

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ACATLÁN

VISUALIZACIÓN DEL PATRÓN DE FLUJO EN REACTORES METALÚRGICOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

LICENCIADO EN MATEMÁTICAS APLICADAS Y COMPUTACIÓN

PRESENTA

JOSÉ LUIS AVENDAÑO NANDEZ

ASESOR: RAFAEL FERNÁNDEZ FLORES

MARZO DE 2009



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor. JURADO ASIGNADO:

Presidente:	Dr. Rafael Fernández Flores
Vocal:	Fis. Mat. Jorge Luis Suárez Madariaga
Secretario:	Dra. Ma. del Carmen González Videgaray
1er Suplente:	Fis. Manuel Valadez Rodríguez
2do Suplente:	Lic. Christian Carlos Delgado Elizondo

Lugares donde se realizó la tesis:

Edificio D, Facultad de Química de la UNAM; Dirección General de Servicios de Cómputo Académico de la UNAM.

ASESOR DE TESIS: Rafael Fernández Flores

FIRMA

Agradecimientos

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México, a su Facultad de Estudios Superiores Acatlán, y a su Facultad de Química por haberme brindado todo el apoyo para la realización de este trabajo.

Agradezco el apoyo económico (beca y adquisición de equipo de cómputo así como licencia de Fluent) de la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico de la UNAM a través del Proyecto IN500807 "Visualización de flujo de fluidos en procesos metalúrgicos en un ambiente de realidad virtual". Agradezco muy cordialmente al Dr. Bernardo Hernández Morales, por haberme aceptado a paticipar el este proyecto, además de sus asesorias y sus consejos.

Agradezco muy especialmente a las siguientes personas:

- Adela Jiménez Montero, por todo el apoyo que me dió a través de la elaboración de este trabajo.
- Dr. Rafael Fernández Flores, por todas sus enseñanzas, sus consejos y las asesorias impartidas a lo largo de todo el trabajo.
- M. en I. Héctor Javier Vergara Hernández, por todo su apoyo y sus enseñanzas.
- M. en I. Benjamin Beltran Frogoso, por todas sus explicaciones.

A ti Eva Nandez A ti Amelia Antonio

A ti Adela Jiménez

Índice general

1.	Ant	ecedentes	5
	1.1.	$_{\rm Q}$ Qué es CFD?	5
	1.2.	¿Cómo funcionan los códigos de CFD?	5
		1.2.1. Pre - Procesador	6
		1.2.2. Solucionador	6
		1.2.3. Post - processdor \ldots	8
	1.3.	Visualizador Amira	9
2.	\mathbf{Des}	ripción matemática del flujo de fluidos	11
	2.1.	Fluido	11
	2.2.	Viscosidad dinámica y cinemática	12
	2.3.	Densidad	14
	2.4.	Presión	14
	2.5.	Naturaleza del Flujo	15
	2.6.	Línea de corriente	16
	2.7.	.7. Ecuaciones de variación para	
		sistemas isotérmicos	16
		2.7.1. Ecuación de Continuidad	17
		2.7.2. Ecuaciones de Movimiento	18
		2.7.3. Ecuación general de transporte	21
	2.8.	Turbulencia	22
2.9. Efectos de turbulencia sobre las ecuaciones de Navier-Stoke2.10. Número de Reynolds		Efectos de turbulencia sobre las ecuaciones de Navier-Stokes \ldots .	23
		Número de Reynolds	26
	2.11	Modelo $\kappa - \varepsilon$	27
	2.12	Ecuaciones del modelo $\kappa - \varepsilon$	28
	2.13	MVF para problemas de convección - difusión	30

		2.13.1. Convección - Difusión en una dimensión		
		2.13.2. Esquema de diferenciación central		
	2.14	MVF para flujos no estacionarios		
3.	Met	letodología 3		
	3.1.	Planteamiento		
		3.1.1. Tanque de Temple		
		3.1.2. Distribuidor $\ldots \ldots 40$		
	3.2.	Mallado		
	3.3.	Solución		
4.	Res	ultados 57		
	4.1.	Datos Experimentales		
		4.1.1. Tanque de Temple		
		4.1.2. Distribuidor		
	4.2.	Visualización con Fluent		
		4.2.1. Tanque de Temple		
		4.2.2. Distribuidor		
	4.3.	Visualización con Amira		
		4.3.1. Tanque de Temple		
		4.3.2. Distribuidor		
5.	Con	clusión 67		
A.	Esti	ructura de archivo de Amira 69		
В.	Cód	igos fuentes en C 71		
	B.1.	Código fuente para el tanque de temple		
	B.2.	Distribuidor		
C.	Fun	damentos matemáticos 77		
	C.1.	Derivadas con respecto al tiempo		
		C.1.1. Derivada parcial con respecto al tiempo		
		C.1.2. Derivada total con respecto al tiempo		
		C.1.3. Derivada substancial con respecto al tiempo		
	C.2.	Operador Nabla		
	C.3.	Gradiente		

C.4. Divergencia \ldots	78
C.5. Teorema de la divergencia	78
C.6. Laplaciano	79
D. MVF para problemas de Difusión	80
D.0.1. Introducción	80
D.0.2. MVF para difusión de estado estacionario en una dimensión	
D.0.3. MVF en dos dimensiones	83
D.0.4. MVF en tres dimensiones	85
E. Precisión de una simulación de flujo	88

