamente extraídos de la formulación FEM. Como es previsible, la implementación del código FEM está basada en muchos conceptos de OOP, como abstracción, encapsulación, herencia, composición y

polimorfismo [15]. Una extensa jerarquía de clases ha sido entonces creada siguiendo este paradigma de programación. Sin embargo, en aras de la brevedad, solamente la jerarquía de clases más relevante del módulo FEM es revisada aquí (Figura 5). Todas las clases mostradas en la Figura 5 fueron implementadas dentro de los tres módulos principales del CFLOWSS descritos anteriormente (Figura 4). En la Figura 5, la relación entre clases está representada por diferentes patrones de línea. Las líneas continuas representan herencia entre clases. Las líneas discontinuas indican a su vez composición entre clases. Finalmente, las líneas punteadas con guion implican la transferencia de datos entre clases amigas.

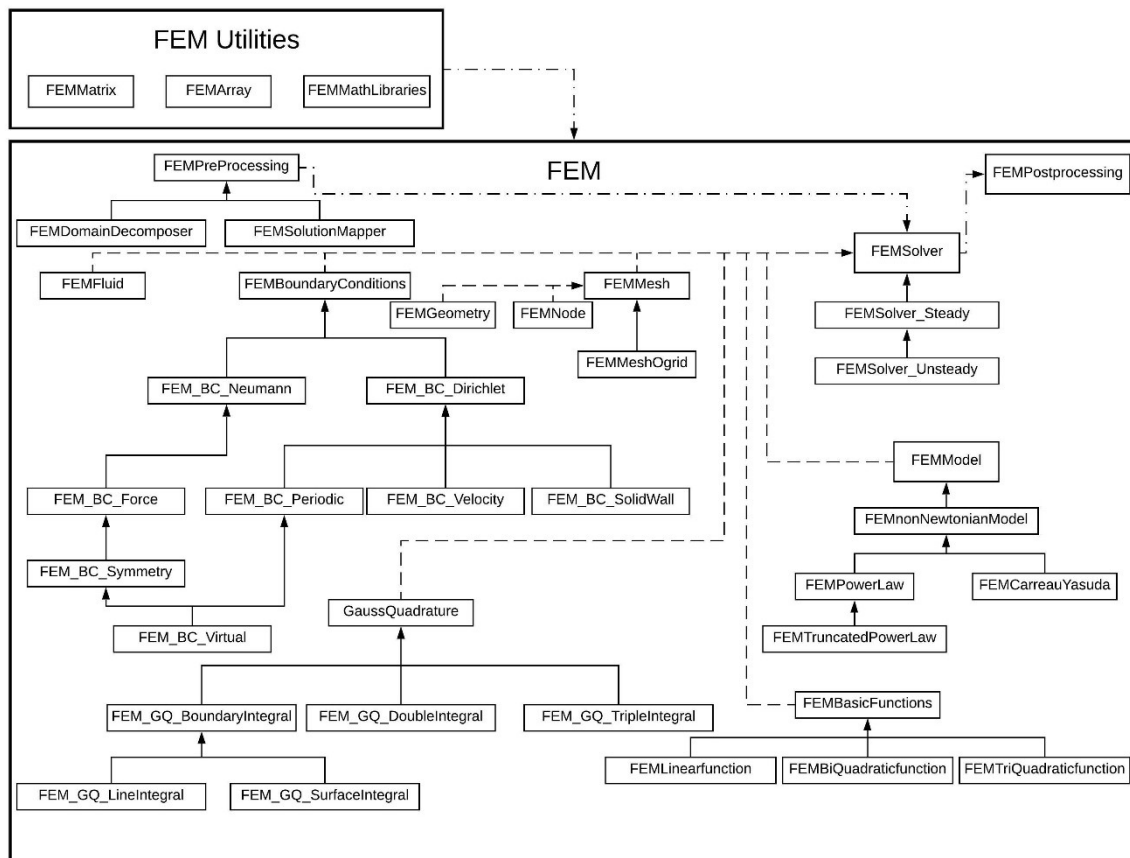


Figura 5. Jerarquía de clases del módulo FEM.

3.2.1. Utilidades

El módulo de utilidades (Utilities) del CFLOWSS, mostrado en la Figura 4 y Figura 5, incluye las principales utilidades requeridas para realizar una simulación FEM. Por ejemplo, las clases FEMArray y FEMMatrix incluidas en este módulo permiten asignar memoria de forma dinámica para los arreglos y matrices utilizados. Como fue discutido en la Sección 2.1, FEM

es esencialmente una técnica numérica para la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales e integrales, lineales y no lineales [14]. En consecuencia, los abordajes numéricos involucrados en las simulaciones FEM son generalmente complejos y computacionalmente caros (Sección 2.2). Para resolver los sistemas de ecuaciones asociados, en el módulo FEM implementado aquí, bibliotecas matemáticas de código abierto como las descritas en [34] y [43] son utilizadas. Los principales métodos de las bibliotecas matemáticas referidas son encontrados en la clase FEMMathlibraries. Las técnicas numéricas para resolver ecuaciones diferenciales con buenas tasas de convergencia, como los métodos de cuadrículas múltiples [44], también son incluidas en el módulo de utilidades.

3.2.2. Pre procesador

Cuando el módulo FEM es ejecutado, las primeras instrucciones están asociadas al pre procesamiento de las entradas colocadas por el usuario. La clase FEMPreProcessing tiene atributos y métodos para leer las entradas y los archivos de entrada que necesita el módulo FEM durante su ejecución. A modo de ilustración, los archivos de entrada del CFLOWSS son mostrados en el Apéndice 3. Cabe resaltar aquí que los archivos de entrada del CFLOWSS están en formato XML. En consecuencia, la biblioteca descrita en [45] es utilizada para leer estos archivos. En muchas ocasiones, el método de Newton-Raphson, discutido en la Sección 2.2, puede tener problemas de convergencia si el pivote para empezar el método iterativo está muy lejano de la raíz buscada [29]. Con el objetivo de evitar este problema de convergencia, el cálculo iterativo puede ser inicializado con otra solución ya convergida. Los métodos de la clase FEMSolutionMapper permiten leer un campo de soluciones obtenido en una simulación numérica previa y utilizar esa solución para iniciar un nuevo cálculo. Métodos de interpolación están también incluidos en la clase FEMSolutionMapper, los cuales son útiles en situaciones donde la malla computacional de la simulación previa y la nueva sean distintas. Como será discutido en la Sección 3.3.1, la descomposición de dominio para ejecutar la herramienta computacional en múltiples procesadores es principalmente hecha por el usuario, usando el archivo de entrada correspondiente. Los métodos para leer las entradas y generar estos subdominios en cada procesador están encapsulados en la clase FEMDomainDecomposer.

3.2.3. Propiedades del fluido

Las clases virtuales genéricas, típicamente llamadas clases materiales, a menudo son usadas para representar comportamientos de materiales. Una clase genérica (FEMFluid)

con características similares es también considerada en este trabajo. La clase FEMFluid es utilizada para caracterizar diferentes propiedades del fluido, como la densidad y la viscosidad dinámica. Para aplicaciones computacionales relacionadas con el flujo complejo, los modelos físicos son incluidos en la clase FEMmodel. Aunque esto no es ilustrado en la Figura 5, existe una relación de agregación entre las clases FEMFluid y FEMmodel. FEMnonNewtonianModel es otra clase genérica que no tiene significado físico, pero incluye atributos y métodos comunes a todos los modelos no Newtonianos utilizados en este trabajo. Para simular el transporte de pulpas minerales, hasta ahora tres modelos no Newtonianos, ley de potencia [5], Carreau-Yasuda [25] y ley de potencia truncada [24] (Sección 1.3), han sido implementados. Por ejemplo, los métodos y atributos de la clase FEMPowerLaw son usados para estimar la tasa de deformación y la viscosidad aparente modelada con el modelo ley de potencia en aplicaciones involucrando fluidos no Newtonianos. En este caso, debido a que la clase FEMCarreauYasuda tiene los mismos métodos, pero las instrucciones son distintas a las del modelo ley de potencia, el principio de polimorfismo ha sido utilizado. La clase FEMTruncatedPower-Law implica una mejora en el modelo de ley de potencia, lograda mediante el uso de un modelo de cuatro parámetros [24]. En consecuencia, FEMTruncatedPower-Law es una clase hija de FEMPowerLaw, y el principio de polimorfismo también es usado entre los métodos de estas clases.

3.2.4. Malla computacional

Para generar una malla computacional FEM, es necesario tener una geometría e información sobre cada nodo elemental adecuadamente definidos. La clase FEMMesh resulta así de una composición de clases FEMGeometry y FEMNode. Nótese que la clase FEMGeometry permite establecer la configuración geométrica requerida en una simulación FEM, mientras que la clase FEMNode es usada para almacenar información nodal. Adicionalmente, la clase FEMMeshOgrid permite crear mallas con arreglos polares para la simulación de configuraciones cilíndricas, como las tuberías circulares. Es importante también notar que, a pesar de que la clase lleva el nombre de “Ogrid”, en realidad, mallas del tipo “Mariposa” también pueden ser construidas con los métodos de esta clase. Las mallas tipo “Mariposa” son preferidas en simulaciones numéricas, pues han demostrado tener relativo éxito en producir resultados confiables en el modelamiento CFD de flujos bifásicos en tuberías circulares [46].

3.2.5. Condiciones de contorno

La clase `FEMBoundaryConditions` es usada a su vez para establecer las condiciones de contorno (BC) de las ecuaciones gobernantes. Como ya fue especificado en la Sección 1.2, las condiciones de contorno pueden ser del tipo Dirichlet o Neumann. De acuerdo a ello, las clases `FEM_BC_Dirichlet` y `FEM_BC_Neumann` son hijas de la clase `FEMBoundaryConditions`. Como es esperado, métodos y atributos comunes serán compartidos por las clases hijas con la clase padre. Nótese aquí que las instrucciones de algunos métodos de la clase `FEMBoundaryConditions` pueden ser cambiadas, con el principio de polimorfismo, cuando dichos métodos sean usados por alguna de sus dos clases hijas.

Como es observado en la Figura 5, `FEM_BC_SolidWall`, `FEM_BC_Velocity` y `FEM_BC_Periodic` son clases hijas de la clase `FEM_BC_Dirichlet`. Esta relación entre clases es naturalmente esperada desde que las 3 clases deben hacer imposiciones directas de campos de velocidad sobre los contornos del dominio. Por ejemplo, la clase `FEM_BC_SolidWall` aplica una condición de pared sólida no deslizante en algún contorno, es decir, las 3 componentes de la velocidad en ese contorno son cero. La clase `FEM_BC_Velocity` permite imponer, en principio, una entrada de velocidad constante en algún contorno. Cabe resaltar que esta velocidad puede ser en cualquiera de las direcciones, y no necesariamente tienen que ser iguales en las 3 componentes. Adicionalmente, la clase `FEM_BC_Velocity` tiene métodos para imponer perfiles de velocidad, no necesariamente constantes, sobre alguna superficie y en cualquiera de las 3 componentes. La clase `FEM_BC_Periodic` es también una clase hija de `FEM_BC_Dirichlet` e impone una velocidad calculada en un contorno y paso de tiempo anterior, sobre otro contorno y paso de tiempo actual. Nótese que la imposición de condiciones de contorno periódicas involucran la inclusión de diferentes artificios según el sentido del flujo [28]. Estos artificios están implementados en las clases hijas de la clase `FEM_BC_Periodic`. Sin embargo, en aras de la brevedad, estas clases heredadas no han sido incluidas en la Figura 5.

`FEM_BC_Force` es clase hija de la clase `FEM_BC_Neumann`. Los métodos y atributos de esta clase permiten imponer condiciones de contorno como salida del flujo completamente desarrollado (Sección 1.2). `FEM_BC_Symmetry` es, a su vez, clase hija de `FEM_BC_Force`, debido a que, cuando condiciones de contorno de simetría debe ser impuestas, métodos y atributos de esta clase padre son reutilizados por la clase hija. Aplicando la técnica de

programación conocida como doble herencia [22], la clase FEM_BC_Virtual es una clase hija de FEM_BC_Symmetry y de FEM_BC_Periodic. FEM_BC_Virtual es una clase que permite la actualización iterativa de las condiciones de contorno cuando un problema es descompuesto en múltiples subdominios (Sección 3.3). A pesar de que no parece justificarse el hecho que FEM_BC_Virtual tenga las dos clases padre referidas, múltiples atributos y métodos heredados serán utilizados por FEM_BC_Virtual. Por ejemplo, métodos asociados a la imposición de condiciones de contorno, según la posición geométrica de un subdominio, son reutilizados de FEM_BC_Periodic. Además, métodos que permiten considerar la fuerza a la salida de un flujo entre subdominios son reutilizados de FEM_BC_Symmetry.

3.2.6. Funciones base

FEMBasicFunctions permite utilizar las funciones de interpolación (base) en cada elemento finito durante una simulación numérica. Como es apreciado en la Figura 5, la clase FEMBasicFunctions tiene como clases hijas a FEMLinearfunction, FEMBiQuadraticfunction y FEMTriQuadraticfunction, las cuales corresponden a los tipos de funciones base que fueron descritas en la Sección 2.1 y detalladas en el Apéndice 2.

3.2.7. Cuadratura Gaussiana

La clase GaussQuadrature tiene todos los atributos y métodos genéricos para calcular numéricamente diferentes integrales por el método de la cuadratura gaussiana discutido en la Sección 2.1. Las clases hijas FEM_GQ_BoundaryIntegral, FEM_GQ_DoubleIntegral y FEM_GQ_TripleIntegral permiten calcular integrales sobre un contorno, dobles y triples, respectivamente. Adicionalmente, las clases FEM_GQ_LineIntegral y FEM_GQ_SurfaceIntegral tienen atributos y métodos para resolver numéricamente integrales de línea y superficie, respectivamente. Nótese que este tipo de integrales son consideradas como integrales sobre un contorno. Esto justifica la jerarquía de clases indicada en la Figura 5. En particular, cuando un objeto de alguna de las clases de GaussQuadrature es creado, un integrador numérico es también creado. Ese objeto integrador puede ser utilizado por múltiples clases del código. En consecuencia, muchas clases tendrán una relación de composición con GaussQuadrature o alguna de sus clases hijas. Dicha relación de composición no es mostrada en la Figura 5 por simplicidad. Nótese también que este objeto de integración deberá tener como parámetro una ecuación para ser ejecutado. Las clases asociadas a las diferentes ecuaciones no son tampoco mostradas en la Figura 5, pues estas ecuaciones pueden ser utilizadas por otros módulos diferentes

al FEM. Por simplicidad, el lector debe considerar que las ecuaciones que integran los objetos de las clases GaussQuadrature son solamente las ecuaciones discretizadas mostradas en el Capítulo 2.

3.2.8. Clase principal

La clase principal del módulo CFLOWSS FEM es la clase FEMSolver. Esta clase es compuesta de las clases FEMFluid, FEMBoundaryConditions, FEMMesh, GaussQuadrature, FEMBasicFunctions y FEMModel, principalmente. Es decir, la clase FEMSolver crea instancias de estas clases (o de sus clases hijas) y accede, a través de estos objetos instanciados, a todos los métodos incluidos en dichas clases. Además, la clase FEMSolver también tiene acceso a todas las clases relacionadas con algoritmos matemáticos requeridas para resolver cualquier simulación FEM (FEM Utilities). Como es mostrado en la Figura 5, la clase FEMSolver tiene como clase hija a FEMSolver_Steady, y, a su vez, esta última tiene como hija a FEMSolver_Unsteady.

3.2.9. Post procesador

Finalmente, los datos relacionados con los resultados que salen de la clase FEMSolver, o alguna de sus clases hijas, son enviados a la clase FEMPostprocessing para su posterior procesamiento. En particular, archivos de salida son escritos por los atributos y métodos que tiene la clase FEMPostprocessing. Los archivos de salida son escritos en el formato vtk, que es compatible con la gran mayoría de herramientas de post procesamiento disponibles para aplicaciones CFD [47].

3.3. Implementación de herramienta FEM en paralelo

Los principales desarrollos asociados con la implementación en paralelo de la herramienta basada en FEM utilizada aquí son discutidos en esta sección. Como fue señalado anteriormente, para paralelar la herramienta basada en FEM, un enfoque basado en DDM fue seguido en este trabajo. Los pasos generales de DDM para propósitos de paralelismo son mostrados en la Figura 6. El primer paso consiste en descomponer un dominio computacional y distribuir el trabajo en entornos paralelos. Las ecuaciones gobernantes, discretizadas de acuerdo con las ecuaciones (13)-(14), son resueltas a continuación simultáneamente en cada subdominio. Finalmente, la solución de las ecuaciones gobernantes es reconstruida en el paso final.

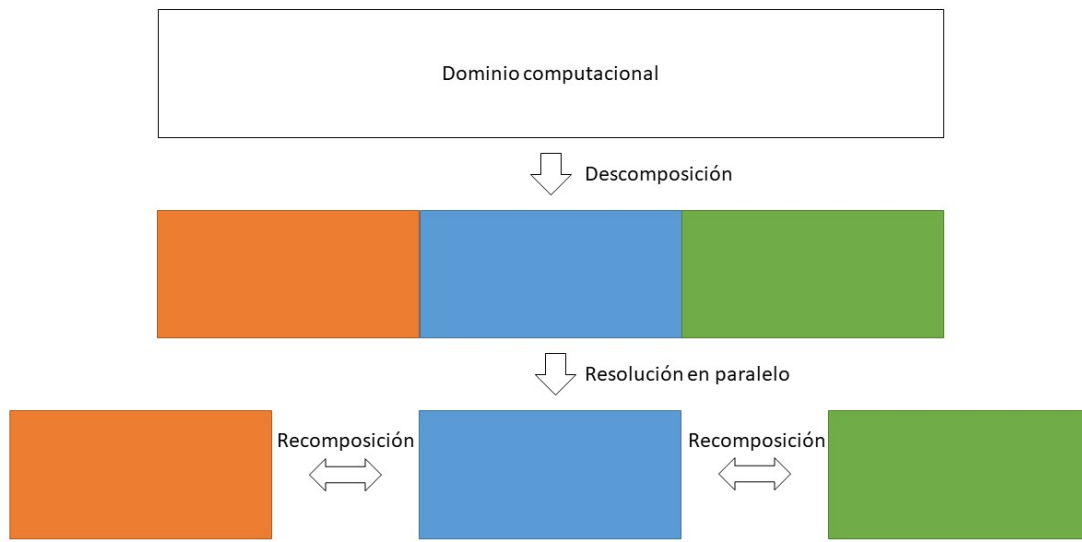


Figura 6. Etapas generales de los métodos de descomposición de dominio (DDM) para propósitos de paralelismo, adaptado de [17].

Actualmente, DDM es el enfoque más comúnmente utilizado en el desarrollo de herramientas computacionales paralelas basadas en FEM para resolver aplicaciones de flujos de fluidos [14]. Por ejemplo, en [18], una revisión exhaustiva de las aplicaciones relacionadas con DDM, incluyendo flujos multifásicos y/o no Newtonianos, es presentada. Nótese también que en la literatura son reportados trabajos sobre solvers directos o iterativos acoplados con DDM. Por ejemplo, Raju y Khaitan [48] analizan las características de un código paralelo basado en FEM que utiliza DDM y un solver directo disperso. En ese trabajo, un bucle iterativo de Newton junto con uno de Schwarz aditivo para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes fue utilizado. El algoritmo desarrollado en el referido trabajo escala bien en términos de tiempo computacional y requisitos de memoria. A su vez, en [49], un método FEM estabilizado para las ecuaciones 3D no Newtonianas de Navier-Stokes, y uno de descomposición de dominio paralelo para resolver el sistema disperso fue introducido. El sistema de ecuaciones altamente no lineales, debido a los efectos no Newtonianos, fue resuelto allí mediante un algoritmo de Newton-Krylov-Schwarz puramente iterativo. Un escalamiento superlineal fue obtenido hasta los 512 procesadores [49]. Finalmente, obsérvese que los algoritmos relacionados con DDM pueden basarse en actualizaciones iterativas de las condiciones de contorno impuestas en las interfaces entre subdominios, las llamadas condiciones de transmisión [19]. Para obtener más detalles

sobre estas condiciones de transmisión, el lector interesado puede consultar trabajos anteriores que tratan sobre ellas en aplicaciones de flujos complejos [50],[51] y [52].

Hay múltiples aspectos particulares a tener en cuenta al implementar, en una herramienta CFD, los pasos generales mostrados en la Figura 6. Estos aspectos, algunos de los cuales son abordados por separado en esta sección, incluyen la partición del dominio, los algoritmos de comunicación entre procesos, y las condiciones de transmisión.

3.3.1. Partición del dominio

La partición del dominio computacional es la piedra angular del paso de preprocesamiento de cualquier herramienta paralela basada en descomposición de dominios. Dos objetivos principales deben ser alcanzados mediante un algoritmo de particionamiento eficaz para la descomposición de dominios en paralelo, (i) balanceo eficiente de carga y (ii) reducido tiempo de sincronización y/o costo de transmisión de mensajes [53]. Un balanceo de carga eficiente significa que la carga computacional es distribuida de la manera más uniforme posible en cada procesador. En contextos FEM, esto ocurre cuando cada proceso resuelve, aproximadamente, el mismo número de grados de libertad. La solución paralela de un problema en varios procesadores, generalmente, requiere una sincronización explícita y el envío de mensajes entre ellos [53]. Estos dos requerimientos representan un costo computacional adicional que puede degradar la escalabilidad del código. Para mitigar este costo adicional, cuando una malla arbitraria FEM es proporcionada, es crucial minimizar el número de nodos entre las interfaces de comunicación. En la literatura abierta, existen bibliotecas paralelas para particiones de grafos y mallas no estructuradas como la descrita en [54]. Sin embargo, estas bibliotecas no son utilizadas en este trabajo, porque solamente mallas estructuradas y configuraciones de flujo relativamente simples son consideradas. Por lo tanto, el uso de bibliotecas como la discutida en [54] no se justifica aquí. Además, para poder acoplar fácilmente los módulos FEM con otros, involucrando enfoques lagrangianos, por ejemplo, es de particular interés desarrollar aquí algoritmos paralelos propios.

En la herramienta basada en FEM analizada aquí, la partición del dominio es especificada por el usuario. En particular, todo el dominio computacional es dividido en una cantidad de N_{subd} subdominios, igual al número de procesos asignados por el usuario para la ejecución paralela. La partición del dominio para un paralelepípedo tridimensional es ilustrada en la Figura 7. El número de subdominios en cada dirección ($N_{x_{subd}}$, $N_{y_{subd}}$ y $N_{z_{subd}}$ según la Figura 7), el número de elementos finitos por subdominio, y sus características geométricas

son definidos por el usuario. Además, para que el usuario pueda utilizarlo para balancear adecuadamente la carga de trabajo entre los procesos, el número de grados de libertad en cada subdominio es indicado por la herramienta. Nótese que la partición de subdominios empleada en este trabajo conduce a subdominios disjuntos, lo que significa que subdominios superpuestos no son considerados. Esto ha sido hecho porque la superposición de subdominios agregaría más grados de libertad a los subdominios y esto afectaría negativamente la escalabilidad computacional. Buscando también simplicidad, la partición de dominio utilizada aquí es basada en elementos. Es decir, toda la información relacionada con un elemento finito dado es asignada al mismo procesador, por lo que ningún elemento es dividido entre dos o más subdominios [30]. Una vez hecha la partición, un ID único es asignado a cada subdominio, el cual es utilizado principalmente con fines de comunicación.