Índice de figuras

2.1.	Diagrama reológico [8]	13
2.2.	Comportamiento del flujo turbulento	22
2.3.	Malla en una dimensión $[1]$	31
3.1.	Corte Transversal del Modelo; las dimensiones se encuantran acotadas	
	en centímetros y los ángulos en grados $[11]$	37
3.2.	Propela [11]	38
3.3.	Delimitación de las zonas del tanque de temple $[11]$	38
3.4.	Geometría modificada de la Zona 2 del Tanque de Temple; las dimen-	
	siones se encuentran acotadas en centímetros	39
3.5.	Modelo Físico del distribuidor; las dimensiones están acotadas en centímet-	
	ros	41
3.6.	Geometría modificada del distribuidor; las dimensiones están acotadas	
	en centímetros	41
3.7.	Ventana Principal de Gambit	43
3.8.	Vista Isométrica del Tanque de Temple	45
3.9.	Vista Isométrica del Distribuidor	45
3.10.	Ventana de Inicio de Fluent	46
3.11.	Pantalla Principal de Fluent	47
3.12.	Pantalla de Fluent con malla cargada	47
3.13.	Resolvedor	48
3.14.	Modelos Turbulentos	49
3.15.	Materiales	49
3.16.	Base de Datos de Materiales	50
3.17.	Condiciones de Operación	50
3.18.	Condiciones de Frontera	51
3.19.	Entrada de Velocidad	51

3.20.	Fluido
3.21.	Inicializar Solución
3.22.	Empieza a Iterar el Método Numérico
3.23.	Residuales del tanque de temple
3.24.	Residuales del distribuidor
3.25.	Transporte de Especies
3.26.	Especies
3.27.	Fracción de la Especies
3.28.	Ventana Iterar del estado no estacionario
4.1.	Distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de
	23 s
4.2.	Distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de
	35 s
4.3.	Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 6 s $\ . \ 58$
4.4.	Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 15 s . 59
4.5.	Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 25 s . 59
4.6.	Distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de
	23 s
4.7.	Distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de
	35 s
4.8.	Colorante inyectado en el Distribuidor después de 6 seg 61
4.9.	Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 15 s . 61
4.10.	Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 25 s . 61
4.11.	Procedimiento para exportar
4.12.	Visualización errónea
4.13.	Visualización en Amira de la distribución del colorante inyectado en el
	tanque de temple después de 23 s
4.14.	Visualización en Amira del la distribución del colorante inyectado en el
	tanque de temple después de 35 s
4.15.	Distribución del colorante inyectado en el cistribuidor después de 6 s 65
4.16.	Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 15 s . 65
4.17.	Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 25 s $.~~66$
D.1.	Dominio definido en 1 dimensión

D.2.	Malla en una dimensión	. 8	31
D.3.	Malla en dos dimensión	. 8	34
D.4.	Malla en tres dimensión	. 8	36
E.1.	Malla en una dimensión	. 8	38

Introducción

En los últimos años, los avances en la tecnología de la información han facilitado la obtención de grandes cantidades de información, tanto a la gente común como a los centros de investigación; sin embargo, estos datos por sí solos no son útiles, es necesario que el usuario tenga una forma fácil y eficiente de interpretarlos y analizarlos. La visualización de los datos permite analizar de una mejor manera la información que se tenga.

El presente trabajo es un estudio del patrón de flujo en el interior de dos reactores metalúrgicos (tanque de temple y distribuidor de colada continua); se basa en la aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD por sus siglas en inglés) mediante un software comercial de CFD (en el presente trabajo se usó Fluent). Para poder estudiar el interior de los reactores fue necesario hacer uso de la Visualización Científica, utilizando también un software comercial (en el presente trabajo se usó Amira).

Hipótesis Es posible para el investigador comprender mejor el comportamiento de un fluido en un reactor visualizando los resultados de cálculos realizados mediante el uso de programas de Mecánica de Fluidos Computacional (CFD).

Objetivo del trabajo Visualizar el patrón de flujo de un fluido en el interior de un reactor, a partir de cálculos realizados mediante el uso de programas de CFD.

Capítulo 1

Antecedentes

1.1. ; Qué es CFD?

CFD o *Computational Fluid Dynamics* es el análisis de sistemas que involucran el flujo de fluidos y fenómenos asociados, por medio de la simulación del campo de velocidades (y cantidades asociadas) basada en cómputo. Es una técnica muy potente aplicable a muchas áreas industriales y no industriales. Algunas aplicaciones son:

- Aerodinámica de aviones y vehículos.
- Hidrodinámica de barcos.
- Ingeniería de procesos químicos: mezcla y separación de polímeros.
- Ingeniería ambiental: distribución de contaminantes.
- Hidrología y oceanografía: flujo de ríos, océanos, etc.
- Meteorología: predicción del clima.
- Ingeniería de procesos metalúrgicos

1.2. ¿Cómo funcionan los códigos de CFD?

Los códigos de CFD son construidos con algoritmos numéricos que permiten resolver problemas para los cuáles no existe una solución análitica. Con el fin de facilitar el acceso a su poder de solución todos los paquetes de CFD incluyen interfaces de usuario para introducir los parámetros del problema. Todos los códigos contiene 3 elementos principales: (i) un Pre - procesador, (ii) un Resolvedor y (iii) un Post - procesador.

1.2.1. Pre - Procesador

Consiste en la entrada de un problema de flujo a un programa de CFD por medio de una interface amigable y la transformación subsecuente de esta entrada a una forma manejable por el código para usar el resolvedor. Las actividades de usuario en el pre procesamiento involucran:

- Definición de la geometría de la region de interes: el dominio computacional.
- Generación de la malla.
- Selección del fenómeno físico o químico que se quiere modelar.
- Definición de las propiedades del fluido.
- Especificación de las condiciones de fronteras apropiadas.

La solución a un problema de flujo se define en los nodos dentro de cada celda. La precisión de una solución de CFD está gobernada por el número de celdas en la malla. En general, cuanto mayor sea el número de celdas mejor será la precisión en la malla. Tanto la exactitud de una solución y su costo en términos del hardware de computadora necesario y el cálculo del tiempo dependen de la finura de la malla.