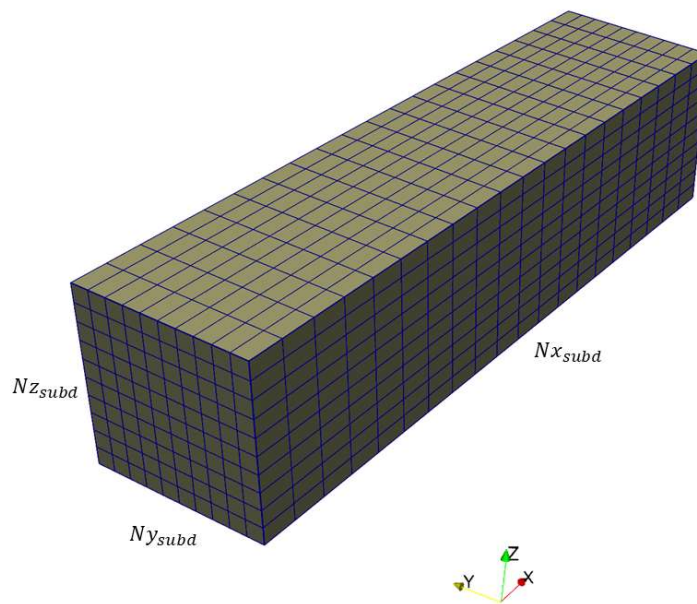


Figura 7. Descomposición de un dominio tri dimensional en forma de paralelepípedo.

3.3.2. Algoritmo de comunicación

Una vez que el dominio computacional ha sido descompuesto, algoritmos paralelos eficientes para garantizar la escalabilidad computacional adecuada de la herramienta son necesarios. En este trabajo, el método de transmisión de mensajes (message passing) ha sido elegido para comunicar los procesos computacionales entre sí, mediante el envío y la recepción de mensajes. Debido a sus características de universalidad, expresividad, facilidad de depuración y rendimiento, el modelo de paso de mensajes ha sido utilizado

muchas veces en el pasado [55]. Más específicamente, MPI (Message Passing Interface) ha sido elegido como estándar de transmisión de mensajes en este trabajo. MPI permite dividir de forma natural varios problemas computacionales presentes en la academia y la industria, con portabilidad y eficiencia [56]. El estándar MPI incluye las mejores características de muchos sistemas de transmisión de mensajes desarrollados a lo largo de los años. Sin embargo, algunos aspectos de la programación paralela con MPI dependen de la implementación específica [55]. Uno de los aspectos referidos es la sincronización de procesos durante el intercambio de mensajes.

El algoritmo particular de sincronización de procesos empleado aquí involucra lo descrito a continuación. Después de descomponer todo el dominio en subdominios y distribuirlos entre los procesos disponibles, los subdominios vecinos son identificados. Para ello y utilizando un ordenamiento implícito, los ID de los subdominios vecinos son almacenados en un vector llamado *NeighborID*. Este vector tiene un tamaño igual al número máximo de vecinos por subdominio *n_{hb}*. Para un dominio tridimensional, y considerando que la comunicación entre subdominios ocurre solo a través de sus caras, *n_{hb}* = 6. Como es observado en la Figura 8, para un subdominio arbitrario en forma de paralelepípedo, el orden implícito del vector ID concuerda con seis posiciones contiguas definidas. En consecuencia, para un caso tridimensional,

$$neighborsID = [BOTTOM, RIGHT, TOP, LEFT, FRONT, BACK]^T.$$

Este vector es inicializado con un número de ID imposible (negativo), *id* = -1. Un algoritmo condicional simple cambia los valores del vector con los ID de los subdominios vecinos. Una vez lleno, el vector *NeighborID* permite que cada subdominio identifique sus subdominios contiguos y su ubicación geométrica. Esta definición de vecinos de subdominios permite intercambios correctos de mensajes entre subdominios contiguos.

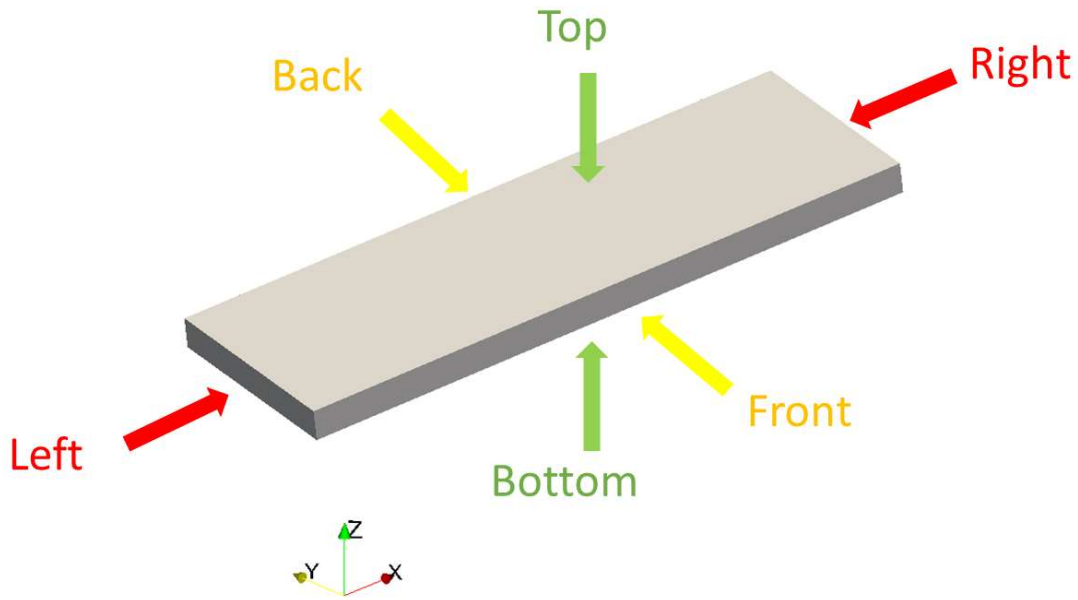


Figura 8. Identificación de vecinos para un subdominio en forma de paralelepípedo arbitrario.

Después de definir el vector *NeighborsID*, para el paso de mensajes sincronizado, un algoritmo de comunicación entre subdominios vecinos es requerido. El algoritmo de comunicación particular empleado aquí es resumido en el Algoritmo 2. Este algoritmo comienza con la inicialización de una variable auxiliar entera *id*. A continuación, un bucle For es ejecutado sobre los componentes del vector *NeighborsID*. Dado que se trata de una implementación OOP, *NeighborsID* es un objeto de la clase *vector*. El método "getvalue (*i*)" devuelve, por lo tanto, el valor del vector en la posición *i*. Esto significa que un ID del vector *NeighborsID* con "*NeighborsID*.getvalue (*i*)" es extraído, y luego almacenado en la variable *id*. Luego, *EvaluateNeighborID(id)* es un método condicional que devuelve verdadero, si *id* es un ID válido de procesador, es decir, $-1 < id < MPIsize$. Cuando se detecta un ID de procesador válido, el proceso envía el vector C (otro objeto *vector* donde los campos de velocidad y presión resueltos son almacenados, el mismo que fue descrito en la Sección 2.2) a un subdominio vecino. De lo contrario, el proceso deberá recibir o ignorar el proceso de intercambio de mensajes. Nótese que todos estos métodos de envío y recepción de mensajes son métodos "bloqueantes" de MPI. Es decir, estos métodos bloquean la ejecución del programa hasta que el intercambio de mensajes sea completado. Para identificar el proceso de recepción de mensajes, el valor *id* es actualizado desde el vector *NeighborsID* con el método "getotherface (*i*)". Este método devuelve un número

entero que corresponde a la cara del subdominio opuesto, basado en el orden implícito del vector *NeighborsID*. Por ejemplo, si $i = 0$ (BOTTOM), el método *getotherface(i)* devolverá 2 (TOP). A continuación, el valor *id* actualizado es evaluado nuevamente con el método *EvaluateNeighborID(id)*. Si el valor del *id* es válido, el vector C del subdominio vecino será recibido. Vale la pena hacer aquí dos comentarios sobre el Algoritmo 2. Primero, este algoritmo se comporta como un algoritmo simple de envío-recepción de mensajes entre procesos. Esta aparente simplicidad proviene del orden implícito del vector *NeighborsID* empleado aquí. Y, en segundo lugar, el sobre costo asociado a la comunicación y el tiempo de sincronización son minimizados cuando el Algoritmo 2 es usado. Esto viene de la formación del vector *NeighborsID* y los métodos condicionales auxiliares usados aquí, los cuales permiten el paso de mensajes simultáneamente entre subdominios adyacentes con un solo bucle For. Como será ilustrado en el Capítulo 4, el Algoritmo 2 asegura un desempeño en paralelo de la herramienta relativamente bueno.

Algoritmo 2. Algoritmo de comunicación entre subdominios vecinos.

```

initialization of id;
for  $i = 0$  to  $n_{hb} - 1$  do
     $id = neighborsID.getvalue(i);$ 
    if EvaluateNeighborID(id) then
        |  $Send(C.getbuffer());$ 
    end
     $id = neighborsID.getvalue(getotherface(i));$ 
    if EvaluateNeighborID(id) then
        |  $Recv(C.getbuffer());$ 
    end
     $i ++;$ 
end

```

3.3.3. Condiciones de transmisión

En esta sección, el algoritmo particular utilizado aquí para actualizar iterativamente las condiciones de contorno en las interfaces entre subdominios, las llamadas condiciones de

transmisión (TC), es descrito. Como fue reportado en [17] y [18], a lo largo de los años varios esfuerzos han sido realizados para implementar correctamente las TC. Sin embargo, porque las TC adecuadas dependen en gran medida de los fenómenos físicos específicos considerados [17], no serán detallados aquí todos los enfoques disponibles para este propósito. Las discusiones aquí son restringidas a TC que permiten modelar flujos similares a las pulpas minerales utilizando FEM. Vale la pena señalar primero que, en este trabajo, las condiciones de contorno impuestas a las interfaces entre subdominios son denominadas virtuales. En consecuencia, todos los atributos y métodos necesarios para ejecutar el algoritmo relacionado con TC han sido encapsulados en la clase llamada FEM_BC_Virtual (Sección 3.2). Para dos subdominios Ω contiguos arbitrarios, el algoritmo TC desarrollado aquí es representado esquemáticamente en la Figura 9. Nótese que, en aras de la simplicidad, en esta figura solo son mostradas proyecciones bidimensionales de los elementos finitos. Los elementos finitos mostrados en la Figura 9 cuentan con 9 nodos, donde los componentes de la velocidad son calculados. La presión, a su vez, es calculada y almacenada en el nodo central de cada elemento, únicamente. A pesar de esta diferenciación sobre los nodos de los elementos donde son calculadas, la velocidad y la presión están intrínsecamente acopladas, pues ambas son variables primarias en la formulación débil presentada en la ecuación (14). Por lo tanto, siguiendo la Figura 9, las condiciones de transmisión impuestas en ambas interfaces son estimadas de la siguiente manera,

$$\vec{V}_k^t = I(\vec{V}_k^{t-\Delta t}, \vec{V}_{k+1}^{t-\Delta t}), y \quad (36)$$

$$P_k^t = I(P_k^{t-\Delta t}, P_{k+1}^{t-\Delta t}), \quad (37)$$

donde \vec{V}_k^t representa el vector de velocidad sobre el contorno del subdominio Ω_k en el paso de tiempo t . De manera similar, P_k^t es la presión mecánica en el elemento de la frontera, e I es una función de interpolación para la actualización iterativa de las condiciones del contorno virtual. Más específicamente, funciones base de Lagrange son utilizadas en este trabajo para construir los polinomios de interpolación de I para la velocidad y la presión [29]. En general, las funciones de interpolación I son calculadas aquí como,

$$I = \sum_{i=1}^n L_i(x) f(x_i), \quad (38)$$

donde,

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \quad (39)$$

y x es la posición de un nodo cualquiera. En la ecuación (38), siguiendo las ecuaciones (36) y (37), f podría ser $\vec{V}_k^{t-\Delta t}$, $\vec{V}_{k+1}^{t-\Delta t}$, $P_k^{t-\Delta t}$ y/o $P_{k+1}^{t-\Delta t}$. Vale la pena notar que, dado que L es solo una función de interpolación, no existe un criterio de convergencia específico para la ecuación (36) o (37). Sin embargo, el algoritmo numérico general tiene un criterio de convergencia definido de acuerdo con la ecuación (28). Obsérvese que la condición de transmisión impuesta para la velocidad debe cumplir la condición de que $\vec{V}_k^t = \vec{V}_{k+1}^t$. En contraste, dado que la presión no es impuesta en la interfaz de los subdominios, sino en cada nodo central de elementos finitos, $P_k^t \neq P_{k+1}^t$. Por lo tanto, aquí ha sido utilizado un enfoque similar al de las celdas fantasma para la interpolación de la presión [57]. Nótese que, en este trabajo, presiones en los elementos de la frontera del subdominio Ω_k son impuestas con los valores de presión correspondientes calculados en el subdominio Ω_{k+1} , y no al revés. Como será ilustrado en el Capítulo 4 a continuación, a partir de comparaciones con soluciones analíticas, las TC empleadas en este trabajo han mostrado ser suficientemente precisas para modelar flujos similares a las pulpas minerales.

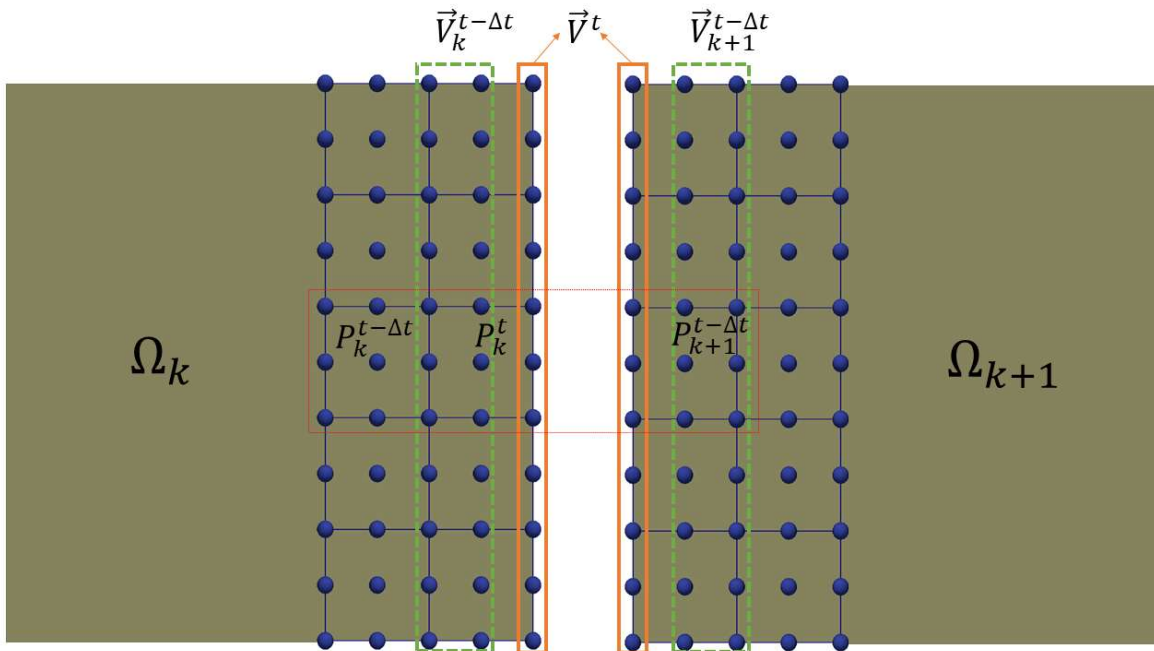


Figura 9. Esquema de algoritmo de condiciones de transmisión para dos subdominios contiguos.

Capítulo 4: Casos de estudio

En este capítulo, varios (5) casos de estudio asociados con la verificación, validación y utilización de la herramienta computacional basada en FEM para simular numéricamente flujos similares a aquellos involucrando pulpas minerales son presentados. Las primeras secciones (Secciones 4.1 y 4.2) de este capítulo están dedicadas a la validación de las primeras etapas de la implementación de la herramienta computacional basada en FEM. En particular, casos involucrando flujos en estado estacionario incompresibles laminares Newtonianos y no Newtonianos bidimensionales son estudiados. En la Sección 4.3, a su vez, una configuración del tipo cavidad accionada por tapa (lid-driven cavity) es utilizada para validar los resultados de la herramienta computacional cuando simulaciones numéricas involucrando geometrías tri dimensionales son tomadas en consideración. Luego, en la Sección 4.4, vía su uso en el diseño de un equipo de transporte de pulpas minerales, la aplicación de la herramienta computacional a casos más prácticos es demostrada. Finalmente, la aplicación de la herramienta computacional para simular numéricamente el transporte de pulpas minerales reales en tuberías circulares horizontales, cuantificando pérdidas de energía y analizando características del flujo, es descrita en la Sección 4.5.

4.1. Flujo laminar newtoniano entre placas paralelas infinitas

En primer lugar, el flujo en estado estacionario, incompresible, laminar, Newtoniano, bidimensional, y completamente desarrollado entre dos placas paralelas infinitas es aquí considerado. La geometría asociada es mostrada esquemáticamente en la Figura 10 (a). La solución analítica que caracteriza este flujo particular fue obtenida de [5], considerando una caída de presión constante entre la entrada y la salida.

Los campos de velocidad calculados utilizando 30 mallas computacionales (que van de 2 a 1800 elementos) con refinamientos de malla diferentes fueron comparados inicialmente con la solución analítica correspondiente y el error medio cuadrático obtenido (RMSE) fue de aproximadamente $4,9E-08$ en todos los casos. Con fines ilustrativos, los perfiles de velocidad calculados utilizando una malla de 1250 elementos y la solución analítica correspondiente son comparados en la Figura 10 (b). Obsérvese que, en este gráfico, los

resultados numéricos y analíticos concuerdan relativamente bien. Por lo tanto, la efectividad de la herramienta computacional para modelar flujos en estado estacionario, incompresible, laminar, Newtoniano, bidimensional y completamente desarrollado entre dos placas paralelas infinitas es comprobada a través de este caso de estudio. En el siguiente caso de estudio, una configuración similar simulando fluidos no Newtonianos será considerada.

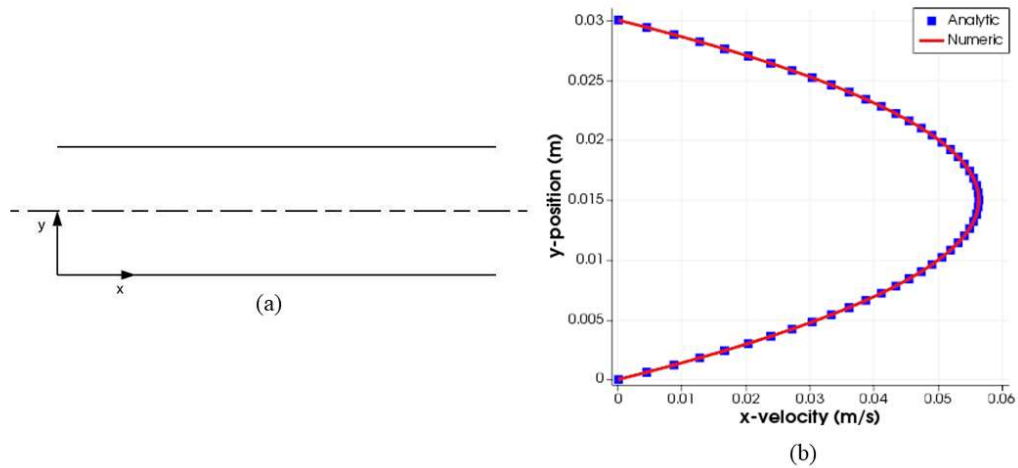


Figura 10. (a) Geometría tomada en cuenta para calcular los flujos laminares Newtonianos entre dos placas paralelas infinitas. (b) Perfiles de velocidad x sobre una línea recta paralela al eje y y obtenidos analíticamente y numéricamente utilizando la herramienta computacional basada en FEM.

4.2. Flujo laminar no Newtoniano entre placas paralelas infinitas

Para la misma geometría mostrada en la Figura 10 (a), y con el fin de verificar la efectividad de la herramienta computacional basada en FEM para tratar fluidos con viscosidad no necesariamente constante, un flujo no Newtoniano que pasa a través de dos placas paralelas infinitas es simulado numéricamente aquí. Los perfiles de velocidad de flujos no Newtonianos calculados utilizando los modelos de ley de potencia, Carreau-Yasuda y ley de potencia truncada son mostrados en la Figura 11. Cuando es posible, los resultados numéricos obtenidos aquí son comparados con sus respectivas soluciones analíticas [5],[24]. Nótese que para el modelo de Carreau-Yasuda no hay una solución analítica disponible [26]. Las propiedades del fluido y la configuración geométrica considerada en estas simulaciones numéricas fueron extraídas de [24].

Los principales resultados asociados a la precisión de la herramienta indican que, teniendo en cuenta una malla computacional de 50x25 elementos, los valores RMSE de 2.4E-23 y 3.7E-13 en la Figura 11(a), 5.6E-09 y 2.7E-10 en la Figura 11 (b), y 2.6E-07 y 6.6E-7 en la Figura 11 (c) caracterizan los modelos de ley de potencia y ley de potencia truncado, respectivamente.

La influencia de los valores del gradiente de presión sobre los perfiles de velocidad asociados con cada modelo reológico puede ser también analizada de la Figura 11. Es importante primero resaltar que, los resultados mostrados en esta figura son similares a los descritos en la literatura [24]. En particular, es apreciado que, para un gradiente de presión de 5 Pa/m, perfiles de velocidad similares en magnitud son descritos por los tres modelos reológicos. Para gradientes de presión de 1 Pa/m, perfiles de velocidad similares en magnitud son obtenidos con los modelos de Carreau-Yasuda y ley de potencia truncado. Sin embargo, el perfil de velocidad obtenido con el modelo de ley de potencia parece haber sido subestimado en magnitud. Por el contrario, para el gradiente de presión de 75 Pa/m, el perfil de velocidad del modelo de ley de potencia parecer haber sido sobreestimado en magnitud. Nótese ahora que el referido gradiente de presión está relacionado directamente con la tasa de deformación a la que está sometido el flujo en esta configuración. Las limitaciones del modelo reológico de ley de potencia, para simular flujos de fluidos no Newtonianos a relativamente altas o bajas tasas de deformación, son comprobados a partir de los resultados de las simulaciones numéricas aquí realizadas. Importante resulta ahora considerar las limitaciones del modelo de ley de potencia cuando pulpas minerales sean descritas reológicamente. Modelos reológicos con más parámetros, como el modelo Carreau-Yasuda, serían preferidos en estas simulaciones.

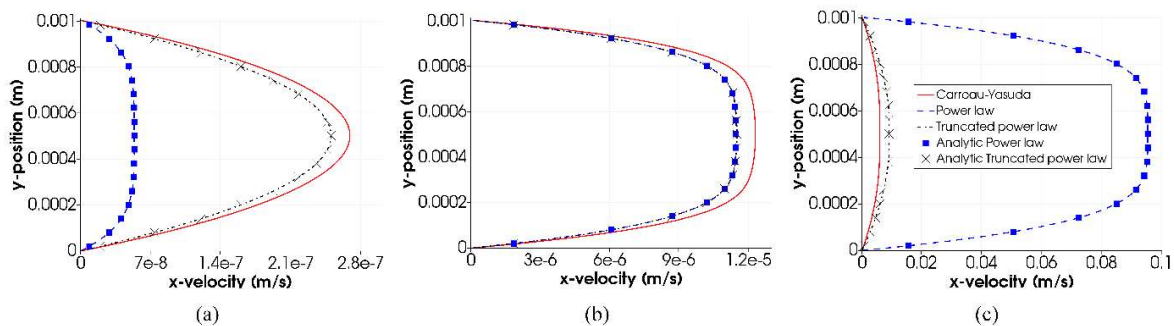


Figura 11. Perfiles de velocidad de flujos no Newtonianos obtenidos utilizando los modelos de ley de potencia, Carreau-Yasuda y ley de potencia truncado a diferentes gradientes de presión. (a) 1 Pa / m, (b) 5 Pa / m, (c) 75 Pa / m.

Con lo descrito en esta sección, la herramienta computacional ha sido ya validada para modelar el flujo en estado estacionario incompresible laminar Newtoniano y no Newtoniano bidimensional completamente desarrollado entre dos placas paralelas infinitas. En el siguiente caso de estudio, la configuración de cavidad accionada por tapa será estudiada para seguir con el proceso de validación de esta herramienta basada en FEM, cuando geometrías tri dimensionales sean consideradas.

4.3. Cavidad accionada por tapa

Configuraciones de flujo involucrando una cavidad accionada por tapa (lid-driven cavity) han sido utilizadas ampliamente en el pasado como casos de verificación estándar para nuevos códigos CFD [58]. Esta configuración también ha sido utilizada aquí para verificar que la herramienta computacional basada en FEM simule flujos Newtonianos y no Newtonianos de forma confiable. Varios trabajos anteriores han discutido el modelamiento numérico de estos flujos en configuraciones relacionadas con cavidades cuadradas impulsadas por tapas. Una revisión de los principales trabajos abordando flujos incompresibles, newtonianos y viscosos confinados en cavidades accionadas por tapas es encontrada en [58]. Chen y Shu [59] describen, por otro lado, un método “Lattice Boltzmann” simplificado para flujos de fluidos de ley de potencia no Newtoniana en este tipo de cavidades. Del mismo modo, Ku et al. [60] desarrollan un método pseudoespectral de Chebyshev para resolver las ecuaciones tridimensionales de Navier-Stokes en flujos de cavidad 3D impulsados por la tapa. Además, Mahmood et al. [25] llevaron a cabo una evaluación exhaustiva basada en FEM del modelo reológico de Carreau-Yasuda en una cavidad impulsada por la tapa.

Flujos laminares tanto Newtonianos como no Newtonianos, en una cavidad accionada por una tapa, han sido numéricamente estudiados utilizando la herramienta computacional basada en FEM. En esta sección, los principales resultados de dichos estudios llevados a cabo utilizando cavidades 2D y 3D con dos números de Reynolds diferentes son discutidos. Los resultados numéricos obtenidos aquí son comparados con otros numéricos y experimentales disponibles en la literatura abierta. Los perfiles de velocidad del flujo obtenidos mediante el uso de dos modelos reológicos diferentes, ley de potencia y Carreau-Yasuda, también son discutidos en esta sección. Finalmente, un flujo característico similar a una pulpa mineral es también estudiado aquí, teniendo en cuenta un modelo de ley de potencia no Newtoniana.

4.3.1. Descripción de la configuración

En esta sección, las principales consideraciones tomadas en cuenta en el modelamiento numérico de flujos Newtonianos y no Newtonianos en una configuración de cavidad cúbica tridimensional impulsada por la tapa son descritas. Más específicamente, la configuración geométrica considerada aquí es una cavidad cúbica impulsada por la tapa con una arista igual a 1. Nótese que, a fin de facilitar las comparaciones entre los resultados numéricos obtenidos en este trabajo con los relacionados previamente estudiados en la literatura, el valor de la arista del cubo es mantenida adimensional. Tanto el dominio computacional como la malla computacional son mostradas en la Figura 12. En esta figura, la dirección impulsada por la tapa es indicada a través de la flecha roja en la parte superior del dominio computacional. Nótese en la Figura 12 que a pesar de que la configuración geométrica estudiada es cúbica, las mallas numéricas no han sido construidas necesariamente con elementos cúbicos. Obsérvese también que la cavidad accionada por la tapa puede ser también bidimensional. En estos casos, las mismas consideraciones a las descritas anteriormente son tomadas en cuenta. Más específicamente, el lado de la cavidad cuadrada es considerado como 1, adimensional y los elementos de malla no son necesariamente cuadrados.

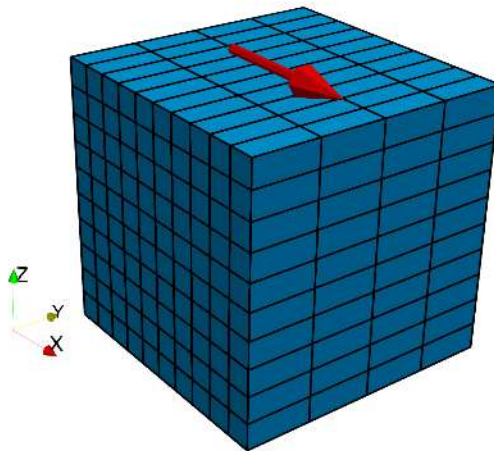


Figura 12. Dominio computacional de cavidad tridimensional accionada por tapa y malla computacional.

Con respecto a las condiciones de contorno, y siguiendo la Figura 12, la condición de contorno de la tapa impulsora es impuesta para $z = 1$. En la tapa impulsora, las componentes de velocidad x , y , y z impuestas son leídas como sigue, $u \neq 0$, $v = 0$ y $w = 0$. En todas las demás paredes de la cavidad, la condición de contorno de pared sin

deslizamiento es impuesta, lo que significa que todas las componentes de la velocidad son iguales a cero. Para casos bidimensionales, la tapa impulsora es impuesta en $y = 1$, considerando componentes $u \neq 0$ y $v = 0$.

Siguiendo la referencia [59], para pulpas modeladas con el modelo de ley de potencia, el Re en la cavidad cúbica accionada por la tapa es estimado como,

$$Re = \frac{\rho A u_b}{K(u_b/A)^{n-1}}. \quad (40)$$

Por otro lado, para pulpas descritas con el modelo Carreau-Yasuda, el Re es calculado cómo,

$$Re = \frac{\rho A u_b}{\mu_\infty + (\mu_0 - \mu_\infty)(1 + (\lambda u_b/A)^a)^{\frac{n-1}{a}}}. \quad (41)$$

En las ecuaciones (40) y (41), u_b y A son la velocidad de la tapa y la arista de la cavidad cúbica, respectivamente. Nótese que en las ecuaciones (40) y (41), el Re para cavidades conteniendo fluidos Newtonianos puede ser estimado considerando $n = 1$.

4.3.2. Cavidad 2D accionada por tapa con un fluido Newtoniano

En esta sección, una cavidad cuadrada bidimensional accionada por una tapa conteniendo un fluido Newtoniano es inicialmente estudiada. Los resultados numéricos discutidos en esta sección son comparados con los obtenidos por Ghia et al. [61] en números de Reynolds (Re) de 100 y 400. En consecuencia, los resultados de independencia de malla basados en el RMSE, involucrando las componentes de velocidad u y v a lo largo de líneas verticales y horizontales que pasan a través del centro geométrico de la cavidad, son mostrados en la Figura 13 (a). Estos resultados indican en particular que cuando la malla tiene más de 200 elementos, los valores de RMSE permanecen casi constantes y menores a 5%.

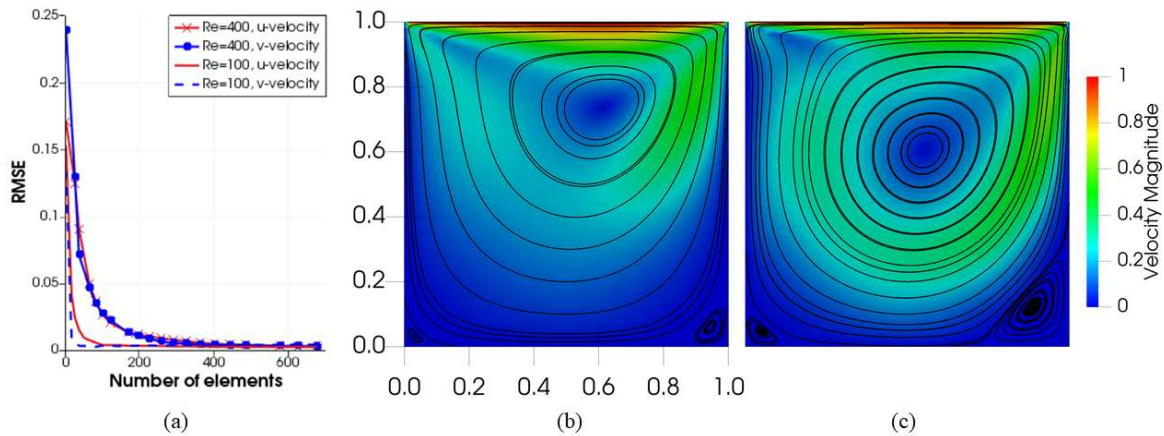


Figura 13. (a) RMSE vs número de elementos de malla. Contornos de velocidad en una cavidad cuadrada bidimensional impulsada por una tapa y patrones de línea de flujo calculados por la herramienta basada en FEM para (b) $Re = 100$ y (c) $Re = 400$.

Los contornos de velocidad en la cavidad impulsada por la tapa y los patrones de línea de flujo calculados por la herramienta basada en FEM para $Re = 100$ y $Re = 400$ son mostrados en la Figura 13 (b) y (c), respectivamente. Una malla de 676 elementos con una relación de aspecto igual a uno fue utilizada para la obtención de estos resultados. En particular, los patrones de línea de corriente incluidos en estos gráficos revelan que el centro del remolino principal se mueve hacia el centro geométrico de la cavidad a medida que aumenta el número de Reynolds [58]. El crecimiento de remolinos secundarios (ubicados en las regiones inferiores izquierda y derecha de la cavidad) también son observados en la Figura 13 (b) y (c) a medida que aumenta el Re . Además, las velocidades u a lo largo de la línea vertical y las velocidades v a lo largo de la línea horizontal que pasa por el centro geométrico de la cavidad cuadrada para $Re = 100$ y $Re = 400$ son mostradas en la Figura 14. Los resultados numéricos obtenidos aquí son comparados con los obtenidos por Ghia et al. [61]. Obsérvese, en la Figura 14, que los resultados de la herramienta basada en FEM y los de Ghia et al. [61] son similares. Dicha similitud es cuantificada con los valores medios de RMSE para $Re = 100$ y $Re = 400$, los cuales son, de hecho, cercanos a 0.0027 y 0.036, respectivamente.

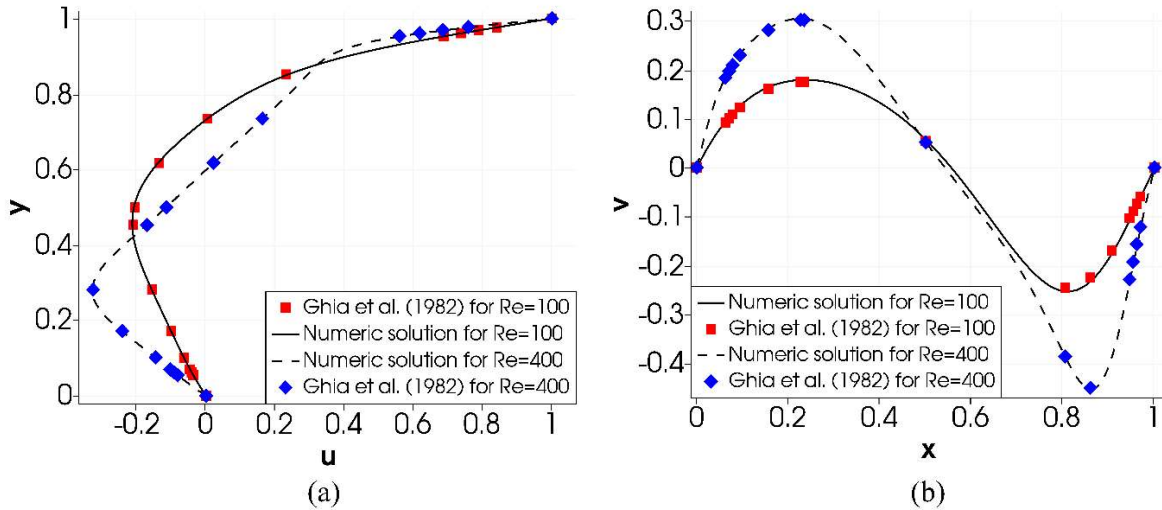


Figura 14. (a) velocidades u a lo largo de la línea vertical y (b) velocidades v a lo largo de la línea horizontal que pasa por el centro geométrico de la cavidad cuadrada para $Re = 100$ y $Re = 400$.

4.3.3. Análisis de independencia de malla para cavidades 3D conteniendo fluidos Newtonianos y no Newtonianos

Los análisis de independencia de malla son aquí realizados para minimizar la influencia del nivel de refinamiento de malla (parámetro arbitrario) en los resultados numéricos obtenidos. En los análisis referidos, al considerar una cavidad tridimensional impulsada por una tapa y flujos de fluidos Newtonianos, $Re = 100$ y $Re = 400$ son utilizados. Estos Re particulares han sido seleccionados debido a su consideración en varios trabajos anteriores [58]. Los resultados de esta primera evaluación de independencia de la malla son mostrados en la Figura 15. En este caso, como malla de referencia para estimar los valores correspondientes del RMSE, una malla de 900 elementos es utilizada. Varias simulaciones numéricas fueron realizadas con el fin de obtener valores de RMSE que no varíen significativamente con el número de elementos de la malla. Véase que en la Figura 15, en los estudios de independencia de malla, solo dos componentes de la velocidad (u y w) son tomadas en cuenta. La referida consideración obedece al hecho de que estos componentes son predominantes en la física del flujo. De la Figura 15, para lograr resultados independientes de la malla utilizada, mallas menos refinadas son requeridas para $Re = 100$ que para $Re = 400$. Note que, la independencia de malla es alcanzada cuando el valor de RMSE de la simulación es menor o igual a 0.01. De hecho, en $Re = 100$, las mallas con más de 150 elementos finitos no originan variaciones significativas en los valores de RMSE. Una situación similar ocurre en $Re = 400$, pero en este caso para mallas con más de 500

elementos finitos (Figura 15). Este comportamiento de independencia de la malla es esperado ya que los flujos con Re más altos requieren refinamientos de malla mayores [58].

Debido a que pulpas minerales pueden ser modeladas como fluidos monofásicos no Newtonianos [19], fluidos no Newtonianos también han sido analizados en los estudios de independencia de malla llevados a cabo aquí. Por lo tanto, cavidades 3D impulsadas por tapas involucrando flujos de fluidos de ley de potencia, con dos Re (100 y 400) y dos índices de comportamiento de flujo ($n = 0.5$ y $n = 1.5$), han sido simulados numéricamente aquí. Los resultados de la evaluación de la independencia de la malla referida son mostrados en la Figura 16. Este caso involucra el uso de una malla de 1000 elementos finitos como malla de referencia para estimar los valores de RMSE. Al comparar los resultados de la Figura 15 y la Figura 16, en ambos flujos Newtonianos y no Newtonianos, los valores de RMSE calculados siguen las mismas tendencias. Véase además en la Figura 16, en comparación con un fluido pseudo-plástico ($n < 1$), resultados independientes de malla con mallas menos refinadas son obtenidos en el caso de un líquido dilatante ($n > 1$). Para todos los casos mostrados en la Figura 16, los valores de RMSE no varían más significativamente para mallas con más de 380 elementos finitos. Estos hallazgos relacionados con la independencia de la malla han sido considerados en las simulaciones numéricas discutidas en la siguiente sección.

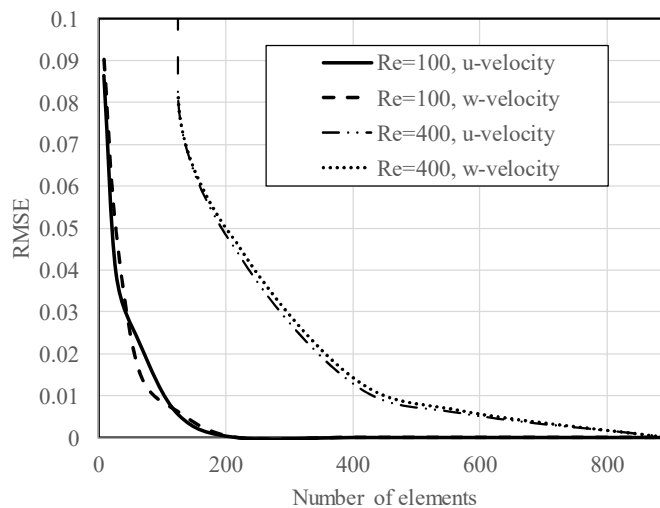


Figura 15. RMSE versus Número de elementos de malla para una cavidad 3D accionada por tapa conteniendo un fluido Newtoniano.

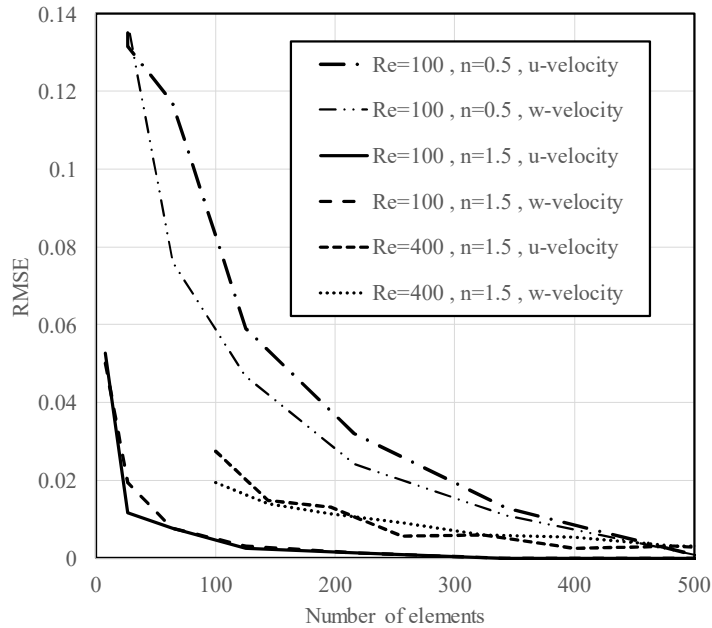


Figura 16. RMSE versus Número de elementos de malla para una cavidad 3D accionada por tapa conteniendo un fluido no Newtoniano. (Modelo reológico: ley de potencia).

4.3.4. Perfiles de velocidad 2D vs 3D de cavidad accionada por tapa con un fluido Newtoniano

Inicialmente, un flujo de un fluido Newtoniano en una cavidad tridimensional impulsada por la tapa es utilizado para validar la herramienta basada FEM. Los resultados numéricos discutidos en esta sección han sido comparados con los correspondientes presentados por Ku et al. [60] en $Re = 100$. Siguiendo los resultados obtenidos en la Sección 4.3.3, una malla de 216 elementos finitos es utilizada aquí. Los perfiles de velocidad sobre las líneas centrales verticales y horizontales de la cavidad impulsada por la tapa son mostrados en la Figura 17 y Figura 18, respectivamente. Nótese que, en estas dos figuras, tanto las velocidades como las dimensiones han sido normalizadas para permitir comparaciones con los resultados referenciados. Particularmente, en la Figura 17 y la Figura 18, los perfiles de velocidad de flujo de la cavidad accionada por la tapa en bidimensional y tridimensional son comparados. Nótese que los resultados obtenidos con la herramienta computacional basada en FEM son consistentes con los presentados por Ku et al. [60] y las diferencias, si las hay, son mínimas. Este resultado destaca la utilidad de la herramienta en discusión en este trabajo.

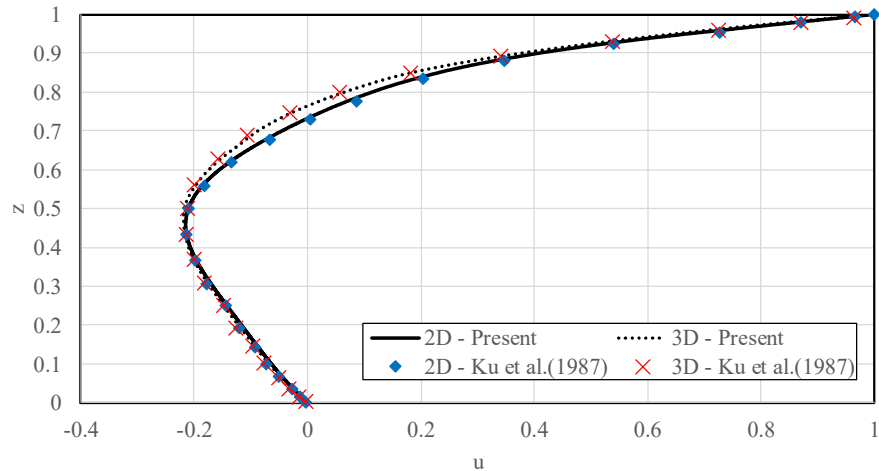


Figura 17. Perfil de velocidad de flujo de fluido Newtoniano en $Re = 100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

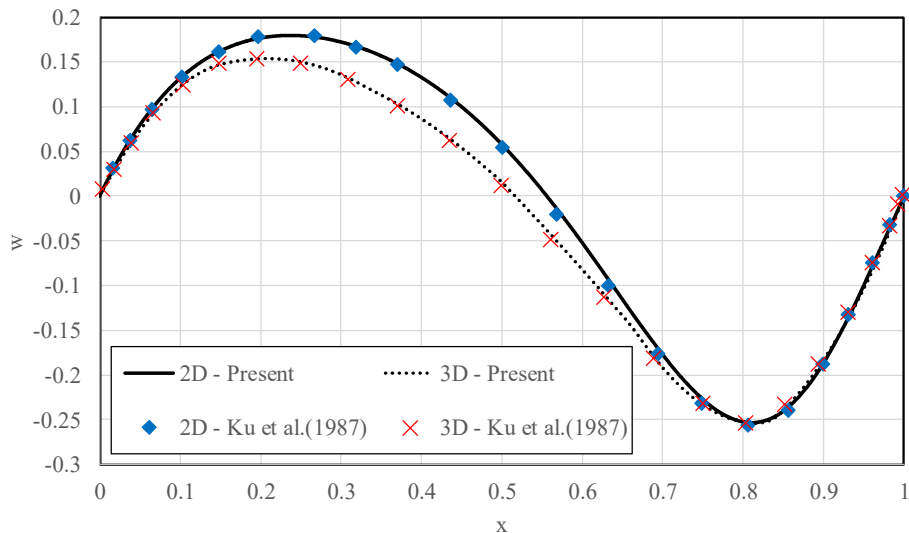


Figura 18. Perfil de velocidad de flujo de fluido Newtoniano en $Re = 100$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

4.3.5. Cavidad 3D accionada por tapa con un fluido no Newtoniano ley de potencia

En esta sección, un flujo relacionado con una cavidad tridimensional impulsada por la tapa involucrando un fluido no Newtoniano de ley de potencia es estudiado. Los principales resultados obtenidos en esta sección son comparados con los de Chen et al. [59]. Siguiendo los resultados obtenidos en la Sección 4.3.3, una malla de 400 elementos finitos es utilizada aquí. Para permitir comparaciones con los datos obtenidos de [59], el índice de comportamiento de flujo (n) considerado para este análisis es igual a 1.5. Los perfiles de

velocidad a lo largo de las líneas centrales verticales y horizontales de la cavidad accionada por la tapa son mostrados en la Figura 19 y la Figura 20, respectivamente. Los resultados descritos en estas figuras corresponden a $Re = 400$. Obsérvese que existen aparentes diferencias entre los resultados obtenidos por Chen et al. [59] y los obtenidos aquí. Una razón de tales discordancias puede asociarse a la diferencia entre los esquemas de discretización usados en [59] y en la presente herramienta computacional basada en FEM. Sin embargo, a pesar de las aparentes diferencias, es posible afirmar que los resultados obtenidos con la herramienta computacional basada en FEM son cualitativamente concordantes con los obtenidos en [59].