1.2.2. Solucionador

Existen distintas técnicas numéricas de solución: Diferencias finitas, Elemento finito, Método espectral, entre otras. El objetivo del resolvedor es implementar estos algoritmos junto con otros de solución de ecuaciones algebraicas simultáneas para obtener una solución numérica de manera eficiente. Los métodos numéricos forman la base del rendimiento del resolvedor, que siguen estos pasos:

- Discretización de las ecuaciones gobernantes por sustitución de las aproximaciones dentro de las ecuaciones que gobiernan el flujo y manipulaciones matemáticas.
- Aproximación de la variación del campo desconocido por medio de funciones simples.
- Solución de las ecuaciones algebraicas resultantes.

La diferencia entre las técnicas están asociadas con el camino en que se aproximan las variables y con el proceso de discretización.

Método de Diferencias Finitas. Describe el campo desconocido ϕ del problema de flujo por medio de puntos de prueba en los nodos de una malla. Se trunca la expansión de la serie de Taylor (a primer orden) para generar las aproximaciones de las diferencias finitas de las derivadas de ϕ en términos de los puntos de prueba en cada punto de la malla y sus vecinos inmediatos. Las derivadas que aparecen en las ecuaciones gobernantes se sustituirán por diferencias finitas dando una ecuación algebráica para los valores de ϕ en cada punto de la malla. Smith [20] da un amplia reseña de todos los aspectos sobre este método.

Método del Elemento Finito. Este método usa funciones suaves a trozos (lineal o de orden superior) válida en los elementos que describen las variaciones locales del flujo ϕ de las variables desconocidas. Si las funciones a trozos aproximadas se sutituyen dentro de la ecuación que gobierna el flujo, estas producirán errores, que serán llamados residuales. El siguiente paso es minimizar los residuales multiplicandolos por un conjunto de funciones ponderadas e integrandolos. Como resultado se obtiene un conjunto de ecuaciones algebráicas para los coeficientes desconocidos de las funciones aproximadas. Un trabajo completo de este método se puede ver en [18] y [19].

Métodos Espectrales. Este método se aproxima a las variables desconocidas por medio de la serie de Fourier truncandola o por polinomios de Chebyshev. Se remplazan las variables desconocidas en la ecuación gobernante por las series truncadas. La limitación que conduce a las ecuaciones algebráicas para los coeficientes de la serie de Fourier o Chebychev están proporcionados por residuos ponderados de manera similar que el método del elemento finito o haciendo coincidir a la función aproximada con la solución exacta en un número de puntos en la malla. Para mayor información especializada de este método véase [21]

Método de Volumen Finito (MVF). Fue desarrollado originalmente como una formulación especial del método de diferencias finitas. Los problemas analizados en el presente trabajo se resolvieron con este método. Existen algunos códigos de CFD comerciales para este método, tales como: PHOENICS, FLUENT, FLOW3D y STAR - CD. El algoritmo numérico consiste en lo siguiente:

- Integración formal de las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos sobre todos los volumenes de control del dominio de solución.
- Discretización implica la sustitución de una variedad de aproximaciones del tipo

de diferencias finitas por los términos en la ecuación integrada que representa el proceso de flujo como convección, difusión y fuentes. Esto convierte a la ecuación integral en un sistema de ecuaciones algebraicas.

- Solución de las ecuaciones algebraicas por un método iterativo.

El primer paso, la integración del volumen de control, distingue al MVF de todas las otras técnicas de CFD. Los resultados expresan la conservación de las propiedades relevantes para cada pedazo finito de la celda. Esta relación entre el algoritmo numérico y la forma física del principio de conservación es uno de los atractivos del MVF. La conservación de una variable de flujo general ϕ , por ejemplo una componente de velocidad, dentro de un volumen de control finito puede ser expresada como un balance entre los varios procesos que tienden a incrementarla o decrementarla.

Los códigos de CFD contienen técnicas de discretización adecuadas para el tratamiento de los prinicpales fenómenos de transporte, convección (transporte debido al flujo de fluido) y difusión (transporte debido a variaciones de ϕ de punto a punto) además de los términos fuentes (asociados con la creación o destrucción de ϕ) y la rapidez de cambio con respecto al tiempo.

1.2.3. Post - procesador

Al igual que en el pre-procesamiento una enorme cantidad de trabajo se ha desarrollado recientemente en el campo de post-procesamiento. En esta fase se han desarrolado paquetes gráficos que sirven para visualizar los resultados. Estos incluyen:

- Muestra de malla y dominio geométrico.
- Gráfica de Vectores.
- Gráficas de lineas de contorno.
- Gráficas de superficies en 2D y 3D.
- Vistas de manipulación (Traslación, rotación, escalamiento, etc.)
- Salidas con colores.

Más recientemente también se pueden incluir animaciones para mostrar resultados dinámicos. Además de producir gráficos, también es posible exportar los valores alfanúmericos encontrados por el resolvedor para que sean manipulados por códigos externos. En el presente trabajo se hace la exportación de la solución proporcionada por el resolvedor (en este caso se resolvieron los problemas con el código comercial Fluent) y se procesan en un código externo (para la visualización externa se utilizó el código comercial Amira).

1.3. Visualizador Amira

El propósito de la visualización es ayudar a analizar, comprender y comunicar la información que viene contenida en datos. A lo largo de los años un enorme número de formatos de gráficos por computadora e imágenes han sido desarrollados, por lo que es importante mencionar que no existe ningún único paquete o herramienta que se use para visualizar, y pueda hacer todo lo que se requiera. Amira utiliza el análisis Orientado a Objetos con el propósito de entender las actividades que la investigación realiza y obtener el mayor conocimiento posible con el propósito que vaya acumulado.

Es por eso que es importante contar con programas de visualización que sean flexibles y puedan ser compatibles con otras aplicaciones y se puedan adaptar al constante cambio que tienen. Estos programas deben ser capaces de proveer métodos que acepten una gran variedad de tipos de datos. Muchas de la técnicas de visualización y sus procesos utilizan varios pasos en forma simultánea por lo que la automatización de la conservación y lectura transparente de datos es más que deseable.