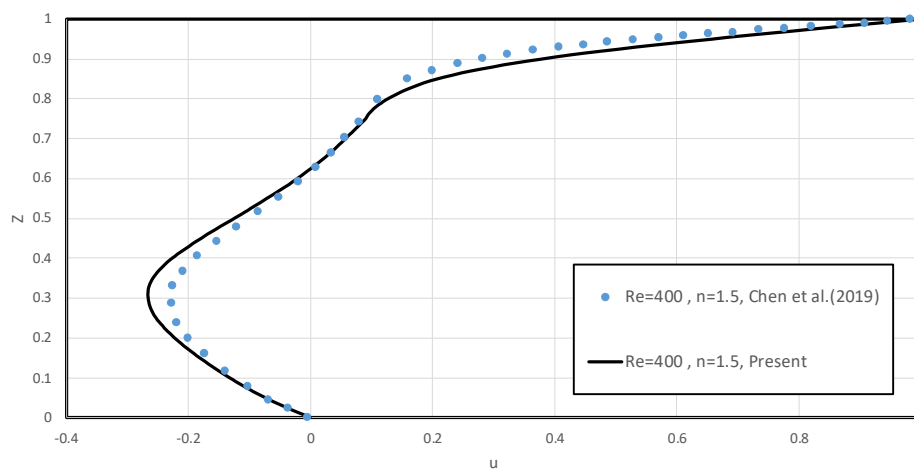


Figura 19. Perfil de velocidad de flujo de fluido no Newtoniano modelado con el modelo ley de potencia en $Re = 400$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

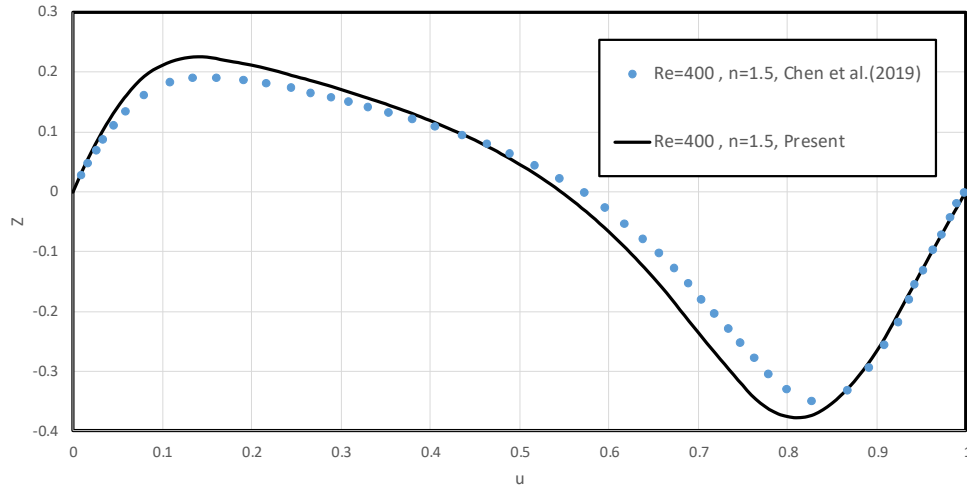


Figura 20. Perfil de velocidad de flujo de fluido no Newtoniano modelado con el modelo ley de potencia en $Re = 400$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

Flujos de fluidos no Newtonianos en una cavidad tridimensional impulsada por la tapa a $Re = 100$, donde las comparaciones entre diferentes propiedades reológicas son particularmente destacadas, son revisados a continuación. Los perfiles de velocidad correspondientes a lo largo de las líneas centrales verticales y horizontales de la cavidad cúbica impulsada por la tapa para tres índices de comportamiento de flujo diferentes ($n = 0.5, 1, 1.5$) son mostrados en la Figura 21 y Figura 22, respectivamente. En todos los casos el índice de consistencia (K) fue igual a $0.056 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$. Para el mismo Re , como esperado, los perfiles de velocidad mostrados en estas figuras difieren entre sí. Este comportamiento reológico resulta del hecho de que la viscosidad aparente modelada por el modelo ley de potencia es una función del índice de comportamiento del flujo. Otra característica interesante observada de estos resultados es que hay un punto dentro del dominio donde, para los tres casos, los componentes del vector de velocidad son equivalentes. Obsérvese aquí que un índice de comportamiento de flujo de ($n = 1$) corresponde a un flujo de fluido Newtoniano.

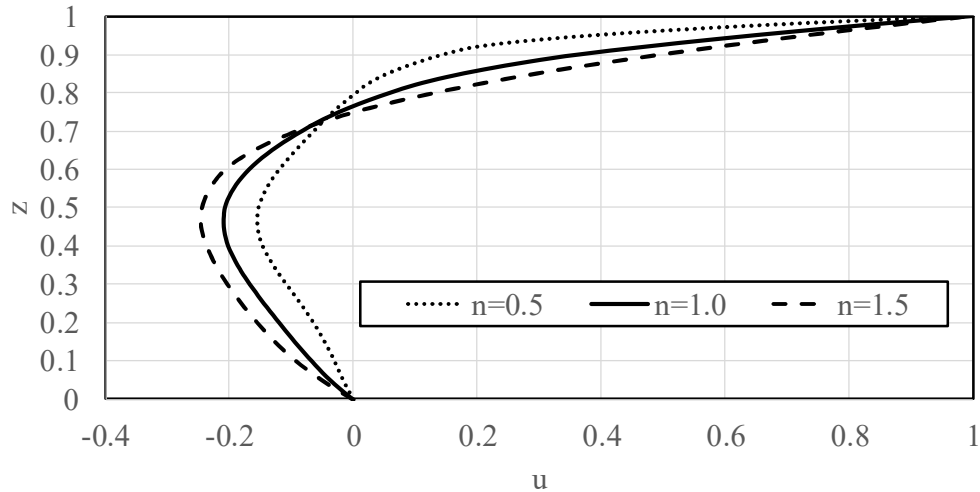


Figura 21. Perfiles de velocidad en función del índice de consistencia de tres fluidos no Newtonianos modelados con el modelo ley de potencia en $Re = 100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

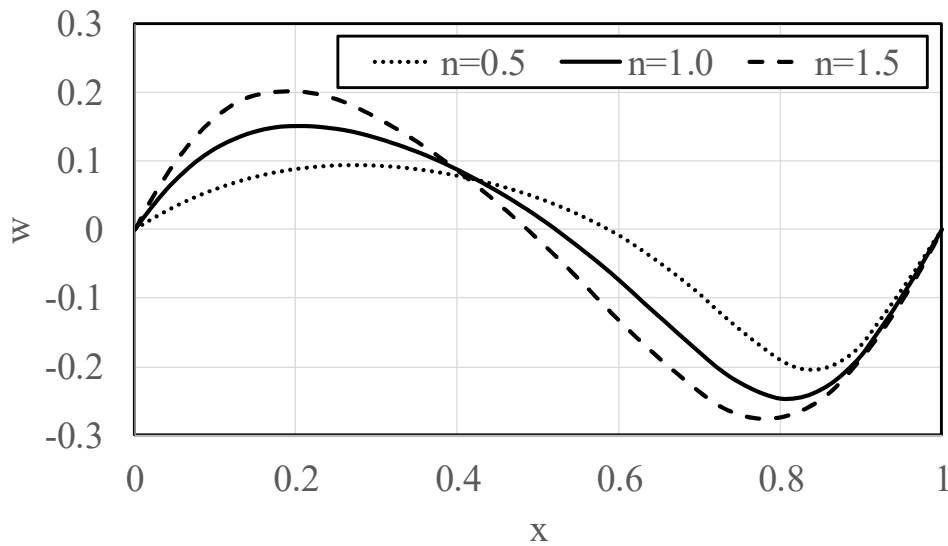


Figura 22. Perfiles de velocidad en función del índice de consistencia de tres fluidos no Newtonianos modelados con el modelo ley de potencia en $Re = 100$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

4.3.6. Cavidad 3D accionada por tapa con un fluido no Newtoniano Carreau-Yasuda

En esta sección, flujos de fluidos no Newtonianos en una cavidad tridimensional impulsada por la tapa, calculados utilizando el modelo reológico de Carreau-Yasuda, son estudiados. Una malla de 400 elementos finitos es utilizada aquí para realizar el modelamiento numérico

asociado. Los parámetros del modelo de Carreau-Yasuda requeridos para las simulaciones numéricas han sido tomados de [25] y son detallados en la Tabla 2. La influencia en los perfiles de velocidad de flujo de la cavidad 3D impulsada por la tapa de algunos parámetros del modelo Carreau-Yasuda, como el tiempo de relajación del fluido y el índice de comportamiento de flujo, son abordados particularmente aquí. Por consiguiente, los perfiles de velocidad del flujo, en función del índice de comportamiento (n) del flujo a lo largo de las líneas centrales verticales y horizontales de la cavidad accionada por la tapa, son mostrados en la Figura 23 y Figura 24, respectivamente. Los perfiles de velocidad en función del tiempo de relajación del fluido (λ) sobre las mismas líneas centrales de la cavidad son ilustrados a seguir en la Figura 25 y Figura 26. Vale la pena recalcar aquí que, incluso cuando los modelos de ley de potencia y de Carreau-Yasuda son adecuados para estimar la viscosidad dinámica aparente en fluidos pseudoplásticos, no hay forma de comparar directamente los resultados obtenidos entre estos dos modelos en esta configuración. Sin embargo, para resaltar la desviación entre un perfil de velocidad de flujo de fluido Newtoniano y uno pseudo plástico, en la Figura 23 a la Figura 26, también han sido incluidos perfiles de velocidad para un flujo de fluido Newtoniano en $Re = 100$.

Tabla 2. Valores de los parámetros para el modelo de Carreau Yasuda [25].

μ_0 [Pa.s]	μ_∞ [Pa.s]	λ [s]	a	n
0.056	0.00345	1.902	1.25	0.22

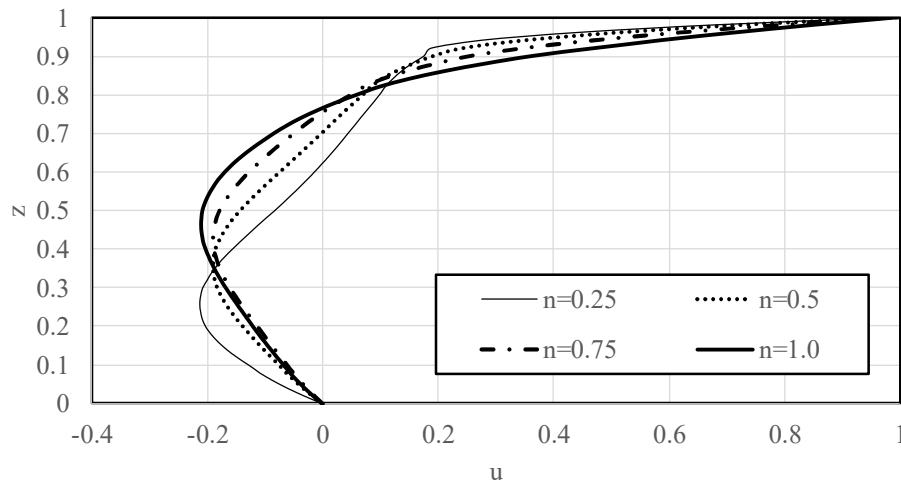


Figura 23. Perfiles de velocidad en función del índice de consistencia de cuatro fluidos no Newtonianos modelados con el modelo Carreau-Yasuda en $Re = 100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

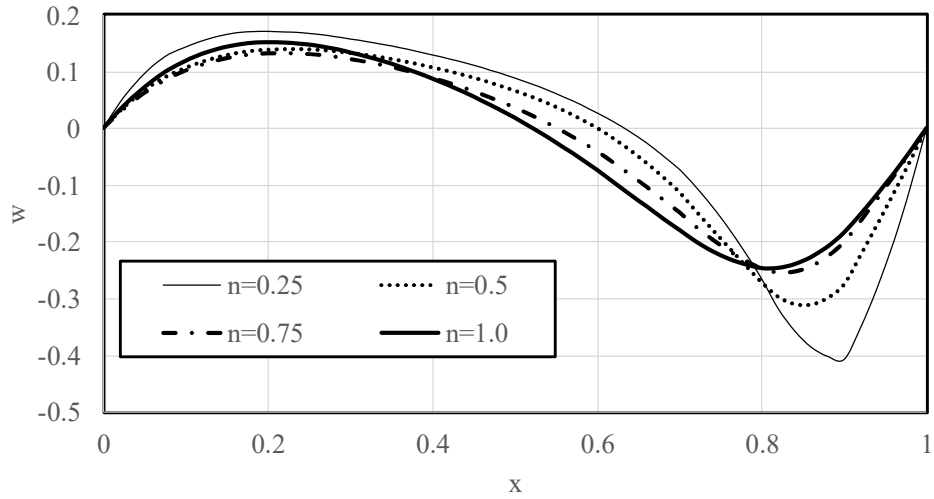


Figura 24. Perfiles de velocidad en función del índice de consistencia de cuatro fluidos no Newtonianos modelados con el modelo Carreau-Yasuda en $Re = 100$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

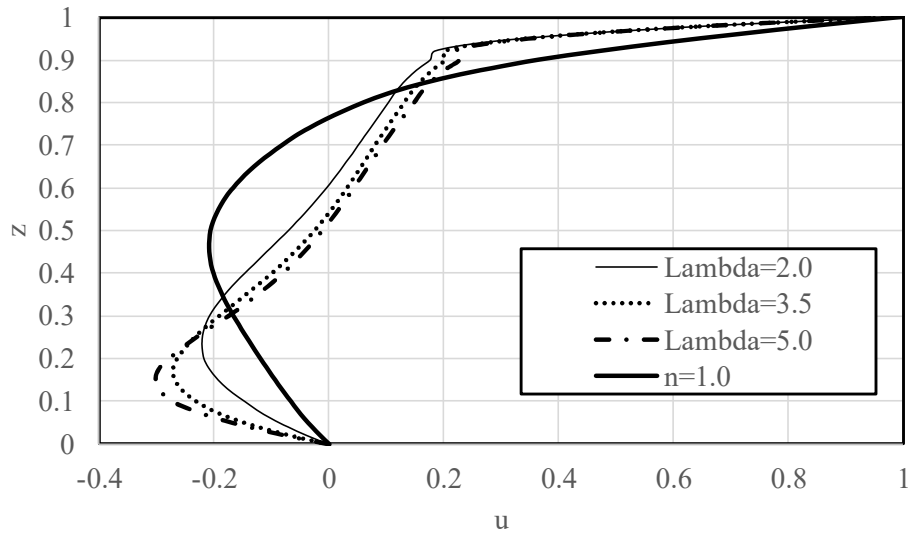


Figura 25. Perfiles de velocidad en función del tiempo de relajación de cuatro fluidos no Newtonianos modelados con el modelo Carreau-Yasuda en $Re = 100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

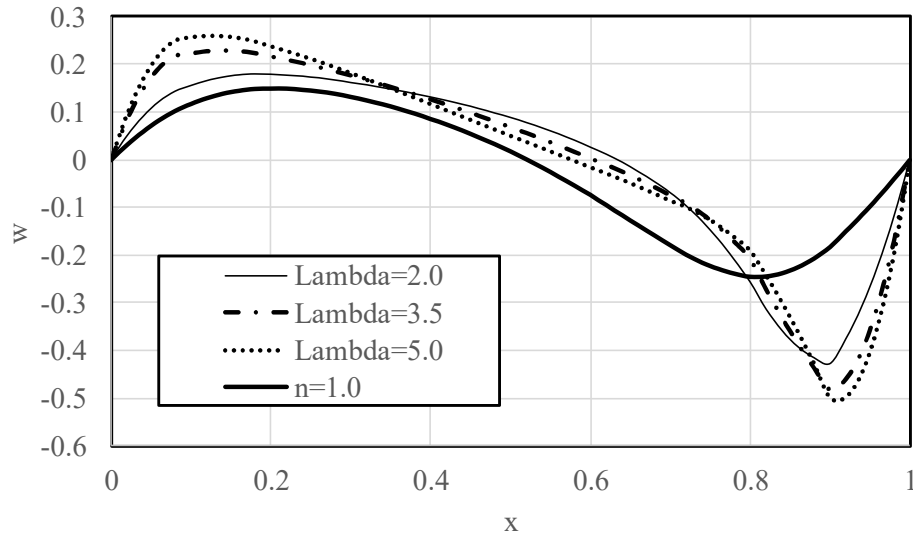


Figura 26. Perfiles de velocidad en función del tiempo de relajación de cuatro fluidos no Newtonianos modelados con el modelo Carreau-Yasuda en $Re = 100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

Vale la pena notar aquí que las tasas de deformación más altas son observadas cerca de las paredes sin deslizamiento de la cavidad, $x = 1$ y $z = 1$ en la Figura 23 a la Figura 26. Como es apreciado en estas figuras, por lo tanto, los perfiles de velocidad de flujo no Newtoniano cerca de estas paredes sin deslizamiento difieren de los correspondientes a flujos Newtonianos. Además, es esperado que el fluido tienda a comportarse como un pseudo plástico a medida que aumenta el tiempo de relajación [62], y disminuye el índice de comportamiento del flujo. Las tensiones de estado estacionario en los flujos de cizallamiento, como los encontrados en una cavidad accionada por una tapa, son funciones únicamente de la tasa de deformación [63]. Por consiguiente, debido a que, en fluidos pseudo plásticos, la viscosidad disminuye con el aumento de la tasa de deformación, las velocidades del flujo cercano a las paredes sin deslizamiento tienden a aumentar.

4.3.7. Cavidad 3D accionada por tapa con una pulpa mineral

Como ejemplo de una situación más práctica en que la herramienta computacional basada en FEM puede ser usada, en esta sección, los flujos de un fluido similar a una pulpa mineral, contenida en una cavidad cúbica tridimensional impulsada por una tapa, son estudiados. El fluido similar a la pulpa mineral es modelado teniendo en cuenta un $Re = 100$ y un modelo reológico de ley de potencia, cuyos principales parámetros característicos incluyen (i) $\rho = 1370 \text{ kg/m}^3$, (ii) $K = 1.6 \text{ Pa}\cdot\text{s}^n$ y (iii) $n = 0.4$ [4]. Para efectos de comparación, la pulpa mineral aquí discutida ha sido también modelada como un fluido Newtoniano (caso de

referencia) considerando $n = 1.0$. Para permitir tales comparaciones, los campos de velocidad son normalizados por la correspondiente velocidad de la tapa de la cavidad (u_b). En las simulaciones numéricas realizadas, una malla de 2197 elementos finitos es utilizada. Los patrones de líneas de flujo dentro de la cavidad tridimensional impulsada por la tapa y a lo largo del plano de simetría paralelo a la velocidad de la tapa son mostrados en la Figura 27. Por otro lado, los perfiles de velocidad de flujo a lo largo de las líneas centrales verticales y horizontales del plano de simetría son ilustrados en la Figura 28 y Figura 29, respectivamente.

En los gráficos del lado izquierdo de la Figura 27, el efecto del vórtice primario sobre los patrones de líneas de corriente para los flujos de ley de potencia tanto Newtonianos como no Newtonianos es apreciado. En comparación con el caso no Newtoniano, el vórtice primario formado en el Newtoniano parece estar directamente influido por las fuerzas inerciales asociadas al flujo. Esto significa que las líneas de corriente, resaltadas en color negro en la Figura 27 (superior izquierdo), son afectadas por este vórtice, incluso cuando están distantes del plano de simetría. Debido a las mayores fuerzas viscosas que lo caracterizan, este comportamiento es menos pronunciado en el flujo no Newtoniano. Además, como es observado en las gráficas del lado derecho en la Figura 27, en comparación con el caso Newtoniano (superior derecho), en el flujo no Newtoniano (inferior derecho), como consecuencia de la velocidad de la tapa relativamente menor requerida para lograr el mismo número de Reynolds, la ubicación del vórtice primario tiende a estar más cerca de la esquina superior derecha de la cavidad [58]. De la Figura 28 y Figura 29, a su vez, debido a la presencia de mayores fuerzas viscosas, los valores máximos que caracterizan los perfiles de velocidad, y sus respectivos gradientes, en $z = 0$ y $z = 1$, asociados con el flujo no Newtoniano son menores que los obtenidos en el caso del flujo Newtoniano. De manera análoga, en la Figura 29, mayores velocidades, y gradientes de esta, son encontrados para el fluido Newtoniano con respecto al no Newtoniano cerca de las paredes laterales ($x = 0$ y $x = 1$). De ambas figuras es posible concluir que las velocidades del flujo no Newtoniano similar a la pulpa mineral, así como sus respectivos gradientes, son principalmente gobernadas por las fuerzas viscosas cerca de las paredes de la cavidad.

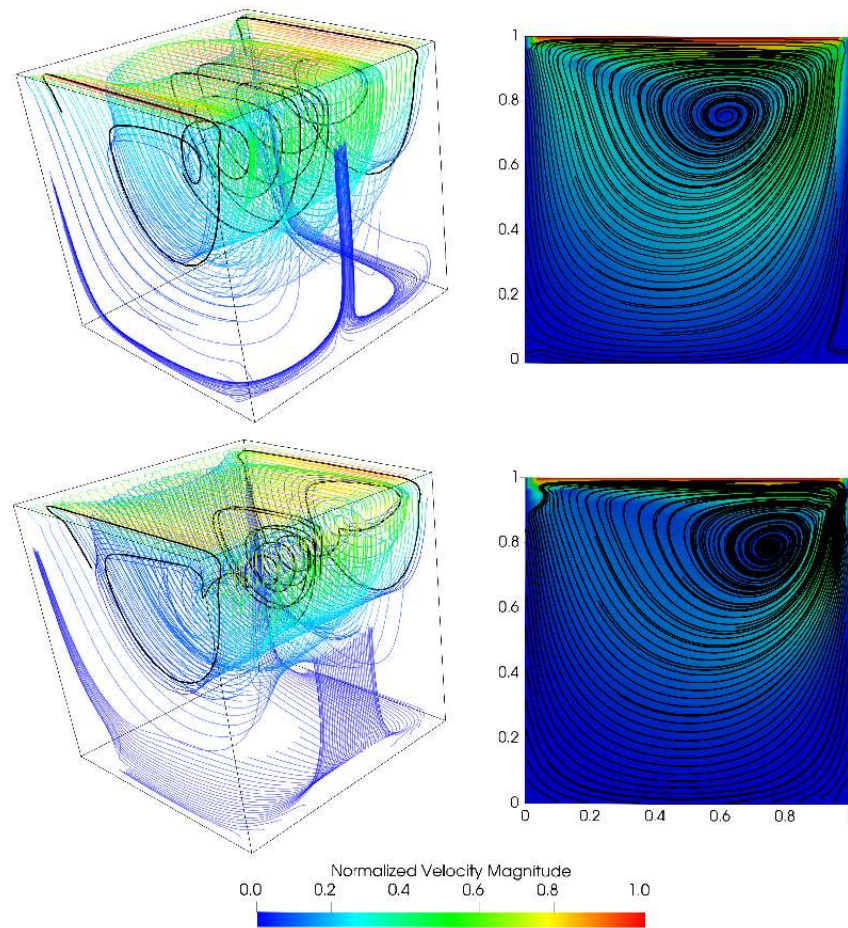


Figura 27. Líneas de corriente en una cavidad cúbica impulsada por la tapa (izquierda) y contornos de velocidad a lo largo del plano de simetría (derecha) para flujos similares a pulpas minerales modelados como fluidos Newtonianos (superior) y no Newtonianos con el modelo ley de potencia (inferior).