El programa de visualización Amira cumple con creces lo que anteriormente se ha señalado. Es una caja de herramientas que utiliza el exitoso concepto de módulos como lo han hecho AVS, Khoros, IRIS Explorer e IBM Data Explores¹. Cada uno de estos módulos o paquetes están en el modelo de flujo de la información programando por medio de una interface visual. El usuario construye una guía o red que define el flujo de los datos y los procesos que se harán en cada paso hasta el producto final, por lo que se tiene un área en donde se desplegaran todos los módulos. La ejecución de estos módulos es ímplicita y se lleva a cabo cuando recibe datos que provienen del flujo de datos incluidos, esto permite que sé re-ejecuten cada vez que algún parámetro o dato es modificado en cualquier sección de la red, hay que aclarar que esto sucede para aquellas secciones que estén supeditadas a donde se realizó la alteración ya que no se re-ejecuten

¹Estos programas son visualizadores al igual que Amira, para mayor información sobre ellos, véase [26]

toda la red.

Existen muchas ventajas para usar estos sistemas, principalmente por su forma de utilizar los objetos de forma visual y así crear aplicaciones.

Amira no está basado en el modelo de programación de flujo de datos. Es orientado a objetos. Las conexiones entre los módulos de Amira representan las dependencias entre los objetos que contienen los datos y sus métodos.

Los módulos de Amira por lo general son de más alto nivel que en otros sistemas. Los módulos más conocidos se pueden utilizar con una gran variedad de tipos de datos de manera automática.

Amira es un visualizador, en el cual se puede crear fácilmente una visualización de datos volumétricos usando la técnica llamada **Direct Volume Rendering** (representación volumétrica directa) Esta técnica es utilizada para visualizar datos 3D de forma completa sin el uso de segmentación y tiene la ventaja de que toma en cuenta la información de los datos en su totalidad, y de esta manera logra una representación 3D muy completa.

Capítulo 2

Descripción matemática del flujo de fluidos

2.1. Fluido

Un fluido es una sustancia que se deforma continuamente cuando se somete a un esfuerzo cortante, sin importar cuán pequeño sea este esfuerzo. Una fuerza cortante es el componente de fuerza tangente a una superficie, y esta fuerza dividida por el área de la superficie es el esfuerzo cortante promedio sobre el área.

Considere una sustancia entre dos placas paralelas separadas una distancia pequeña siendo ellas lo suficientemente grandes para que las condiciones en las orillas se puedan despreciar. La placa inferior es fija y se aplica una fuerza F a la placa superior, ejerciéndose entonces un esfuerzo cortante F/A sobre cualquier sustancia entre las placas. A es el área de la placa superior. Cuando la fuerza F causa que la placa superior se mueva a una velocidad uniforme, sin importar lo pequeña que sea la magnitud de F, se dice que la sustancia que esta dentro de las placas es un fluido. La fuerza F se puede definir como:

$$F = \mu \frac{AU}{t} \tag{2.1}$$

donde μ es el factor de proporcionalidad e incluye el efecto del fluido en particular. Si $\tau = F/A$ para el esfuerzo cortante,

$$\tau = \mu \frac{U}{t} \tag{2.2}$$

La razón U/t es la rapidez de deformación angular del fluido. La velocidad angular tambien se puede escribir como du/dy (donde y está ubicada en la dirección transversal

al flujo), ya que ambas expresan la velocidad de cambio dividida por la distancia sobre la cual ocurre el cambio. Sin embargo, el segundo es más general, ya que es válida cuando la velocidad angular y esfuerzo cortante cambian con respecto a y. El gradiente de la velocidad du/dy también se puede visualizar como la rapidez con la que una capa se mueve en relación con una capa adyacente. En forma diferencial, la ecuación

$$\tau = \mu \frac{du}{dy} \tag{2.3}$$

es la relación entre el esfuerzo cortante y la rapidez de la deformación angular para el flujo unidimensional de un fluido. El factor de proporcionalidad μ se denomina viscosidad del fluido. La ecuación anterior es la *La ley de viscosidad de Newton*.

Los fluidos se clasifican en newtonianos o no newtonianos. En un fluido newtoniano hay una relación lineal entre la magnitud del esfuerzo cortante aplicado y la rapidez de deformación resultante (μ constante en la ecuación (2.1)). En el fluido no newtoniano hay una relación no lineal entre la magnitud del esfuerzo cortante aplicado y la rapidez de deformación angular. Un *plástico ideal* tiene un esfuerzo de cedencia definido y una relación lineal constante entre τ y du/dy. Una sustancia *tixotrópica*, como la tinta de impresión,tiene una viscosidad que depende la deformación angular inmediatamente anterior a de la sustancia y tiende a asentarse cuando esta en reposo. Los gases y líquidos delgados tienden a ser fluidos newtonianos. Si el fluido se considera tambien incompresible se denomina entonces fluido *ideal* y se traza en la ordenada en la figura siguiente:

2.2. Viscosidad dinámica y cinemática

La viscosidad es la propiedad del fluido en virtud de la cual éste ofrece resistencia a las tensiones de cortadura. La ley de viscosidad de Newton afirma que dada una rapidez de deformación angular en el fluido, el esfuerzo cortante (tensión de contadura) es directamente proporcional a la viscosidad.

La viscosidad de un gas aumenta con la temperatura, mientras que la viscosidad de un líquido disminuye con la temperatura. La resistencia de un fluido al corte depende de su cohesión y su rapidez de transferencia de la cantidad de movimiento molecular. Un líquido, cuyas moléculas dejan espacios entre ellas mucho más cerrados que las de un gas, tienen fuerzas cohesivas mucho mayores que un gas. La cohesión parece ser la causa principal de la viscosidad en un líquido, y como la cohesión disminuye con la



Figura 2.1: Diagrama reológico [8]

temperatura, a la viscosidad le sucederá lo mismo. Por otro lado, un gas tiene fuerzas cohesivas muy pequeñas.

La actividad molecular da origen a un esfuerzo cortante aparente en los gases que es más importante que las fuerzas cohesivas y, como la actividad molecular aumenta con la temperatura, la viscosidad de un gas también aumenta con la temperatura.

Para presiones ordinarias, la viscosidad es independiente de la presión y depende sólo de la temperatura. Para presiones muy grandes, los gases y la mayor parte de los líquidos han demostrado variaciones erráticas en la presión.

Un fluido cuyo estado de reposo o de movimiento sea tal que ninguna capa se mueva en relación con una capa adyacente no establece esfuerzos cortantes aparentes, cualquiera que sea la viscosidad, porque du/dy es cero en todo el líquido.

Las dimensiones de viscosidad se determinan a partir de la ley de viscosidad de Newton (2.3). Resolviendo para la viscosidad μ

$$\mu = \frac{\tau}{du/dy} \tag{2.4}$$

e insertando las dimensiones F, L, T para fuerzas, longitud y tiempo,

$$\tau : F/L^2, \ u : L/T, \ y : L$$
 (2.5)

Por lo tanto,

$$\mu = \frac{F/L^2}{d(LT^{-1})/dL} = \frac{FT}{L^2}$$
(2.6)

Con la dimensión de la fuerza expresada en términos de masa por el uso de la segunda ley del movimiento de Newton, $F = MLT^{-2}$, las dimensiones de viscosidad se pueden expresar como $ML^{-1}T^{-1}$.

La unidad en el Sistema Internacional para la viscosidad es newton-segundos por metro cuadrado $(N \cdot s/m^2)$ o kilogramos por metro - segundo $(Kg/(m \cdot s))$, no tiene nombre. La unidad USC de la viscosidad, es $1lb \cdot s/ft^2$. Una unidad de viscosidad en cgs, llamada poise(P); es igual a $1dina \cdot s/cm^2$ o $1g/cm \cdot s$. La unidad SI es 10 veces mayor que la unidad poise.

viscosidad cinemática La viscosidad μ suele llamarse viscosidad *absoluta* o *dinámica* para evitar confundirla con la viscosidad *cinemática* ν , que es el cociente de la viscosidad absoluta con la densidad

$$\mu = \frac{\nu}{\rho} \tag{2.7}$$

La viscosidad cinemática interviene en muchas aplicaciones, como, por ejemplo en el número de Reynolds. La unidades en el sistema MKS es $m^2 s^{-1}$.

La viscosidad es prácticamente independiente de la presión y depende sólo de la temperatura.

2.3. Densidad

La densidad ρ de un fluido homogéneo se define como su masa por unidad de volumen:

$$\rho = \frac{m}{V} \tag{2.8}$$

Para el agua en condiciones normales (1 atm de presión y 23°C) tenemos que:

$$\rho = 1,000 \ kg/m^3 \tag{2.9}$$

2.4. Presión

Determina la fuerza resultante sobre una superficie. Cuando en un superfice plana (A) se aplica un fuerza (F) de manera uniforme y perpendicular a la superficie, la presión (P) viene dada por:

$$P = \frac{F}{A} \tag{2.10}$$

La presión *presión atmosférica* es una manera de cuantificar a la presión. Pero no es una unidad, pero se define a la la presión atmosférica aproximadamente igual a 101,325 Pascales (Nm^{-2}) .

2.5. Naturaleza del Flujo

Al movimiento de un fluido se le llama *flujo*. El flujo de un fluido puede clasificarse de muchas manera, sin embargo en este trabajo sólo nos interesa el comportamiento turbulento y el laminar, así como el flujo estacionario y no estacionario.

En el flujo *estacionario* el movimiento de las partículas no depende del tiempo, mientras que en flujo *no estacionario* este movimiento sí depende del tiempo.

En el flujo *laminar* las partículas del fluido se mueven a lo largo de trayectorias lisas en capas o láminas, deslizandose una capa sobre la adyacente. En este flujo se cumple la Ley de la Viscosidad de Newton [(2.3)].

En el flujo *turbulento* las partículas del fluido se mueven siguiendo trayectorias muy irregulares, originando un intercambio de cantidad de movimiento de una porción de fluido a otra. Así en el flujo turbulento, la pérdida de energía mecánica varía aproximadamente con el cuadrado de la velocidad, mientras que en el laminar lo hace con la primera potencia.

El flujo laminar no es estable cuando es pequeña la viscosidad, o grande la velocidad o el caudal y se rompe transformándose en turbulento. Una ecuación similar a la ley de viscosidad Newton para el flujo turbulento es:

$$\tau = \eta \frac{du}{dy} \tag{2.11}$$

El factor η no es ahora una propiedad del fluido, sino que depende, además de la densidad y del movimiento del fluido. Se llama viscosidad de remolino. Ahora el problema es encontrar el valor de η en terminos de las varibles macroscópicas, es decir, la posición y los gradientes de velocidad.

2.6. Línea de corriente

Es una línea continua trazada en el fluido que es en cada punto tangente al vector velocidad. Como una partícula se mueve en la dirección de una línea de corriente en cualquier instante su desplazamiento δs , que tiene las componentes δx , δy , δz , tiene la dirección del vector velocidad \vec{q} , cuyas componentes son u, v y w, en las direcciones x, y y z, respectivamente. Las igualdades

$$\frac{\delta x}{u} = \frac{\delta y}{v} = \frac{\delta z}{w} \tag{2.12}$$

estabelcen que las componentes correspondientes son proporcionales y, por tanto, que δs y \vec{q} tienen la misma dirección. Expresando los desplazamientos en forma diferencial

$$\frac{dx}{u} = \frac{dy}{v} = \frac{dz}{w} \tag{2.13}$$

obtenemos las ecuaciones diferenciales de una línea de corriente

2.7. Ecuaciones de variación para sistemas isotérmicos

Sistema Termodinámico. Un sistema termodinámico está constituido por alguna porción del universo físico que nosotros consideramos para su estudio. En el momento en que hablamos de aislar una porción de dicho universo surge automáticamente el concepto de *frontera*, es decir, la superficie que lo separa del resto del universo. Esta frontera son, por ejemplo, las paredes del recipiente.