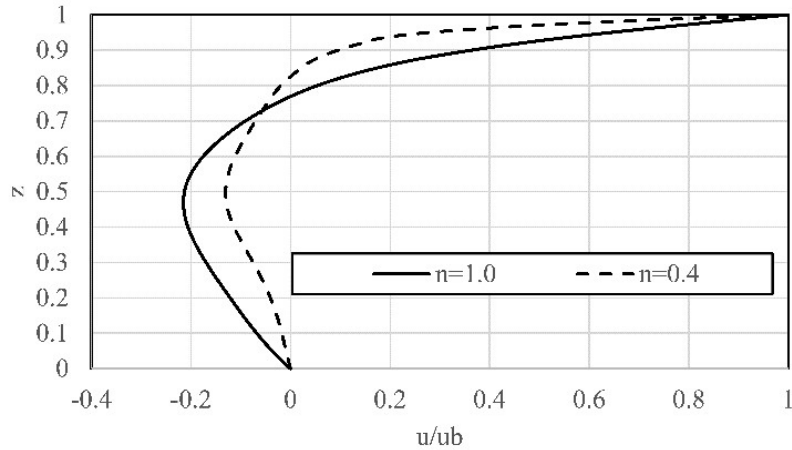


Figura 28. Perfil de velocidad de flujo similar a pulpa mineral modelado con el modelo ley de potencia para $Re = 100$ a lo largo de la línea central vertical de una cavidad impulsada por la tapa cúbica.

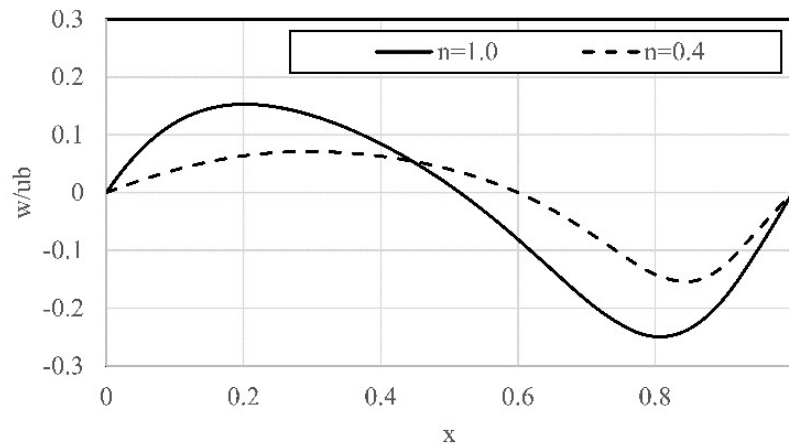


Figura 29. Perfil de velocidad de flujo similar a una pulpa mineral modelado con el modelo ley de potencia en $Re = 100$ a lo largo de la línea central horizontal de una cavidad cúbica impulsada por la tapa.

4.4. Cámara receptora de pulpas minerales

Como ejemplo de situaciones de ingeniería en donde esta herramienta puede ser aplicada, la cámara receptora de una caja de distribución de pulpa [64] también ha sido simulada utilizando la herramienta computacional basada en FEM. Cuando la pulpa mineral presenta velocidades de flujo relativamente bajas y contiene grandes cantidades de partículas sólidas finas, el transporte de la pulpa mineral puede ser considerado como un flujo monofásico laminar no Newtoniano [4]. La situación referida es analizada aquí utilizando la herramienta computacional basada en FEM. En particular, diferentes patrones de flujo, campos de velocidad y configuraciones geométricas asociadas con este dispositivo de

transporte de pulpas minerales son analizados. En este trabajo, una configuración geométrica particular de una caja receptora de pulpas minerales, como la mostrada en la Figura 30 (a), ha sido considerada. Obsérvese que, en esta figura, la distancia vertical de la salida de la pulpa mineral medida desde el fondo del dispositivo es representada como Y . Esta distancia vertical ha sido variada en las simulaciones numéricas realizadas aquí para los análisis de flujo realizados. Todos los resultados discutidos en esta sección son obtenidos teniendo en cuenta un modelo reológico de ley de potencia, y los mismos parámetros de la pulpa mineral considerados en la Sección 4.3.7.

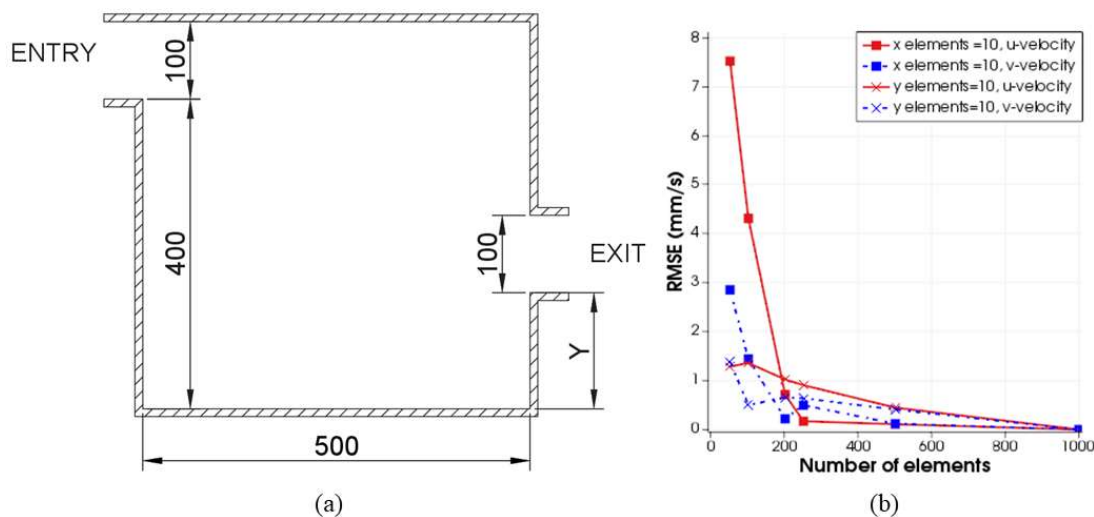


Figura 30. (a) Configuración geométrica de la cámara receptora de pulpa mineral (unidades en mm). (b) RMSE versus número de elementos de malla.

Inicialmente, como es mostrado en la Figura 30 (b), teniendo en cuenta una malla de 1000 elementos como malla de referencia para calcular los valores de RMSE, una evaluación de la independencia de la malla ha sido realizada. Varias simulaciones numéricas fueron hechas aumentando gradualmente el número de elementos de malla a lo largo de un eje y manteniendo constante este número a lo largo del otro, es decir, variando la relación de aspecto de los elementos de malla. Por ejemplo, las curvas de símbolos cuadrados en la Figura 30 (b) son obtenidas a partir de simulaciones donde el número de elementos de malla a lo largo del eje x es constante e igual a 10. De manera similar, las curvas de símbolos x corresponden a simulaciones donde el número de elementos de malla a lo largo del eje y es igual a 10. Observe que los valores de RMSE de los dos componentes de velocidad son consideradas en esta etapa de verificación inicial. Los resultados mostrados en la Figura 30 (b) indican que, en particular, cuando la malla tiene más de 500 elementos, los valores de RMSE (inferiores a 0,5 mm/s) ya no varían significativamente.

Los principales resultados obtenidos de las simulaciones numéricas de la cámara receptora de pulpas minerales realizadas son resumidos en la Figura 31. En particular, la Figura 31 (a) a (c) y la Figura 31(d) a (f) muestran, respectivamente, las líneas de corriente y los contornos de velocidad que caracterizan los flujos de pulpas minerales puramente Newtonianas ($n = 1.0$) y no Newtonianas ($n = 0.4$) en la cámara receptora cuando la ubicación de la salida del flujo es variada. Para obtener estos resultados, un perfil de velocidad constante en la entrada de la cámara receptora de 75 mm/s fue impuesto. Los resultados referidos destacan en particular que tanto los campos de velocidad como los tamaños de los remolinos están influenciados por las propiedades reológicas del fluido y las ubicaciones de salida del flujo. Al aumentar Y , de hecho, remolinos progresivamente más grandes en la esquina inferior izquierda de la cámara son formados y los de la esquina superior derecha casi desaparecen. La ubicación adecuada de estos remolinos es importante porque la sedimentación es fomentada en las regiones que contienen remolinos.

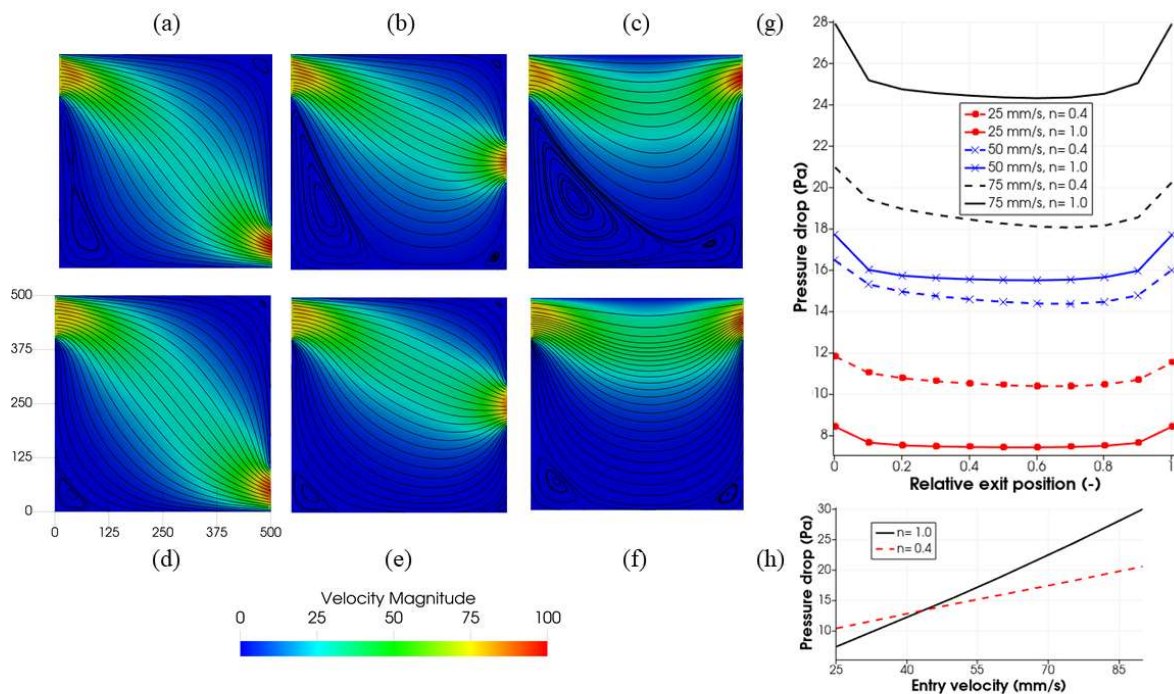


Figura 31. Contornos de velocidad y patrones de línea de corriente que caracterizan los flujos Newtonianos ($n = 1.0$) ((a) a (c)) y de pulpas minerales ($n = 0.4$) que pasan a través de la cámara receptora para las posiciones de salida Y de 0 mm ((a), (d)), 200 mm ((b), (e)) y 400 mm ((c), (f)). (g) Caída de presión versus posición relativa de salida para diferentes velocidades de entrada impuestas y propiedades reológicas. (h) Caída de presión versus velocidad de entrada a la cámara receptora para flujos Newtonianos y de pulpas minerales en $Y = 250$ mm.

Como es ilustrado en la Figura 31 (g), las caídas de presión en función de la ubicación de salida del flujo (valor Y), la velocidad de entrada del flujo, y las propiedades reológicas del fluido también han sido estudiadas. Este gráfico muestra en primer lugar que, para las tres velocidades de entrada impuestas, las caídas de presión más altas son obtenidas en las ubicaciones relativas de salida del flujo de 0 y 1, $Y = 0$ e $Y = 400$ mm, respectivamente. Además, para velocidades de entrada de flujo relativamente bajas (≈ 25 mm/s), en comparación con el caso Newtoniano ($n = 1.0$), el flujo de pulpa mineral ($n = 0.4$) presenta mayores caídas de presión. Este hallazgo proviene del uso del modelo de ley de potencia, que aumenta considerablemente la viscosidad en bajos gradientes de velocidad (tasas de deformación). Este último aspecto es confirmado analizando los resultados mostrados en la Figura 31 (h). En esta figura, la relación entre las propiedades reológicas del fluido y las caídas de presión para diferentes velocidades de entrada de flujo en una única ubicación de salida de flujo, $Y = 250$ mm, es mostrada. De acuerdo con los resultados mostrados en la Figura 31 (h), a velocidades de entrada de flujo relativamente altas (75 mm/s), caídas de presión relativamente más altas caracterizan los flujos Newtonianos (Figura 31 (g)). A raíz de estos resultados, los diseñadores de dispositivos de transporte de pulpas minerales pueden definir configuraciones de dispositivos adecuadas de acuerdo con sus requerimientos.

4.5. Transporte de pulpas minerales reales

En esta sección, los principales resultados obtenidos de simulaciones numéricas involucrando el transporte de pulpas minerales reales, realizadas utilizando la herramienta basada en FEM que está siendo discutida, son presentados. De acuerdo a ello, en primer lugar, dos configuraciones canónicas asociadas al transporte de pulpas minerales para estudiar los flujos similares a los de las pulpas minerales son descritas. Una de ellas es de particular interés en este trabajo, el tubo circular horizontal. A continuación, los análisis de independencia de malla y de paso de tiempo realizados son descritos. Finalmente, los resultados de los estudios que involucran pulpas minerales reales y los relacionados con la escalabilidad computacional de la herramienta FEM son expuestos y discutidos.

4.5.2. Configuraciones canónicas del flujo

Para estudiar numéricamente pulpas minerales reales, dos configuraciones de flujo canónico generalmente empleadas en el transporte de pulpas minerales, (i) flujo de canal (CF) y (ii) tubo circular (CT), han sido consideradas. En la Figura 32, una representación esquemática de estas dos configuraciones de flujo y sus correspondientes parámetros

geométricos principales son mostrados. Véase en esta figura que, ambos dominios tridimensionales son caracterizados por tres parámetros geométricos principales, L (largo), W (ancho) y H (alto). Los valores de los referidos parámetros geométricos (en términos de h, donde $h = 0.1$ m) son resumidos en la Tabla 3. Evidentemente, para llevar a cabo simulaciones numéricas de flujos similares a las pulpas minerales utilizando estas dos configuraciones de flujo, es necesario utilizar condiciones de contorno adecuadas. En consecuencia, las condiciones de contorno impuestas a cada configuración de flujo empleada aquí son mostradas en la Tabla 4. Obsérvese que, como fue descrito en la Sección 3.3.2, ambos dominios computacionales son considerados aquí como paralelepípedos con seis fronteras (contornos). De hecho, CT es construido a partir de una configuración basada en paralelepípedos. Por lo tanto, seis fronteras son también consideradas para la configuración de flujo de CT. La definición matemática de las condiciones de contorno incluidas en la Tabla 4 ha sido descrita en la Sección 1.2.

Tabla 3. Parámetros geométricos de las configuraciones canónicas.

Configuración	L	W	H
CF	10h	2h	h
CT	10h	$\sqrt{2}h$	$\sqrt{2}h$

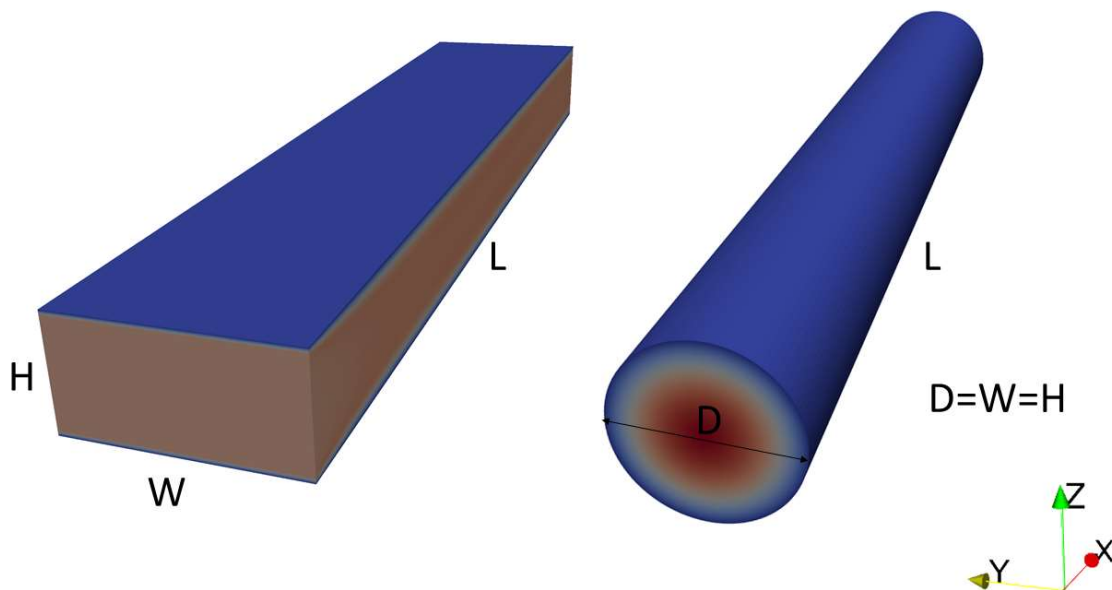


Figura 32. Dominios computacionales: flujo en un canal entre dos placas paralelas (izquierda) y tubo circular (derecha).

Tabla 4. Condiciones de contorno de las configuraciones canónicas.

Configuración	LEFT	RIGHT	FRONT	BACK	BOTTOM	TOP
CF	Perfil de velocidad	Salida de flujo completamente desarrollada	Periódica	Periódica	Pared no deslizante	Pared no deslizante
CT	Perfil de velocidad	Salida de flujo completamente desarrollada	Pared no deslizante	Pared no deslizante	Pared no deslizante	Pared no deslizante

4.5.3. Análisis de independencia de la malla y de paso de tiempo

En esta sección, análisis de independencia de malla y paso de tiempo computacional son realizados de manera simultánea considerando el número de Courant-Friedrichs-Levy (CFL), definido como [65],

$$CFL = u_i \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \quad (42)$$

En la ecuación (42), u_i es una componente de velocidad en un elemento finito dado de tamaño Δx_i , y Δt es el paso de tiempo. Observe que el CFL es usado principalmente como una condición de convergencia para resolver ecuaciones diferenciales parciales en esquemas explícitos de integración en el tiempo [65]. En este trabajo, sin embargo, el CFL es utilizado como un parámetro que relaciona las discretizaciones espaciales y temporales. Como es esperado, con la ecuación (42), varios valores de CFL son calculados en todo el dominio computacional. Sin embargo, solo el valor máximo, es decir, CFL_{max} es considerado aquí para los análisis de independencia de la malla y de paso de tiempo realizados. Más específicamente, todas las simulaciones realizadas en esta sección han sido hechas considerando un $CFL_{max} = 0.5$.

Además, para mantener constantes las propiedades de flujo asociadas, todas las simulaciones numéricas han sido realizadas con el mismo número de Reynolds, $Re = 100$. De manera similar a las ecuaciones (40) y (41), y siguiendo trabajos anteriores [5] y [66], para pulpas modeladas con el modelo ley de potencia, el Re es definido como,

$$Re = \frac{\rho l U_{mean}}{K(U_{mean}/l)^{n-1}} \quad (43)$$

Para pulpas descritas con el modelo Carreau-Yasuda, a su vez, el Re es calculado como,

$$Re = \frac{\rho l U_{mean}}{\mu_{\infty} + (\mu_0 - \mu_{\infty})(1 + (\lambda U_{mean}/l)^a)^{\frac{n-1}{a}}}. \quad (44)$$

En las ecuaciones (43) y (44), U_{mean} es el perfil de velocidad media en cualquiera de las dos configuraciones de flujo estudiadas aquí. A su vez, l es la longitud característica de cada configuración. Por ejemplo, $l = H$ en CF y $l = D$ en CT. Como visto en la Sección 4.3.3, dado que los resultados relacionados con la independencia de la malla están fuertemente influenciados por el índice de comportamiento del flujo que caracteriza a las pulpas minerales, sea del tipo ley de potencia o Carreau-Yasuda, los análisis de independencia de la malla y de paso de tiempo realizados aquí involucraron una pulpa de ley de potencia no Newtoniana pseudo plástica con $K = 0.001562 Pa \cdot s^n$ y $n = 0.15$. Los referidos parámetros del modelo de ley de potencia fueron seleccionados debido a que caracterizan pulpas minerales similares a las que serán estudiadas en las siguientes secciones [6].

En la Figura 33, los perfiles de velocidad obtenidos de los análisis de independencia de malla y de paso de tiempo realizados son mostrados. Como puede verse en esta figura, para cada configuración de flujo, tres mallas con tres diferentes grados de refinamiento, M1, M2 y M3 fueron evaluadas. Obsérvese que cada perfil de velocidad obtenido aquí es comparado con soluciones analíticas disponibles en [5]. De lo mostrado en la Figura 33, resulta evidente que las diferencias entre los perfiles de velocidad analítica y numérica disminuyen con el aumento en el refinamiento de la malla. De hecho, estas diferencias son cuantificadas con el error cuadrático medio normalizado por U_{mean} (NRMSE). Dado que el NRMSE más alto es de alrededor del 3% para la malla más gruesa empleada aquí (M1 para CT), la precisión de la herramienta computacional basada en FEM paralela es relativamente buena. En estos análisis de independencia de malla, las simulaciones numéricas con NRMSE inferior al 0.5% son consideradas suficientemente precisas. Además, dado que exige los menores recursos computacionales, la malla más gruesa posible debe ser tomada en consideración para realizar las simulaciones numéricas. Por lo tanto, M2 es elegida como la malla computacional para ambas configuraciones de flujo. Nótese que, debido a que estas evaluaciones son realizadas considerando un CFL_{max} constante, cada una de las mallas M2 empleadas incluye su propio paso de tiempo.