Un **proceso isotérmico** o proceso isotermo es la evolución de un sistema termodinámico que transcurre a temperatura constante¹.

Ecuación de estado. Es una función que depende de las variables termodinámicas (Presión (P), volumen (V), magnetización (M), etc.). Las variables termodinámicas se dividen en extensivas (dependen del tamaño del sistema, como es el caso del volumen, la masa, etc.) e intensivas (independientes del tamaño del sistema, como son la presión, la temperatura, etc.). Por ejemplo para un gas ideal, la ecuación de estado es $P = R\rho T$,

 $^{^{1}}$ Véase, por ejemplo, los textos [12] y [13]

donde R es la constante internacional de los gases, T temperatura, P presión y ρ densidad (Véanse los textos [13], [12] y [15]).

2.7.1. Ecuación de Continuidad

La ecuación de continuidad describe la variación de la densidad para un punto fijo, como consecuencia de las variaciones del vector de velocidad másica \vec{v} . La ecuación de continuidad es la siguiente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \tag{2.14}$$

El vector $\rho \vec{v}$ es la densidad de flujo de materia (por unidad de volumen) y su divergencia representa la rapidez neta con que disminuye la densidad de flujo de materia por unidad de volumen. Por lo tanto, la ecuación 2.14 establece simplemente que la rapidez con que aumenta la densidad en el interior de un pequeño elemento de rapidez fijo en el espacio, es igual a la velocidad neta de entrada de densidad de flujo de materia en el elemento dividida por su volumen.

La ecuación de continuidad también se puede expresar de la siguiente manera:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot v) = 0 \tag{2.15}$$

Donde el primer término es la derivada substancial (Véase el Apéndice C) de la densidad, es decir, la derivada con respecto al tiempo para un recorrido que sigue el movimiento del fluido. La ecuación de continuidad, expuesta en esta forma, describe la velocidad de variación de la densidad, tal como la ve el observador que flota en un fluido.

Una forma especial muy importante de la ecuación de continuidad, es la correspondiente a un fluido de densidad constante (fluido incompresible). La ecuación se reduce en:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \tag{2.16}$$

Para que la ecuación anterior sea válida, sólo es necesario que ρ permanezca constante para un elemento de fluido que se mueva a lo largo de una línea de corriente, es decir, que $\partial \rho / \partial t = 0$. En el presente trabajo, sólo se ocupa agua para la descripción del patrón de flujo (campo de velocidades), por lo que sólo se utilizará esta forma, puesto que el agua es un fluido incompresible.

2.7.2. Ecuaciones de Movimiento

La cantidad de movimiento entra y sale del elemento de volumen en virtud de dos mecanismos: por *convección* (es decir, debido al flujo global del fluido) y por *trasporte* molecular (o sea, a causa de los gradientes de velocidad).

Las ecuaciones de movimiento (en forma vectorial) se escriben de la siguiente manera (Nótese que esta ecuación depende del tiempo, por lo que se puede usar para flujo estacionarios y no estacionarios):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) = -\left[\nabla \cdot \rho \vec{v} \vec{v}\right] - \nabla p - \left[\nabla \cdot \vec{\tau}\right] + p\vec{g}$$
(2.17)

Donde,

- $\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v})$, rapidez de aumento de cantidad de movimiento por unidad de volumen,
- $-[\nabla \cdot \rho \vec{v} \vec{v}]$, rapidez de ganancia de cantidad de movimiento por convección por unidad de volumen,
- $-\nabla p$, fuerza de presión que actúa sobre el elemento por unidad de volumen,
- $-[\nabla \cdot \vec{\tau}]$, rapidez de ganancia de cantidad de movimiento por transporte viscoso por unidad de volumen,
- $p\vec{g}$, fuerza gravitacional sobre el elemento por unidad de volumen.

Es preciso resaltar que $\nabla \cdot \rho vv$ y $\nabla \cdot \vec{\tau}$ no son divergencias simples, debido a la naturaleza tensorial de $\rho \vec{v} \vec{v}^2$ y $\vec{\tau}$.³. Con ayuda de la ecuación de continuidad se puede obtener la siguiente ecuación:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\nabla p - [\nabla \cdot \vec{\tau}] + p\vec{g} \qquad (2.18)$$

Donde,

- $\rho \frac{D\vec{v}}{Dt}$, masa por unidad de volumen multiplicada por la aceleración,
- $-\nabla p$, fuerza de presión que actúa sobre el elemento por unidad de volumen,

²Es la densidad de flujo convectivo de cantidad de movimiento. Este producto resulta de multiplicar entre si dos vectores. Las componentes se desglosan de la siguiente forma: $\rho v_x v_x$, $\rho v_x v_y$, $\rho v_x v_z$, $\rho v_y v_x$, etc. Este producto se llama diádico.

³Es el tensor de esfuerzo y sus componentes son: τ_{xx} , τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yx} , etc.

- $-[\nabla \cdot \vec{\tau}]$, rapidez de ganancia y cantidad de movimiento por transporte viscoso por unidad de volumen,
- $p\vec{g}$, fuerza gravitacional sobre el elemento por unidad de volumen.