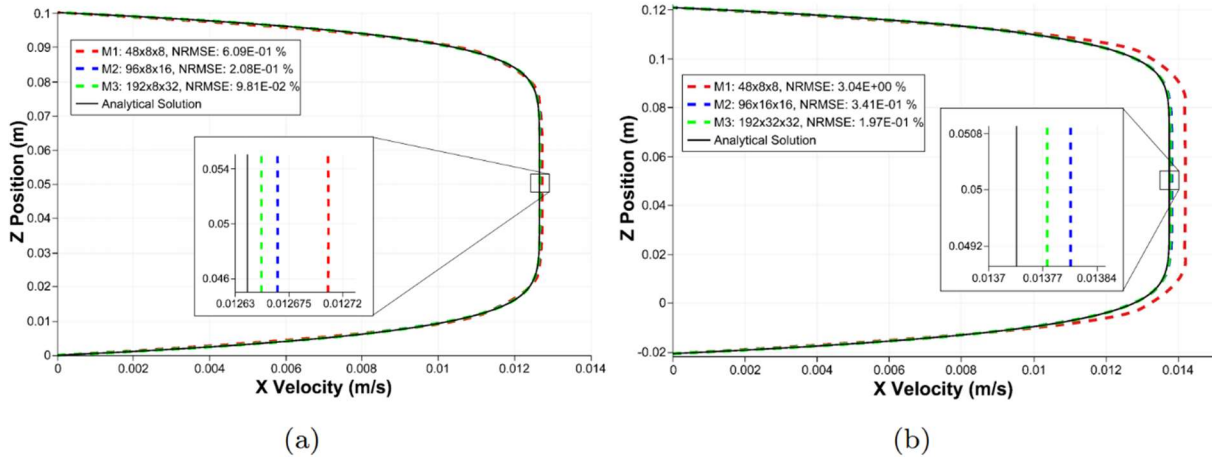


Figura 33. Perfiles de velocidad en la línea central a lo largo del eje z en comparación con sus correspondientes soluciones analíticas. (a) CF y (b) CT.

4.5.4. Propiedades reológicas de las pulpas minerales

Dado que la caracterización reológica de pulpas minerales está fuera del alcance de este trabajo, las propiedades reológicas de las pulpas minerales reales estudiadas aquí han sido obtenidas de la literatura. En consecuencia, pulpas minerales de cobre creadas artificialmente en laboratorio utilizando mineral de cabeza de calcopirita son estudiadas primero [8]. Dicho mineral de cabeza fue obtenido de una empresa minera peruana dedicada a la producción de concentrado de cobre. Más específicamente, cuatro pulpas minerales con diferentes concentraciones en peso de sólidos (50, 60, 66 y 70 %) son consideradas y modeladas reológicamente utilizando el modelo de Carreau-Yasuda (CY). Los coeficientes de material asociados, derivados de los datos experimentales discutidos en [8], son resumidos en la Tabla 5. Además, aquí también, una muestra de pulpa mineral de cobre recolectada de una planta de concentración en operación comercial en Australia es analizada [7]. A partir de este segundo trabajo [7], tres pulpas minerales con diferentes concentraciones en peso de sólidos (30, 50 y 65%), y caracterizadas reológicamente utilizando el modelo de ley de potencia (PL), son consideradas. Los coeficientes materiales del modelo de ley de potencia derivados de los experimentos reológicos descritos en [7] son resumidos en la Tabla 6. Las distribuciones del tamaño de partícula que caracterizan las pulpas minerales obtenidas de [7] y [8] son mostradas en la Figura 34. Además, los resultados de las pruebas reológicas de las pulpas minerales descritos en [7] y [8] son también presentados en la Figura 35.

Tabla 5. Coeficientes materiales del modelo Carreau-Yasuda según [8].

Parámetro	50%	60%	66%	70%
μ_0	0.0038	0.025	0.105	0.4
μ_∞	0.0015	0.0045	0.0105	0.045
λ	0.2	0.2	0.3	0.3
n	0.45	0.35	0.32	0.32
a	2	2	2	2

Tabla 6. Coeficientes materiales del modelo de ley de potencia según [7].

Parámetro	30%	50%	65%
K	1.49	6.22	10.87
n	0.132	0.142	0.244

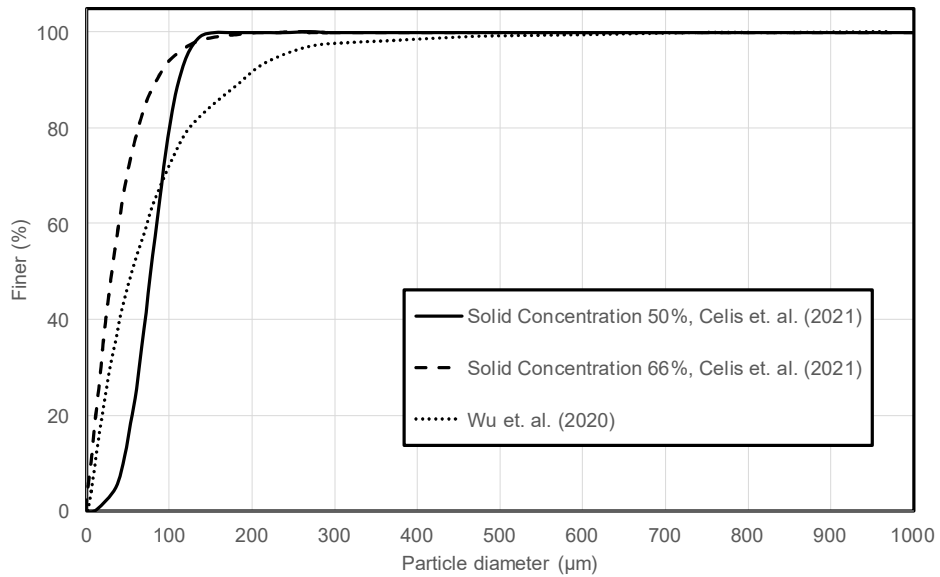


Figura 34. Distribución de tamaño de partícula (PSD) caracterizando las pulpas minerales discutidas en [7] y [8].

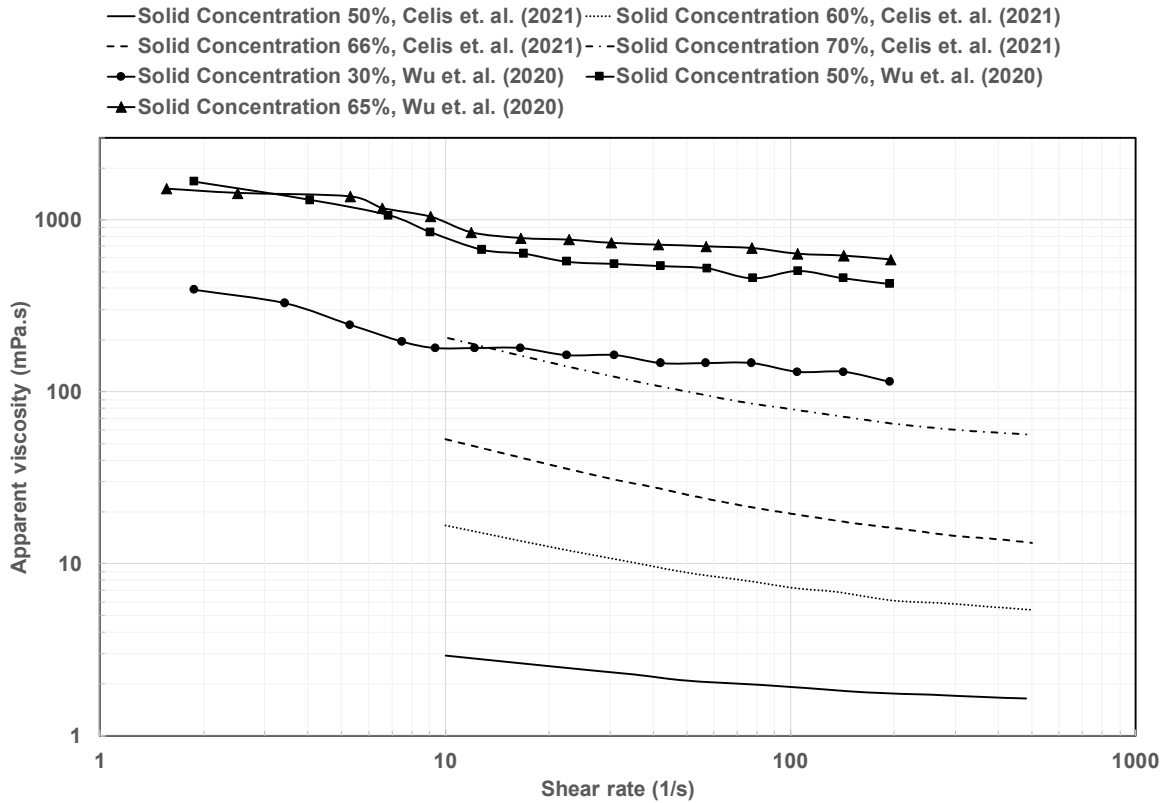


Figura 35. Resultados de viscosidad aparente vs tasa de deformación obtenidos de las pruebas reológicas de las pulpas minerales discutidas en [7] y [8].

Como ejemplo de situaciones de ingeniería en las que la herramienta computacional basada en FEM puede ser aplicada, resultados de simulaciones numéricas involucrando las pulpas minerales reales consideradas aquí, en configuraciones de flujo de CF y CT, son discutidos en las siguientes secciones. En particular, resultados cualitativos y cuantitativos son obtenidos y asociados con aspectos prácticos de diseño de sistemas de transporte de pulpas minerales. De acuerdo con las ecuaciones (43) y (44), todas las simulaciones numéricas son realizadas a $Re = 100$. Las condiciones de contorno en cada configuración de flujo son las mostradas en la Tabla 4. La velocidad en el lado IZQUIERDO del dominio es considerada como siendo un perfil de velocidad constante U_{mean} , que corresponde al mencionado número de Reynolds. Además, en todas las simulaciones numéricas, el CFL_{max} es mantenido constante e igual a 0.5. Considerando los valores de los índices de comportamiento de flujo (n) indicados en la Tabla 5 y Tabla 6, y siguiendo los resultados obtenidos en la Sección 4.5.3, todas las simulaciones numéricas descritas en esta sección han sido realizadas utilizando las mallas computacionales M2.

4.5.5. Resultados cualitativos

Los campos de velocidad que caracterizan las configuraciones de flujo de CF y CT, obtenidos utilizando las cuatro (4) pulpas minerales CY (concentraciones en peso de sólidos de 50, 60, 66 y 70 %) estudiadas aquí, son mostrados en la Figura 36. Como es observado en esta figura, los perfiles de velocidad obtenidas en ambas configuraciones resaltan la influencia de los parámetros del modelo CY sobre los campos de velocidades asociados. Dado que los contornos de la velocidad y μ_0 varían en algunos órdenes de magnitud entre pulpas minerales con diferentes concentraciones de sólidos, la magnitud de la velocidad, tanto en CF como en CT, parece estar dominada por μ_0 . Además, en los gráficos de la Figura 36, el crecimiento de la capa límite a lo largo del eje x en ambas configuraciones de flujo también es mostrado. Es importante considerar que, incluso en flujos laminares, no es una tarea fácil determinar una solución exacta para el crecimiento de la capa límite de este fluido viscoso pseudo plástico, es decir, la pulpa mineral [20]. Por lo tanto, los resultados relacionados con los campos de velocidad mostrados en la Figura 36 resaltan la utilidad de la herramienta computacional paralela basada en FEM que aquí es analizada.

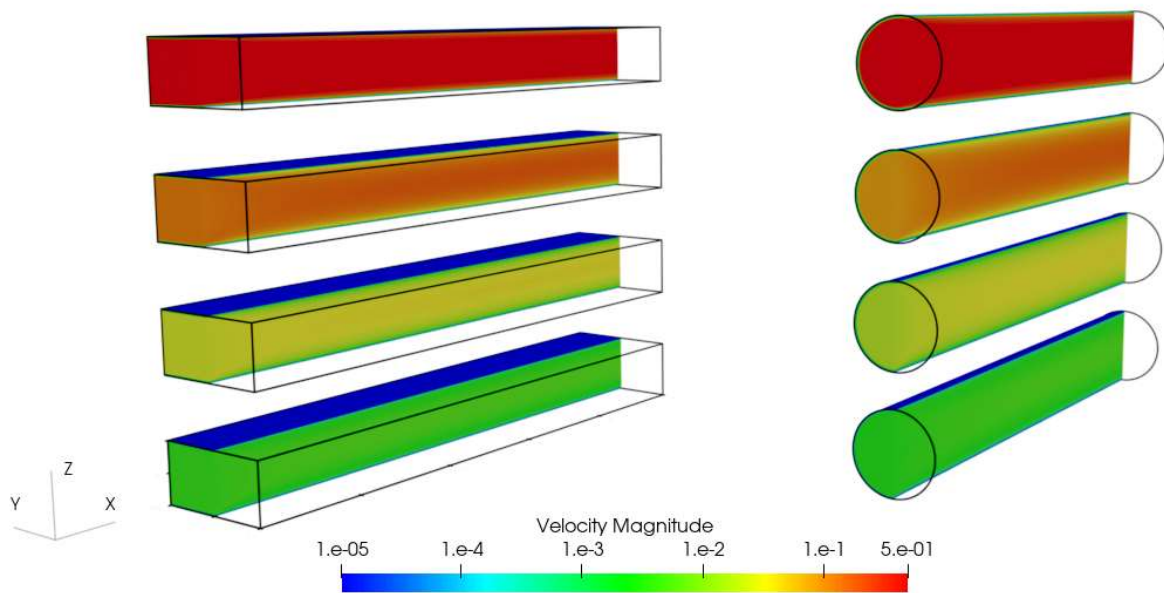


Figura 36. Campos de velocidad que caracterizan las configuraciones de flujo de CF (izquierda) y CT (derecha) obtenidos con las 4 pulpas minerales CY estudiadas. De abajo hacia arriba, concentraciones en peso de sólido en peso de 50, 60, 66 y 70 %.

4.5.6. Perfiles de velocidad de flujo y viscosidad aparente

Los perfiles normalizados de velocidad de las pulpas minerales CY y PL consideradas en este trabajo, a lo largo de la línea central paralela al eje z , son mostrados en la Figura 37. Todos los perfiles de velocidad son normalizados aquí por U_{mean} . Para resaltar las diferencias con otros perfiles no Newtonianos, los perfiles normalizados de velocidad Newtonianos también son incluidos en la Figura 37. En consecuencia, de la Figura 37 (a) y (c), para pulpas minerales CY, las discrepancias entre los perfiles de velocidad no Newtonianos y el Newtoniano aumentan con la concentración de sólidos de las pulpas minerales. Este comportamiento físico es esperado porque las propiedades reológicas de la mayoría de las pulpas minerales presentan desviaciones mayores del comportamiento Newtoniano a medida que aumenta su concentración de sólidos [6].

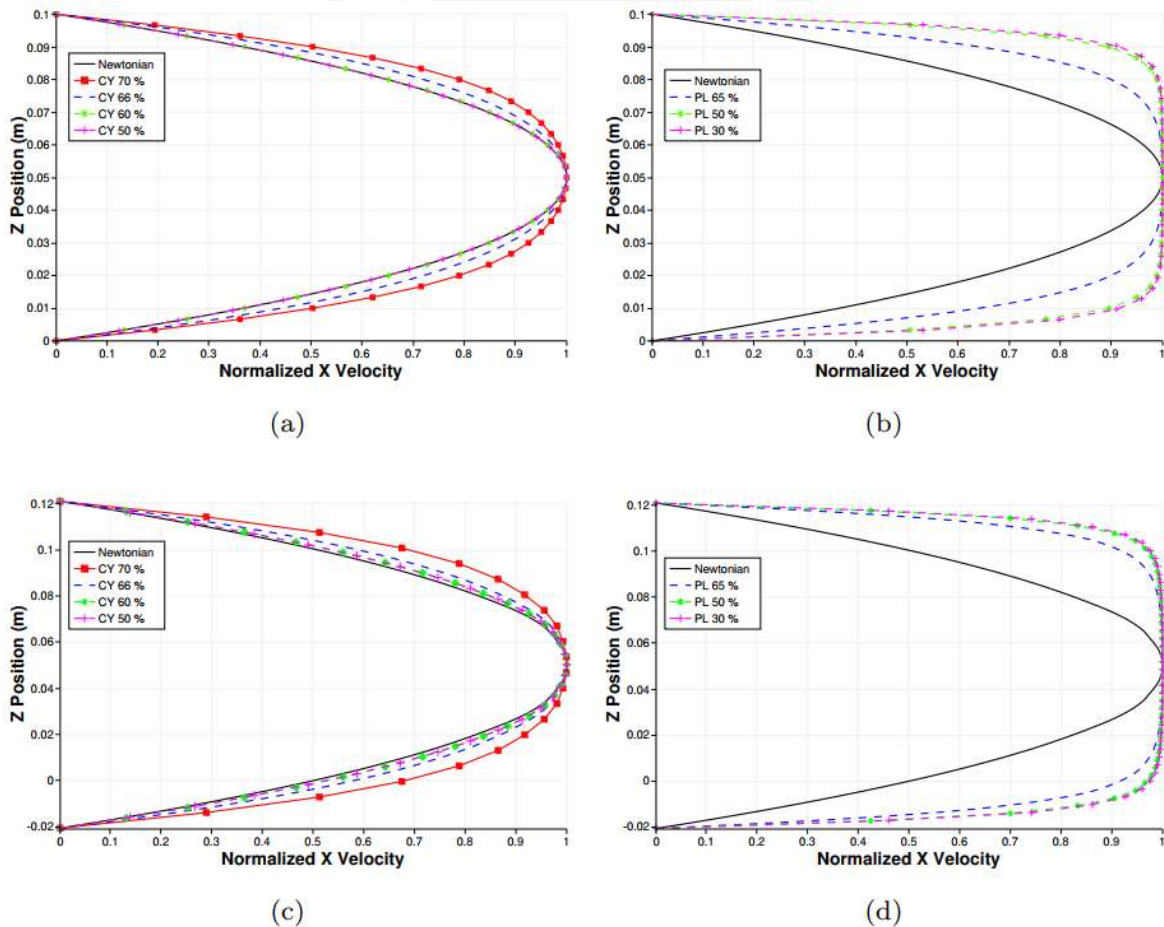


Figura 37. Perfiles de velocidad normalizados a lo largo de la línea central paralela al eje Z . (a) CF y (c) CT con pulpas minerales Carreau-Yasuda. (b) CF y (d) CT con pulpas minerales de ley de potencia.

En la Figura 37 (b) y (d), a su vez, discrepancias significativas entre los perfiles de velocidad Newtonianos y no Newtonianos son también observadas. Sin embargo, en estas pulpas minerales PL, las referidas discrepancias no parecen estar directamente relacionadas con su concentración de sólidos. De hecho, para estas pulpas de PL particulares, las mayores discrepancias son obtenidas para la concentración de sólidos del 30 %. Algunas posibles razones de este comportamiento de flujo inesperado son indicadas a continuación. Una primera explicación puede provenir de los índices de comportamiento de flujo n que caracterizan las pulpas minerales PL estudiadas aquí. Es bien sabido que cuanto más n se desvía de 1, mayor es el grado de comportamiento no Newtoniano del flujo [26]. De la Tabla 6, el valor de n más cercano a 1 corresponde a la pulpa mineral con una concentración de 65 % de sólidos ($n = 0.244$), y el valor de n más lejano es para la pulpa mineral con concentración de 30% de sólidos ($n = 0.132$). Por lo tanto, cuando la pulpa mineral PL con concentración de sólidos de 30% es simulada numéricamente, mayores discrepancias con el caso Newtoniano son esperadas. Otra posible razón para el comportamiento de flujo inesperado en el caso de las pulpas minerales PL puede estar asociada con los problemas del modelo reológico de ley de potencia al predecir la viscosidad dinámica aparente de fluidos no Newtonianos. Aunque las pulpas minerales reales estudiadas aquí pueden exhibir una región de "ley de potencia" en un rango dado de tasas de deformación, el modelo puede comportarse de manera poco realista a tasas de deformación relativamente altas o bajas [6], como fue visto en la Sección 4.2.

Buscando complementar el entendimiento de los resultados mostrados en la Figura 37, los perfiles de viscosidad aparente normalizados, que caracterizan las pulpas minerales CY y PL analizadas en este trabajo, son mostrados en la Figura 38. Nótese que, en esta figura, los perfiles de viscosidad aparente calculados a lo largo de la línea de centro paralela al eje z han sido representados solo hasta la línea de simetría con respecto al mismo eje. Además, todos los perfiles de viscosidad aparente han sido normalizados por la viscosidad aparente a lo largo de la línea de centro paralela al eje x . Para propósitos de comparación, los perfiles de viscosidad aparente newtoniana normalizados son también incluidos en la Figura 38. Como era de esperar, para los casos Newtonianos, la viscosidad aparente normalizada es constante e igual a 1. Para las pulpas minerales CY, la Figura 38 (a) y (c) muestran que la diferencia entre los perfiles de viscosidad aparente no Newtonianos y el Newtoniano aumenta con la concentración de sólidos de las pulpas minerales. A su vez, en la Figura 38

(b) y (d) también son observadas desviaciones significativas entre los perfiles de viscosidad aparente no newtoniana y newtoniana. Sin embargo, siguiendo los resultados mostrados en la Figura 38, en estas pulpas minerales PL, las desviaciones referidas no parecen estar directamente relacionadas con su concentración en peso de sólidos, sino más bien con sus índices de comportamiento de flujo n . A partir de los resultados mostrados en la Figura 38, los problemas del modelo reológico de ley de potencia para predecir las viscosidades dinámicas aparentes de fluidos no Newtonianos son destacados también. Por ejemplo, las viscosidades aparentes de las pulpas minerales CY parecen ser descritas mejor que las PL, particularmente cerca de las paredes ($z = 0$ para CF y $z = -0.02$ para CT). Las viscosidades aparentes de las pulpas minerales CY cerca de la pared son de hecho diferentes de cero (iguales a μ_∞). Sin embargo, las pulpas minerales PL tienen viscosidades aparentes cercanas a cero en la pared, lo cual no es un comportamiento físico para fluidos altamente viscosos como las pulpas minerales estudiadas aquí.

4.5.7. Caída de presión y velocidad en la línea de centro

Gradientes de presión y velocidades de flujo son variables de diseño clave en sistemas de transporte de pulpas minerales [5]. Por lo tanto, en la Figura 39, las caídas de presión a lo largo del eje x y las velocidades a lo largo de la línea de centro de los flujos que caracterizan las pulpas minerales CY y PL son mostradas. Vale la pena señalar que, la caída de presión mostrada en la Figura 39 está directamente relacionada a la energía necesaria para transportar la pulpa mineral en una tubería circular horizontal [67]. De acuerdo con la Figura 39, los resultados relacionados con las pulpas minerales CY y PL son comparados para pulpas minerales con concentraciones de sólidos similares. Diferencias significativas en la caída de presión y la velocidad en la línea de centro son observadas en estas comparaciones. Este resultado parece deberse al hecho de que, para aproximadamente las mismas concentraciones en peso de sólidos en estas pulpas minerales CY y PL, μ_0 y K son varios órdenes de magnitud diferentes entre sí. Además, para cada pulpa mineral, la caída de presión y la velocidad en la línea de centro aumentan con el aumento de la concentración de sólidos. Dado que el número de Reynolds ha sido mantenido constante en todas las simulaciones numéricas, estas tendencias son esperadas porque la velocidad en la línea de centro es directamente proporcional a la viscosidad aparente de las pulpas minerales. Además, las pérdidas de presión por fricción son influenciadas por las concentraciones en peso de sólidos [6] y la magnitud de los parámetros μ_0 y K de las pulpas. Finalmente, vale la pena notar que los resultados mostrados en la Figura 39 son útiles para

resolver problemas prácticos de diseño de tubos circulares transportando pulpa mineral. Por ejemplo, para determinar tanto (i) la fuerza motriz neta requerida para mover un caudal dado de pulpa mineral, y (ii) el diámetro óptimo de la tubería a caudales y propiedades de pulpa mineral especificados [6]. Además, la herramienta computacional en discusión aquí, permite evitar la necesidad de usar expresiones empíricas poco confiables que, normalmente, son empleadas para calcular gradientes de presión en tuberías que transportan pulpas minerales con propiedades reológicas complejas [5].