La ecuación de movimiento, expresada en esta forma, establece que un pequeño elemento de volumen que se mueve con el fluido es acelerado por las fuerzas que actúan en él. En otras palabras, es una expresión de la 2da ley de movimiento de Newton:, masa \times aceleración = suma de fuerzas. Vemos, por lo tanto, que el balance de cantidad de movimiento es totalmente equivalente a la segunda ley de movimiento de Newton. Con el fin de utilizar estas ecuaciones para determinar las distribuciones de velocidad, hay que expresar los distintos esfuerzos en función de los gradientes de velocidad y las propiedades del fluido. Para fluido newtonianos, estas expresiones son:

$$\tau_{xx} = -2\mu \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{2}{3}\mu (\nabla \cdot \vec{v})$$
(2.19)

$$\tau_{yy} = -2\mu \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \vec{v})$$
(2.20)

$$\tau_{zz} = -2\mu \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{2}{3}\mu (\nabla \cdot \vec{v})$$
(2.21)

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = -\mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)$$
(2.22)

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = -\mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)$$
(2.23)

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = -\mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)$$
(2.24)

Estas ecuaciones, que constituyen un planteamiento más general de la ley de Newton de la viscosidad, se aplican a los casos en que el fluido circula en todas las direcciones. Sustituyendo las ecuaciones anteriores en la ecuación 2.18 (desglosando componentes), se obtienen las ecuaciones generales de movimiento para un fluido newtoniano que representa variación de la densidad y la viscosidad. En coordenadas rectangulares:

$$\rho \frac{Dv_x}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ 2\mu \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot v) \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \right\} + \rho g_x \\ \rho \frac{Dv_y}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ 2\mu \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot v) \right\} \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \right\} + \rho g_y \\ \rho \frac{Dv_z}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \right\} \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ 2\mu \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot v) \right\} + \rho g_z$$

$$(2.25)$$

Estas ecuaciones conjuntamente con la ecuación de continuidad, la ecuación de estado $p = P(\rho)$, la variación de la viscosidad con la densidad $\mu = \mu(\rho)$ y las condiciones iniciales y límite, determinan completamente la presión, densidad y los componentes de velocidad, para el flujo isotérmico de un fluido.

Para el caso en que la densidad y la viscosidad permanecen constantes y además es un fluido incompresible ($\nabla \cdot \vec{v} = 0$), las ecuaciones anteriores se pueden reducir a la ecuación vectorial siguiente:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + p\vec{g}$$
(2.26)

Esta ecuación es conocida como *ecuación de Navier- Stokes*⁴, describen el comportamiento del flujo laminar. Es importante recordar que para el presente trabajo sólo se ocuparán las ecuaciones para fluidos incompresibles, puesto que se trabajó con agua y éste es un fluido incompresible y además la viscosidad es constante a temperatura ambiente.

Si además el flujo es turbulento, en las ecuaciones aparecen términos adicionales de la forma 2.11 que hay que incluir en la ecuación de Navier-Stokes. Para conocer los valores de η es necesario alguna hipótesis que relacione esta magnitud con la variables de campo. Existen varias posibilidades, una de ellas la trataremos con detalle en una sección más adelante que es el modelo $\kappa - \varepsilon$

⁴Esta ecuación fue obtendida inicialmente por Navier en Francia, en 1822, mediante consideraciones moleculares. Para mayor información sobre la historia de esta y otras obras famosas relaciones de mécanica de fluidos, véase Rouse H. e Ince S., *History of Hydraulics*, Iowa Institute of Hydraulics, Iowa City (1959).

2.7.3. Ecuación general de transporte

Claramente se puede observar que la ecuación 2.26 por componentes $(x, y \neq z)$ son prácticamente iguales. Si introducimos una variable general ϕ , se puede escribir la ecuación de la siguiente forma (desde luego para un fluido incompresible):

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\phi \vec{v}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_{\phi}$$
(2.27)

donde

- $\rho \frac{\partial \phi}{\partial t}$, rapidez de incremento de ϕ del elemenento del fluido.
- $\rho \nabla \cdot (\phi \vec{v})$, rapidez neta del flujo de ϕ fuera del elemento del fluido.
- $\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)$, rapidez de incremento de ϕ debido a la difusión.
- S_{ϕ} , rapidez de incremento de ϕ debido a la fuente (gravedad normalmente).

La ecuación anterior es llamada ecuación de transporte para la propiedad ϕ . Es necesario resaltar que en esta ecuación hay varios procesos de trasporte: el término de rapidez de cambio y el término convectivo en el lado izquierdo de la ecuación y el término difusivo (Γ es el coeficiente difusivo) y el término fuente en el lado derecho. Esta ecuación es usada como el punto de inicio para los precedimientos computacionales en el método de volumen finito. ϕ puede ser igual a 0 (ecuación de continuidad para flujo incompresible), v_x , v_y y v_z (para las componentes de la velocidad) y seleccionando los valores apropiados para los coeficientes de difusión Γ y términos fuentes podemos obtener las ecuaciones de continuidad y de Navier-Stokes, por ejemplo, si $\Gamma = 0, \phi = cte$ y $S_{\phi} = 0$ obtenemos la ecuación de continuidad para fluido incompresible.

El paso clave del MVF, el cual se desarrolla en una sección más adelante, es la integración de la ecuación de transporte en tres dimensiones sobre el volumen de control (VC):

$$\int_{VC} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{VC} \rho \nabla \cdot (\phi \vec{v}) dV = \int_{VC} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV + \int_{VC} S_{\phi} dV$$
(2.28)

El término convectivo y el término difusivo pueden ser re-escritos con la ayuda del teorema de la divergencia de Gauss.

Entonces la ecuación anterior toma la siguiente forma:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{VC} \phi dV \right) + \rho \int_{A} \vec{n} \cdot \phi \vec{v} dA = \int_{A} \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_{\phi} dV$$
(2.29)

El orden de la integración y diferenciación han sido cambiados en el primer término del lado izquierdo para ilustrar el significado físico. Este término significa la rapidez de cambio de la cantidad total de la propiedad de fluido ϕ en el volumen de control. El producto $\vec{n} \cdot \phi \vec{v}$ expresala componente del flujo de la propiedad ϕ debido al flujo de fluido a lo largo del vector normal \vec{n} , el término convectivo, es la rapidez total de decrecimiento de la propiedad del fluido ϕ del elemento de fluido debido a la convección. El término difusivo representa la rapidez de incremento de ϕ debido a la difusión. El último término representa la rapidez total de incremento de la propiedad ϕ como resultado de las fuentes.