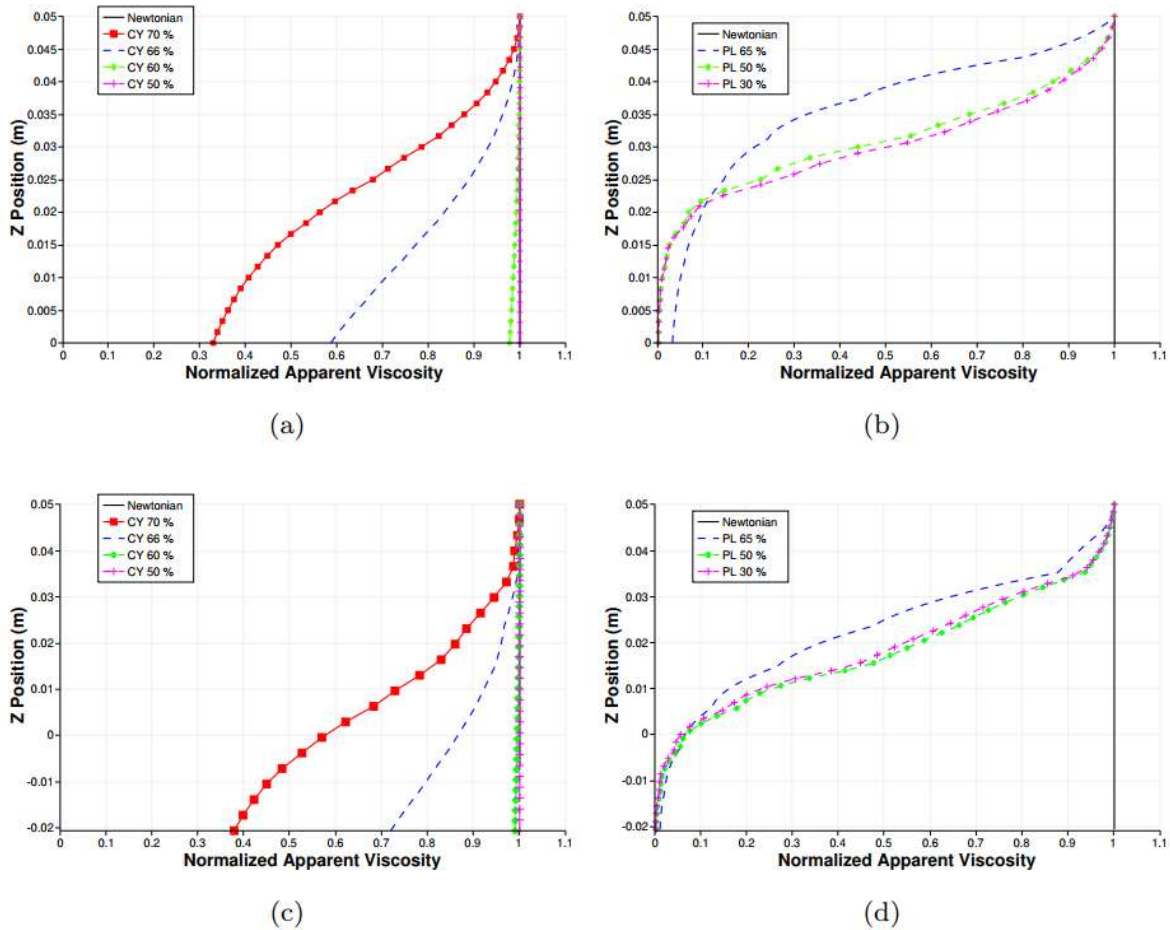


Figura 38. Perfiles de viscosidad aparente normalizados a lo largo de la línea de centro paralela al eje z . (a) CF y (c) CT con pulpas minerales Carreau-Yasuda. (b) CF y (d) CT con pulpas minerales ley de potencia.

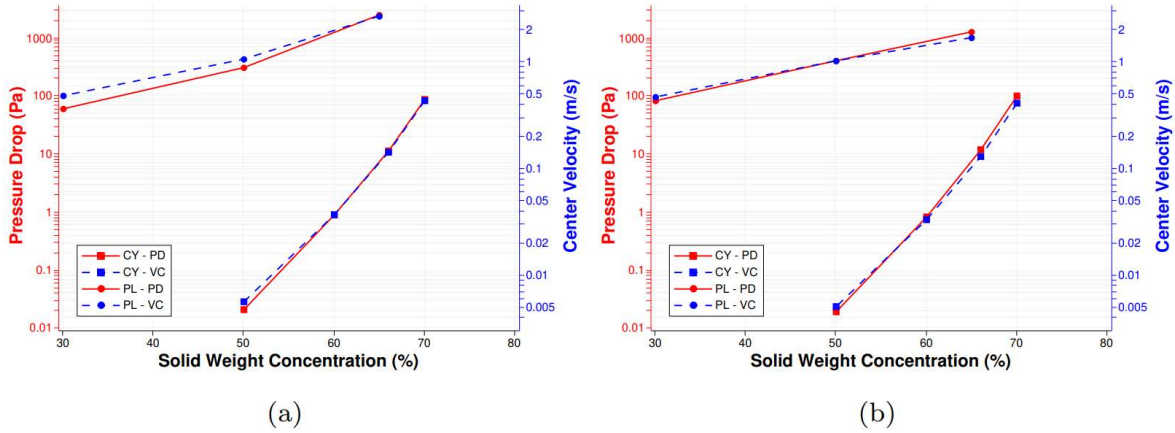


Figura 39. Caída de presión a lo largo del eje x y velocidad del flujo en el centro geométrico de (a) CF y (b) CT, cuando pulpas minerales tipo Carreau-Yasuda y ley de potencia son transportadas.

4.5.8. Desempeño en paralelo de la herramienta FEM

El desempeño en paralelo de la herramienta basada en FEM, cuya metodología ha sido discutida en este trabajo, es mostrado en la Figura 40. El desempeño en paralelo referido es evaluado aquí en términos de escalamiento (*Speedup*) y eficiencia. Más específicamente, el escalamiento en paralelo es calculado de la siguiente manera,

$$Speedup = \frac{T_p}{T_q}. \quad (45)$$

En la ecuación (45), T_p y T_q son los tiempos de ejecución con p y q procesos, respectivamente, y $p \leq q$. Además, la eficiencia en paralelo es calculada de acuerdo a,

$$\epsilon = \frac{Speedup}{Speedup_{ideal}} 100\%, \quad (46)$$

donde el escalamiento real es dividido por el ideal ($Speedup_{ideal}$), que es determinado a partir de,

$$Speedup_{ideal} = \frac{q}{p}. \quad (47)$$

Con el fin de obtener resultados de desempeño en paralelo, una pulpa mineral de CY, con un 70% de concentración en peso de sólidos, ha sido utilizada en ambas configuraciones de flujo estudiadas en este trabajo. Obsérvese en la Figura 40 que las simulaciones numéricas realizadas teniendo en cuenta estas dos configuraciones de flujo conducen a incrementos relativamente buenos de *Speedup* y eficiencias paralelas. En particular, un escalamiento superlineal es logrado por las simulaciones numéricas de CF realizadas aquí.

Para la descomposición de dominios paralelos que implican flujos incompresibles en régimen transitorio en 3D, escalamientos superlineales similares han sido anteriormente reportados en la literatura [16]. Los escalamientos referidos implican que el tiempo de cálculo es reducido a más de la mitad cuando el número de unidades de procesamiento es duplicado. Además, un escalamiento lineal o ideal caracteriza las simulaciones numéricas de CT realizadas en este trabajo (Figura 40). Por lo tanto, hasta 128 procesadores de computadora (núcleos de procesamiento), escalamientos relativamente buenos son logrados, cuando la herramienta paralela basada en FEM es usada para el modelamiento numérico de flujos similares a las pulpas minerales.

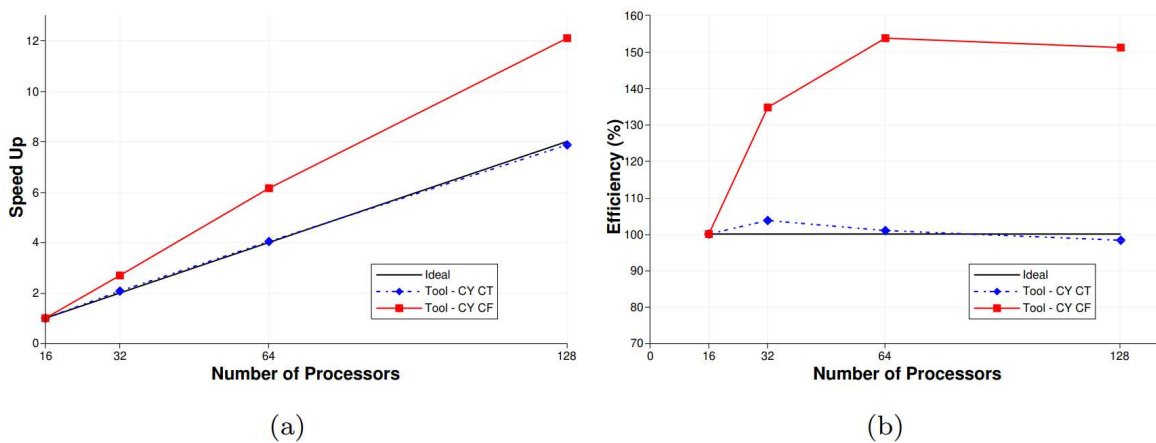


Figura 40. Desempeño en paralelo de simulaciones numéricas involucrando el transporte de pulpas minerales Carreau-Yasuda en el CF y CT con un 70% de concentración en peso de sólidos. (a) Escalamiento y (b) Eficiencia en paralelo en función del número de procesadores utilizados en las simulaciones.

Para mejorar el entendimiento sobre el origen de las diferencias de *Speedup* observadas en la Figura 40, cuando las configuraciones de flujo CF y CT son numéricamente simuladas, un análisis de desglose de costos computacionales ha sido realizado. Esto ha sido hecho considerando tres componentes clave de la implementación paralela mostrada en el Algoritmo 1: (i) construcción del sistema (BS), (ii) resolución del sistema (SS) y (iii) comunicación entre procesos (MP). Los otros pasos que aparecen en el Algoritmo 1 no han sido tomados en cuenta aquí porque sus costos computacionales asociados son, en términos relativos, significativamente menores. En consecuencia, el costo computacional promedio de los procedimientos de comunicación entre procesos (MP), como porcentaje del computacional total, es presentado en la Tabla 7, columnas 2 y 7 para CF y CT, respectivamente. Como es observado en esta tabla, aunque los costos computacionales de MP aumentan con el aumento del número de procesos, para todos los casos estudiados

aquí, son inferiores al 5% del costo total. Esto significa que el enfoque de comunicación entre procesos utilizado aquí no implica un costo computacional importante en el tiempo de ejecución general. Además, dado que todos ellos son del mismo orden de magnitud, estos costos no explican las diferencias de *Speedup* entre CF y CT observadas en la Figura 40. Los costos computacionales promedio que caracterizan los pasos BS y SS también son incluidos en la Tabla 7, columnas 3 y 4 para CF, y 8 y 9 para CT. Claramente, para todos los casos, los costos computacionales de BS son más altos que los de SS. Además, para ambas configuraciones, el *Speedup* de BS (columnas 5 y 10, Tabla 7) están cerca de la ideal. Sin embargo, *Speedup* superlineales caracterizan el paso SS, particularmente más altas para la configuración CF. Por lo tanto, los resultados de la Tabla 7 parecen sugerir que el escalamiento superlineal de la herramienta FEM puede provenir del paso SS. Considerando las configuraciones de flujo CF y CT estudiadas aquí, los factores que pueden estar influyendo en la ocurrencia o no de *Speedup* superlineales incluyen la calidad de los elementos de malla (relación de aspecto, ortogonalidad, asimetría), algoritmos internos de PETSc y capas límite formadas dentro de los dominios computacionales estudiados en este trabajo.

Tabla 7. Costos computacionales de los pasos MP, BS y SS del Algoritmo 1 como porcentajes del costo computacional total de las iteraciones de Newton-Raphson y aceleraciones para los pasos BS y SS.

Número de núcleos	CF					CT				
	Costo computacional			Speed up		Costo computacional			Speed up	
	MP	BS	SS	BS	SS	MP	BS	SS	BS	SS
16	0.69 %	70.16 %	23.78 %	1	1	0.56 %	70.66 %	12.74 %	1	1
32	0.95 %	81.04 %	16.77 %	1.941	3.178	0.94 %	74.96 %	9.2 %	1.968	2.891
64	1.39 %	82.13 %	12.53 %	4.013	8.917	2.81 %	77.79 %	7.08 %	3.970	7.869
128	4.18 %	81.76 %	6.87 %	8.032	32.424	4.57 %	84.21 %	6.22 %	8.286	20.220

Como es observado en la Figura 40 (izquierda), hasta 128 núcleos, un *Speedup* casi lineal caracteriza la herramienta FEM discutida aquí. Nótese también que, debido a limitaciones de recursos computacionales, en este trabajo no han sido realizadas simulaciones numéricas con un mayor número de procesadores.

Conclusiones

Las principales conclusiones obtenidas de este trabajo son resumidas a continuación.

En este trabajo, como parte del desarrollo de un paquete computacional más grande enfocado en la simulación de flujos complejos, una herramienta computacional basada en FEM para simular fluidos Newtonianos y no Newtonianos similares a pulpas minerales fue desarrollada. La herramienta computacional basada en FEM fue implementada siguiendo un paradigma de OOP y usando C++ como lenguaje de programación principal. Nótese que la concepción de la herramienta y su jerarquía de clases es coherente con las ecuaciones gobernantes y el modelamiento numérico FEM utilizados.

Después de una primera etapa de desarrollo, la herramienta computacional fue capaz de simular de forma precisa flujos laminares bidimensionales de fluidos Newtonianos y no Newtonianos. Configuraciones iniciales para validar el código fueron simuladas, obteniendo valores de RMSE de la orden de $4,9 \text{ E-}08$ para la configuración de flujo estudiada. Además, buena concordancia entre los resultados obtenidos con la herramienta computacional aquí discutida y otros resultados disponibles en la literatura fue encontrada.

La herramienta computacional fue luego extendida de forma que permitió simular flujos laminares tridimensionales de fluidos Newtonianos y no Newtonianos. Para validar los nuevos modelos adicionados a la herramienta basada en FEM, configuraciones de flujo involucrando cavidades accionadas por tapas fueron inicialmente utilizadas. Para fluidos Newtonianos y no Newtonianos, buena concordancia con resultados obtenidos de la literatura fue lograda con la herramienta computacional basada en FEM aquí en cuestión. Además, la herramienta computacional fue también validada con soluciones analíticas en configuraciones de flujo tipo canal y ducto circular. En las referidas configuraciones, el valor máximo de NRMSE encontrado fue de 3% para flujos de fluidos no Newtonianos.

Finalmente, con el objetivo de reducir el tiempo computacional de las simulaciones numéricas de pulpas minerales, la herramienta computacional fue mejorada a través de la inclusión de algoritmos computacionales de paralelización. Todos los detalles de la implementación de la partición del dominio, el algoritmo de comunicación entre procesos y las condiciones de transmisión entre subdominios fueron discutidos. El escalamiento en paralelo logrado con la referida implementación fue comprobado vía simulaciones numéricas de una pulpa mineral real en dos configuraciones de flujo, flujo en canal y ducto circular. En particular, un escalamiento ideal o lineal fue encontrado, lo que implica que el

tiempo de cálculo es reducido a la mitad cuando el número de núcleos de procesamiento es duplicado.

Es importante notar que, buscando cuantificar el consumo de energía asociado, la herramienta computacional desarrollada fue utilizada para simular procesos de transporte de pulpas minerales reales en canales y tuberías circulares horizontales. En primer lugar, campos de velocidad para pulpas minerales descrita con el modelo reológico CY fueron determinados. Las distribuciones de velocidades obtenidas resaltan la influencia del parámetro μ_0 del modelo CY y las concentraciones de sólidos sobre los campos de velocidades asociados al transporte de pulpas minerales. De acuerdo con los perfiles normalizados de velocidad, la influencia de la concentración en peso de sólidos, para las pulpas minerales CY, y el índice de comportamiento, para las pulpas minerales PL, fueron encontrados como los parámetros más influyentes en las discrepancias entre los perfiles de velocidad Newtonianos y no Newtonianos. Finalmente, según los resultados de gradiente de presión y velocidad en la línea de centro de las configuraciones de flujo estudiadas, para las pulpas minerales CY y PL, con concentraciones de sólidos similares, diferencias significativas en la caída de presión y velocidad del flujo son observadas. Además, para cada pulpa mineral, la caída de presión y la velocidad en la línea de centro aumentan con el aumento de la concentración de sólidos. Ambos resultados parecen estar influenciados principalmente por los parámetros de K y μ_0 asociados a sus correspondientes modelos reológicos. Nótese que, la mencionada caída de presión está directamente relacionada a la energía necesaria para transportar la pulpa mineral en una tubería circular horizontal. Los resultados obtenidos en este trabajo son útiles para resolver problemas prácticos de diseño de tuberías de pulpa mineral como (i) el cálculo de la fuerza motriz neta requerida para mover un caudal dado de pulpa mineral, y (ii) la determinación del diámetro óptimo de la tubería a caudales y propiedades de pulpa mineral especificados.

Referencias Bibliográficas

- [1] Gálvez, J., Montero, J., Ducassi, L. (2021). Anuario Minero 2020, Ministerio de Energía y Minas. Lima-Perú: Dirección de Producción Minera.
- [2] Wu, J., Graham, L., Wang, S., & Parthasarathy, R. (2010). Energy efficient slurry holding and transport. *Minerals Engineering*, 23(9), 705-712.
- [3] Fuerstenau, M. C., & Han, K. N. (Eds.). (2003). *Principles of mineral processing*. SME.
- [4] Abulnaga, B. E. (2002). *Materials Science for Slurry Systems*. Slurry Handbook.
- [5] Chhabra, R. P., & Richardson, J. F. (2011). *Non-Newtonian flow and applied rheology: engineering applications*. Butterworth-Heinemann.
- [6] Michaelides, E., Crowe, C. T., & Schwarzkopf, J. D. (Eds.). (2016). *Multiphase flow handbook*. CRC Press.
- [7] Wu, D., Chen, W., Glowinski, D., & Wheeler, C. (2020). Modelling mineral slurries using coupled discrete element method and smoothed particle hydrodynamics. *Powder Technology*, 364, 553-561.
- [8] 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*.
- [9] Lee, V. C.-C. , Law, M. C. , & Wee, S. K. . (2015). Theory to practice on finite element method and computational.
- [10] R. Tan, L. Liang, C. Xing, X. Zhou and W. Wang, "CFD Numerical Simulation and Analysis of the Exhaust Gas Flow Pattern," 2012 International Conference on Computer Science and Electronics Engineering, Hangzhou, 2012, pp. 104-107.

- [11] Chen, Xin & Zhou, Jian & Chen, Qiusong & Shi, Xiuzhi & Gou, Yonggang. (2017). CFD Simulation of Pipeline Transport Properties of Mine Tailings Three-Phase Foam Slurry Backfill. *Minerals*, 7, 149. 10.3390/min7080149.
- [12] Xu, G., Luxbacher, K., Ragab, S., Xu, J. & Ding, X.. (2016). Computational fluid dynamics applied to mining engineering: a review. *International Journal of Mining, Reclamation and Environment*, 31, 251-275.
- [13] Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson education.
- [14] Reddy, J. N., & Gartling, D. K. (2010). *The finite element method in heat transfer and fluid dynamics*. CRC press.
- [15] Bittencourt, M. L. (2000). *Using C++ templates to implement finite element classes*. Engineering Computations.
- [16] Chen, R., Wu, Y., Yan, Z., Zhao, Y., & Cai, X. C. (2014). A parallel domain decomposition method for 3D unsteady incompressible flows at high Reynolds number. *Journal of Scientific Computing*, 58(2), 275-289.
- [17] Houzeaux, G., Cajas, J. C., Discacciati, M., Eguzkitza, B., Gargallo-Peiró, A., Rivero, M., & Vázquez, M. (2017). Domain decomposition methods for domain composition purpose: Chimera, overset, gluing and sliding mesh methods. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 24(4), 1033-1070.
- [18] Tang, H. S., Haynes, R. D., & Houzeaux, G. (2021). A review of domain decomposition methods for simulation of fluid flows: Concepts, algorithms, and applications. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 28(3), 841-873.
- [19] Houzeaux, G., & Codina, R. (2001). Transmission conditions with constraints in finite element domain decomposition methods for flow problems. *Communications in Numerical methods in Engineering*, 17(3), 179-190.

- [20] Pritchard, P. J., & Mitchell, J. W. (2016). Fox and McDonald's introduction to fluid mechanics. John Wiley & Sons.
- [21] Matlab, S. (2012). Matlab. The MathWorks, Natick, MA.
- [22] Karniadakis, G., Karniadakis, G. E., & Kirby II, R. M. (2003). Parallel scientific computing in C++ and MPI: a seamless approach to parallel algorithms and their implementation (Vol. 1). Cambridge University Press.
- [23] Aris, R. (2012). Vectors, tensors and the basic equations of fluid mechanics. Courier Corporation.
- [24] 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.
- [25] Mahmood, R., Bilal, S., Khan, I., Kousar, N., Seikh, A. H., & Sherif, E. S. M. (2019). A comprehensive finite element examination of Carreau Yasuda fluid model in a lid driven cavity and channel with obstacle by way of kinetic energy and drag and lift coefficient measurements. *Journal of Materials Research and Technology*.
- [26] 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.
- [27] Jacob, F., & Ted, B. (2007). A first course in finite elements. Wiley.
- [28] Gresho, P. M., & Sani, R. L. (1998). Incompressible flow and the finite element method. Volume 1: Advection-diffusion and isothermal laminar flow.
- [29] Chapra, S. C., Canale, R. P., Ruiz, R. S. G., Mercado, V. H. I., Díaz, E. M., & Benites, G. E. (2011). *Métodos numéricos para ingenieros* (Vol. 5). McGraw-Hill.
- [30] Saad, Y. (2003). Iterative methods for sparse linear systems. Society for Industrial and Applied Mathematics.

- [31] Saad, Y., & Schultz, M. H. (1986). GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on scientific and statistical computing*, 7(3), 856-869.
- [32] Erhel, J., Burrage, K., & Pohl, B. (1996). Restarted GMRES preconditioned by deflation. *Journal of computational and applied mathematics*, 69(2), 303-318.
- [33] Dryja, M., & Widlund, O. (1987). An additive variant of the Schwarz alternating method for the case of many subregions. Ultracomputer Research Laboratory, Univ., Courant Inst. of Mathematical Sciences, Division of Computer Science.
- [34] Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., ... & Zhang, H. (2019). PETSc users manual.
- [35] Angeles, L., & Celis, C. (2019). Assessment of neighbor particles searching methods for discrete element method (DEM) based simulations.
- [36] Maza, D., & Carvalho, M. S. (2017). Trailing edge formation during slot coating of rectangular patches. *Journal of Coatings Technology and Research*, 14(5), 1003-1013.
- [37] Matuttis, Hans-Georg, and Jian Chen. *Understanding the discrete element method: simulation of non-spherical particles for granular and multi-body systems*. John Wiley & Sons, (2014).
- [38] Violeau, D. (2012). *Fluid mechanics and the SPH method: theory and applications*. Oxford University Press.
- [39] Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A., & Zang, T. A. (2007). *Spectral methods: fundamentals in single domains*. Springer Science & Business Media.
- [40] Oñate, E., Idelsohn, S. R., Celigueta, M. A., Rossi, R., Marti, J., Carbonell, J. M., Ryzhakov, P. & Suárez, B. (2011). Advances in the particle finite element method (PFEM) for solving coupled problems in engineering. In *Particle-Based Methods* (pp. 1-49). Springer, Dordrecht.

- [41] Ahrens, J., Geveci, B., & Law, C. (2005). Paraview: An end-user tool for large data visualization. *The visualization handbook*, 717(8).
- [42] Kumar, S. (2010). Object-Oriented Finite Element Programming for Engineering Analysis in C++. *JSW*, 5(7), 689-696.
- [43] Galassi, M., Davies, J., Theiler, J., Gough, B., Jungman, G., Alken, P., ... & Ulerich, R. (2002). GNU scientific library. Network Theory Limited.
- [44] Ghia, U. K. N. G., Ghia, K. N., & Shin, C. T. (1982). High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of computational physics*, 48(3), 387-411.
- [45] Thomason, L. Libreria tinyxml2. <https://github.com/leethomason/tinyxml2>.
- [46] Hernandez-Perez, V., Abdulkadir, M., & Azzopardi, B. J. (2011). Grid generation issues in the CFD modelling of two-phase flow in a pipe. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 3(1), 13-26.
- [47] Schroeder, W. J., Avila, L. S., & Hoffman, W. (2000). Visualizing with VTK: a tutorial. *IEEE Computer graphics and applications*, 20(5), 20-27.
- [48] Raju, M. P., & Khaitan, S. (2009). Domain decomposition based high performance parallel computing. arXiv preprint arXiv:0911.0910.
- [49] Shiu, W. S., Hwang, F. N., & Cai, X. C. (2015). Parallel domain decomposition method for finite element approximation of 3D steady state non-Newtonian fluids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 78(8), 502-520.
- [50] Houzeaux, G., & Codina, R. (2003). A Chimera method based on a Dirichlet/Neumann (Robin) coupling for the Navier–Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(31-32), 3343-3377.
- [51] Japhet, C., Kern, M., & Roberts, J. E. (2017). Space–time domain decomposition for advection–diffusion problems in mixed formulations. *Mathematics and Computers in Simulation*, 137, 366-389.

- [52] Martin, V. (2009). Schwarz waveform relaxation algorithms for the linear viscous equatorial shallow water equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 31(5), 3595-3625.
- [53] Farhat, C. (1988). A simple and efficient automatic FEM domain decomposer. *Computers & Structures*, 28(5), 579-602.
- [54] Karypis, G., Schloegel, K., & Kumar, V. (2003). Parmetis. Parallel graph partitioning and sparse matrix ordering library. Version, 2.
- [55] Gropp, W., Gropp, W. D., Lusk, E., Skjellum, A., & Lusk, A. D. F. E. E. (1999). *Using MPI: portable parallel programming with the message-passing interface (Vol. 1)*. MIT press.
- [56] Karniadakis, G., Karniadakis, G. E., & Kirby II, R. M. (2003). *Parallel scientific computing in C++ and MPI: a seamless approach to parallel algorithms and their implementation (Vol. 1)*. Cambridge University Press.
- [57] Amritkar, A., Deb, S., & Tafti, D. (2014). Efficient parallel CFD-DEM simulations using OpenMP. *Journal of Computational Physics*, 256, 501-519.
- [58] Shankar, P. N., & Deshpande, M. (2000). Fluid mechanics in the driven cavity. *Annual review of fluid mechanics*, 32(1), 93-136.
- [59] Chen, Z., & Shu, C. (2020). Simplified lattice Boltzmann method for non-Newtonian power-law fluid flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 92(1), 38-54.
- [60] Ku, H. C., Hirsh, R. S., & Taylor, T. D. (1987). A pseudospectral method for solution of the three-dimensional incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 70(2), 439-462.
- [61] Ghia, U. K. N. G., Ghia, K. N., & Shin, C. T. (1982). High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of computational physics*, 48(3), 387-411.

- [62] Poole, R. J. (2012). The Deborah and Weissenberg numbers. *Rheol. Bull*, 53(2), 32-39.
- [63] Bird, R. B., Armstrong, R. C., & Hassager, O. (1987). *Dynamics of polymeric liquids*. Vol. 1: Fluid mechanics.
- [64] Adriasola, J. M., & Janssen, R. H. (2018). *Best Practices for Design of Slurry Flow Distributions*.
- [65] Ferziger, J. H., Perić, M., & Street, R. L. (2002). *Computational methods for fluid dynamics* (Vol. 3, pp. 196-200). Berlin: Springer.
- [66] 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.
- [67] Ihle, C. F., Tamburrino, A., & Montserrat, S. (2014). Computational modeling for efficient long distance ore transport using pipelines. *Minerals Engineering*, 63, 73-80.

Apéndices

Apéndice 1. Lista de publicaciones

Artículos en revistas indexadas

Peralta, S., Córdova, J., Celis, C., & Maza, D. (2021). Parallel domain decomposition of a FEM based tool for numerical modeling mineral-slurry like flows. *Journal of Scientific Computing*. (En revisión)

Publicaciones en actas de conferencias

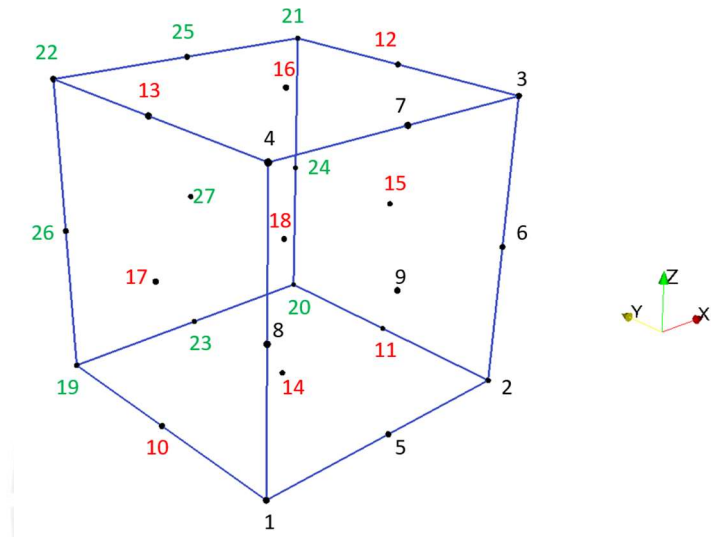
Peralta, S., Córdova, J., Celis, C., & Maza, D. (2020, November). Numerical Modelling of Mineral-Slurry Like Flows in a 3D Lid-Driven Cavity Using a Finite Element Method Based Tool. In ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition (Vol. 84584, p. V010T10A023). American Society of Mechanical Engineers.

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.

Apéndice 2. Coordenadas locales y funciones peso isoparametrizadas.

Coordenadas locales por elemento:

Sea un elemento finito tri cuadrático aleatorio:



1:(-1 ; -1 ; -1)	10:(-1 ; 0 ; -1)	19:(-1 ; 1 ; -1)
2:(1 ; -1 ; -1)	11:(1 ; 0 ; -1)	20:(1 ; 1 ; -1)
3:(1 ; -1 ; 1)	12:(1 ; 0 ; 1)	21:(1 ; 1 ; 1)
4:(-1 ; -1 ; 1)	13:(-1 ; 0 ; 1)	22:(-1 ; 1 ; 1)
5:(0 ; -1 ; -1)	14:(0 ; 0 ; -1)	23:(0 ; 1 ; -1)
6:(0 ; -1 ; -1)	15:(0 ; 0 ; -1)	24:(0 ; 1 ; -1)
7:(0 ; -1 ; 1)	16:(0 ; 0 ; 1)	25:(0 ; 1 ; 1)
8:(-1 ; -1 ; 0)	17:(-1 ; 0 ; 0)	26:(-1 ; 1 ; 0)
9:(0 ; -1 ; 0)	18:(0 ; 0 ; 0)	27:(0 ; 1 ; 0)

Funciones peso asociadas con la ecuación de conservación de cantidad de movimiento:

$$\varphi_1(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8} \xi(\xi - 1)\eta(\eta - 1)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_2(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8} \xi(\xi + 1)\eta(\eta - 1)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_3(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8} \xi(\xi + 1)\eta(\eta - 1)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_4(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8} \xi(\xi - 1)\eta(\eta - 1)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_5(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4} (1 - \xi^2)\eta(\eta - 1)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_6(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4} \xi(\xi + 1)\eta(\eta - 1)(1 - \zeta^2)$$

$$\varphi_7(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4} (1 - \xi^2)\eta(\eta - 1)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_8(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4} \xi(\xi - 1)\eta(\eta - 1)(1 - \zeta^2)$$

$$\varphi_9(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2} (1 - \xi^2)\eta(\eta - 1)(1 - \zeta^2)$$

$$\varphi_{10}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4} \xi(\xi - 1)(1 - \eta^2)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_{11}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4} \xi(\xi + 1)(1 - \eta^2)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_{12}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4} \xi(\xi + 1)(1 - \eta^2)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_{13}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4} \xi(\xi - 1)(1 - \eta^2)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_{14}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2} (1 - \xi^2)(1 - \eta^2)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_{15}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2} \xi(\xi + 1)(1 - \eta^2)(1 - \zeta^2)$$

$$\varphi_{16}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2} (1 - \xi^2)(1 - \eta^2)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_{17}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2} \xi(\xi - 1)(1 - \eta^2)(1 - \zeta^2)$$

$$\varphi_{18}(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2)(1 - \zeta^2)$$

$$\varphi_{19}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8} \xi(\xi - 1)\eta(\eta + 1)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_{20}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8} \xi(\xi + 1)\eta(\eta + 1)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_{21}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8} \xi(\xi + 1)\eta(\eta + 1)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_{22}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8} \xi(\xi - 1)\eta(\eta + 1)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_{23}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4}(1 - \xi^2)\eta(\eta + 1)\zeta(\zeta - 1)$$

$$\varphi_{24}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4}\xi(\xi + 1)\eta(\eta + 1)(1 - \zeta^2)$$

$$\varphi_{25}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4}(1 - \xi^2)\eta(\eta + 1)\zeta(\zeta + 1)$$

$$\varphi_{26}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4}\xi(\xi - 1)\eta(\eta + 1)(1 - \zeta^2)$$

$$\varphi_{27}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)\eta(\eta + 1)(1 - \zeta^2)$$

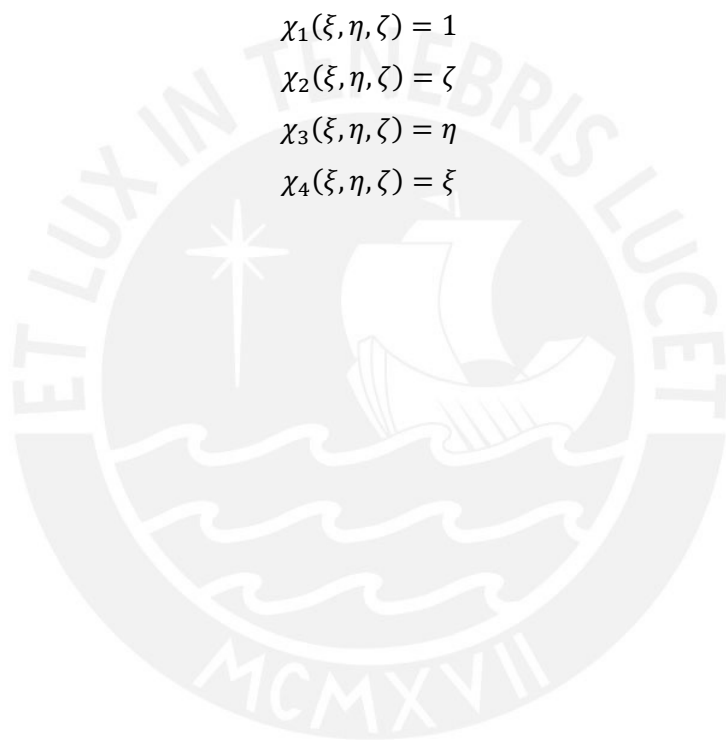
Funciones peso asociadas con la ecuación de conservación de la masa:

$$\chi_1(\xi, \eta, \zeta) = 1$$

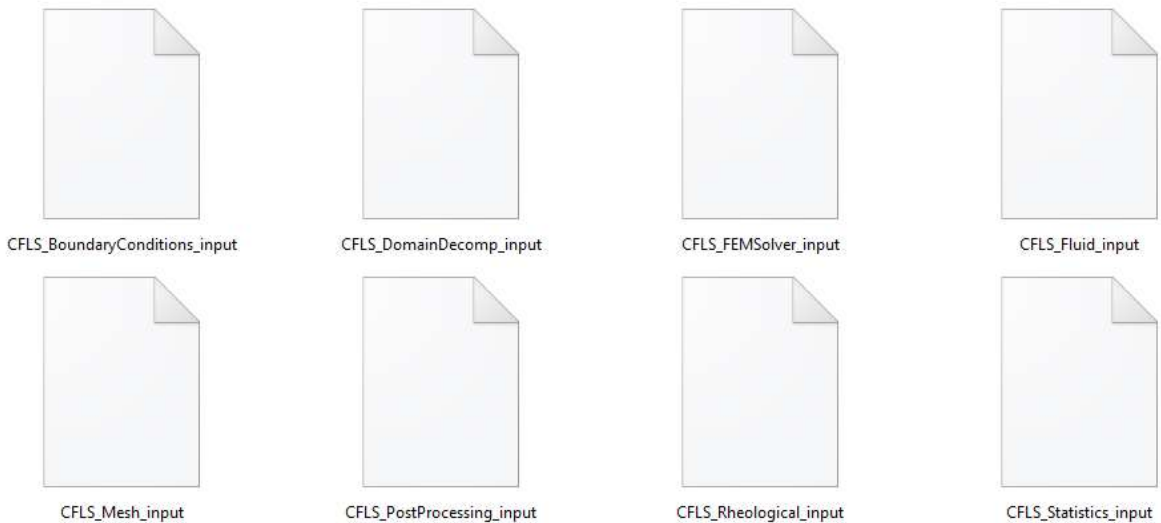
$$\chi_2(\xi, \eta, \zeta) = \zeta$$

$$\chi_3(\xi, \eta, \zeta) = \eta$$

$$\chi_4(\xi, \eta, \zeta) = \xi$$



Apéndice 3. Archivos de entrada de la herramienta computacional



Archivo de entrada de las condiciones de contorno

```
<?xml version="1.0"?>
<BoundaryConditions title="This is Boundary Conditions input">

<Boundary> <!-- Left -->
<face>3</face> <!--LEFT_FACE 3, RIGHT_FACE 1, TOP_FACE 2, BOT_FACE 0,BACK_FACE 5, FRONT_FACE 4 -->
<type>2</type> <!-- BC_NONSLIPSOLIDWALL 0,BC_FORCE 1,BC_VELOCITY 2,BC_PERIODIC_PRESSUREDROP 3,
BC_PERIODIC_NO_PRESSUREDROP 4,BC_SYNTETICVELOCITY 5,BC_SYMMETRY 6,BC_ZEROTRACTION 7,BC_VIRTUAL 8 -->
<vel_u>0.007431058</vel_u>
<vel_v>0.0</vel_v>
<vel_w>0.0</vel_w>
<P>0.13</P>
<Special_1> <!-- SPECIAL SETTING 1 -->
<val>1</val> <!-- NON_SPECIAL_SETTING: -1 , ALLOW_NORMAL_VELOCITY 2: PARA SIMETRÍA,
PERMITIR QUE EXISTA FLUJO NORMAL A LA PARED,
START_PERIODICITY 3: PARA PERIODICIDAD CON CAIDA DE PRESIÓN-->

<time>202.0</time>
</Special_1>
<Special_2> <!-- SPECIAL SETTING 2 -->
<val>-1</val> <!-- NON_SPECIAL_SETTING: -1 , WHITE_NOISE: 1 , DEACTIVATE_FLUCTUATIONS: 4 -->
<t_ini>2.5</t_ini>
<t_end>0.1</t_end>
</Special_2>
</Boundary>
```

Archivo de entrada de la descomposición de dominio FEM

```
<?xml version="1.0"?>
<DomainDecomp title="This is Domain Decomposition input">

<overlap>1</overlap> <!-- Number of elements in the overlaps. Currently, only 1 is available-->

<nx_subdomain>1</nx_subdomain> <!-- Number of subdomains assigned to x axys. Min value=1-->
<ny_subdomain>1</ny_subdomain> <!-- Number of subdomains assigned to y axys. Min value=1-->
<nz_subdomain>1</nz_subdomain> <!-- Number of subdomains assigned to z axys. Min value=1-->
<!-- Notice that always nx_subdomain*ny_subdomain*nz_subdomain=Number_of_processes-->

<SubDomain> <!-- 0 -->
<ID>0</ID> <!-- SubDomain ID, same as rank -->

<l0>0.0</l0> <!-- SubDomain initial x coordinate. Do not consider overlap -->
<lf>1.0</lf> <!-- SubDomain final x coordinate. Do not consider overlap -->
<elements_x>120</elements_x> <!-- SubDomain number of elements in x axys. Do not consider overlap -->

<w0>0.0</w0> <!-- SubDomain initial y coordinate (In 2D meshes, this is equivalent to h0)-->
<wf>0.2</wf> <!-- SubDomain final y coordinate (In 2D meshes, this is equivalent to hf)-->
<elements_y>5</elements_y> <!-- SubDomain number of elements in y axys. Do not consider overlap -->

<h0>0.0</h0> <!-- SubDomain initial z coordinate. Do not consider overlap -->
<hf>0.1</hf> <!-- SubDomain final z coordinate. Do not consider overlap -->
<elements_z>12</elements_z> <!-- SubDomain number of elements in z axys. Do not consider overlap -->
</SubDomain>

</DomainDecomp>
```

Archivo de entrada del módulo FEM

```
<?xml version="1.0"?>
<FEM_SolverSettings title="FEM Solver">
<Tolerance>0.0000001</Tolerance>
<MaxIterations>30</MaxIterations>
<UnsteadyCase>
<bool>0</bool>
<MaxTime>40.40</MaxTime>
<dt>0.07</dt>
</UnsteadyCase>
<LinearSolver>
<type>0</type> <!--
Linear Solver Available:
PETSC_SOLVER (SPARSE) 0
HYPRE_SOLVER (SPARSE) 1
KINSOL_SOLVER (DENSE) 2 -->
</LinearSolver>
<OpenResolvedField>1</OpenResolvedField> <!-- Set as 1 if you want to open a resolved velocity and pressure field from input -->
<SaveResolvedField>1</SaveResolvedField> <!-- Set as 1 if you want to save the last resolved velocity and pressure field -->

<RelaxationFactor>1.0</RelaxationFactor>

<StandardInitialization>
<bool>0</bool> <!-- Set as 1 if you want to use the Standard Initialization as a initial guess -->
<Configuration>0</Configuration><!--
Configurations available:
Channel Flow 0
Circular Tube 1-->
<Turbulent>0</Turbulent> <!-- Set as 1 if you want to initialize an turbulent flow -->
<Center_Vel>0.02</Center_Vel>
<Aprox_dP>0.01</Aprox_dP>
</StandardInitialization>

</FEM_SolverSettings>
```

Archivo de entrada del fluido

```
<?xml version="1.0"?>

<fluid name="water">
<DynamicViscosity>0.001562</DynamicViscosity>
<Density>1000.0</Density>
</fluid>
```


Archivo de entrada de la malla FEM

```
<?xml version="1.0"?>
<!-- this a simple comment -->
<MeshSettings>

<dim>3</dim>           <!-- Set dimmension of the mesh // Parameters may be 2 for 2-Dimmmensional Mesh  or 3 for
<type>FEM</type>      <!-- Set type of the mesh // Parameters may be FEM -->

<test>0</test>        <!-- If you want to test your mesh, set as 1, else 0.-->

<nelex>120</nelex>    <!-- Set the total number of elemnts in x axis -->
<neley>5</neley>      <!-- Set the total number of elemnts in y axis -->
<nelez>12</nelez>     <!-- Set the total number of elemnts in z axis -->

<Geometry>
<large>1.0</large>    <!-- Set the total large of the domain -->
<width>0.2</width>    <!-- Set the total width of the domain (In 2D meshes, this is equivalent to height) -->
<height>0.1</height>  <!-- Set the total height of the domain-->
</Geometry>

<ButterflyGrid>
<bool>0</bool>        <!-- If you want to use a ButterflyGrid, set as 1, else 0.-->
<center>              <!-- Set the number of elements of the Global Domain center-->
<neley>2</neley>
<nelez>2</nelez>      <!-- Same as neley for the moment-->
</center>
<!-- For more information about the Geometry check -->
</ButterflyGrid>
</MeshSettings>
```

Archivo de entrada del Post procesador FEM

```
<?xml version="1.0"?>
<PostProcessingSetting>
<T_print>0.0</T_print>
<dT_print>0.5</dT_print>
<Probes_bool>0</Probes_bool><!-- if you want to create probes over domain, put 1; else put 0. -->
<N_Probes>0.1</N_Probes><!-- Specify the number of probes to be taken -->
<Probe> <!-- 1 -->
<x>0.1</x>
<y>0.1</y>
<z>0.1</z>
</Probe>

<Probe>
<x>0.15</x>
<y>0.15</y>
<z>0.15</z>
</Probe>

<Probe>
<x>0.2</x>
<y>0.2</y>
<z>0.2</z>
</Probe>
</PostProcessingSetting>
```

Archivo de entrada del modelo reológico

```
<?xml version="1.0"?>
<rheomodel_bool>1</rheomodel_bool> <!-- if you want to use any rheological model, put 1; else put 0. -->

<RheologicalModel>

<type>0</type><!--
Available Rheological models:
// 0 MODEL_POWERLAW
// 1 MODEL_CARREAUYASUDA
// 2 MODEL_TPOWERLAW
-->

<mu_0>0.001562</mu_0>          <!-- Consistency index: typically equals to fluid dynamic viscosity-->
<n>0.85</n>                  <!-- flow behavior index: typically equals to fluid dynamic viscosity-->
<mu_inf>0.00345</mu_inf>     <!-- Infinite-shear-rate viscosity -->
<lambda>1.902</lambda>      <!-- Fluid relaxation time -->
<a>1.25</a>                  <!-- dimensionless parameter describing the width of the transition
                             region between the zero-shear-rate region and the power-law one -->

</RheologicalModel>

<!-- For more details see: 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
In International Conference on Computational Science (pp. 163-177). Springer, Cham.-->
```

Archivo de entrada de la toma de estadísticas

```
<?xml version="1.0"?>
<StatisticsSettings>
<T_start1>50.0</T_start1>
<T_start2>51.0</T_start2>
</StatisticsSettings>
```