Para un flujo estacionario (no depende de t). La ecuación de trasporte en forma integrada queda de la siguiente forma:

$$\rho \int_{A} \vec{n} \cdot \phi \vec{v} dA = \int_{A} \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_{\phi} dV$$
(2.30)

Para problemas no estacionarios es también necesario integrar con respecto al tiempo t sobre un intervalo pequeño Δt , es decir, $t + \Delta t$. Esto nos lleva a la forma más general integrada de la ecuación de trasporte:

$$\rho \int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{VC} \phi dV \right) dt + \rho \int_{\Delta t} \int_{A} \vec{n} \cdot (\phi \vec{v}) dA dt$$

$$= \int_{\Delta t} \int_{A} \vec{n} \cdot (\Gamma_{\phi} \nabla \phi) dA dt + \int_{\Delta t} \int_{VC} S_{\phi} dV dt$$
(2.31)

2.8. Turbulencia

La naturaleza aleatoria del flujo turbulento se opone a los cálculos basados en una descripción del movimiento de todas las partículas del fluido. La velocidad mostrada en la figura 2.2 se puede descomponer en su valor promedio \overline{v} y en la componente que fluctua v'(t), la velocidad toma la siguiente forma: $v(t) = \overline{v} + v'(t)$. En general, descomponer una propiedad por su valor medio y las propiedades estadísticas de su fluctuación, es el método más atractivo para caracterizar el flujo turbulento.



Figura 2.2: Comportamiento del flujo turbulento

2.9. Efectos de turbulencia sobre las ecuaciones de Navier-Stokes

Como se vió en la sección anterior las propiedades del flujo se pueden descomponer en la suma de su valor promedio y en la componente que fluctúa. Para poder modificar las ecuaciones de Navier-Stokes, primero definimos la media Φ de una propiedad del flujo ϕ de la siguiente manera:

$$\Phi = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \phi(t) dt \tag{2.32}$$

Esta definición de media para una propiedad del flujo es adecuada para flujos no estacionarios. Sin embargo, si la propiedad del flujo depende del tiempo (flujo no estacionario), podemos pensar en descomponer la propiedad de la forma que se mostró en la sección anterior, como la suma de la media estacionaria Φ y la componente fluctuando ϕ' , por lo tanto $\phi = \Phi + \phi'$. Si definimos que el valor medio de la componente fluctuante sea cero, entonces:

$$\overline{\phi'} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \phi'(t) dt = 0$$
(2.33)

Considerando la información de la parte fluctuante del flujo podemos, por ejemplo, obtener la raíz-cuadrada-media (rcm) de la fluctuaciones:

$$\phi_{rcm} = \sqrt{\overline{(\phi')^2}} = \left[\frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} (\phi')^2 dt\right]$$
(2.34)

Los valores de rcm de las componentes de la velocidad son de particular importancia, ya que para definir la energía cinética κ la asociamos con los valores de rcm para cada componente de la velocidad ($\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$):

$$\kappa = \frac{1}{2} \left(\overline{v_x'^2} + \overline{v_y'^2} + \overline{v_z'^2} \right)$$
(2.35)

La intensidad turbulenta (I) está relacionada con la energía cinética y a una referencia de la velocidad del flujo medio $\overline{v_{ref}}$ de la siguiente forma:

$$I = \frac{\left(\frac{2}{3}\kappa\right)^{1/2}}{\overline{v_{ref}}} \tag{2.36}$$

Antes de derivar las ecuaciones de flujo medio para un flujo turbulento resumimos las siguientes reglas las cuales gobiernan los tiempos promediados de las propiedades fluctuantes $\phi = \Phi + \phi'$ y $\psi = \Psi + \psi'$ y sus combinaciones, derivadas e integrales:

$$\overline{\phi'} = \overline{\Psi'} = 0; \overline{\Phi} = \Phi; \frac{\overline{\partial\phi}}{\partial s} = \frac{\overline{\partial\Phi}}{\partial s}; \overline{\int\phi ds} = \int \Phi ds$$

$$\overline{\phi + \psi} = \Phi + \Psi; \overline{\phi\psi} = \Phi\Psi + \overline{\phi'\psi'}; \overline{\phi\Psi} = \Phi\Psi; \overline{\phi'\Psi} = 0$$
(2.37)

Puesto que la div y el grad son ambas diferenciaciones que pueden satisfacer las reglas de arriba y éstas pueden ser extendidan a un vector fluctuante $\vec{a} = \vec{A} + \vec{a}'$ y a un escalar fluctuante $\phi = \Phi + \phi'$:

$$\overline{\nabla \cdot (\phi \vec{a})} = \nabla \cdot \overline{(\phi \vec{a})} = \nabla \cdot (\Phi \vec{A}) + \nabla \cdot \overline{(\phi' \vec{a}')};$$

$$\overline{\nabla \cdot (\nabla \phi)} = \nabla \cdot (\nabla \Phi); (\nabla \cdot \vec{a}) = \nabla \cdot \vec{A}$$
(2.38)

Con estas reglas ahora deduciremos las ecuaciones que describen la velocidad y la presión para un fluido incompresible en un tiempo promedio y viscosidad constante, es necesario sustituir en las ecuaciones 2.16 y 2.25 las variables de flujo $\vec{v}(\vec{v} = (v_x, v_y, v_z))$ y p por la suma de sus medias y componentes fluctuantes. Esto es:

$$\vec{v} = \overline{\vec{v}} + \vec{v}'; v_x = \overline{v_x} + v'_x; v_y = \overline{v_y} + v'_y; p = \overline{p} + p'$$

Entonces el tiempo promediado se aplica tomando las reglas establecidas en 2.37. Considerando la ecuación de continuidad 2.16 primero note que $(\nabla \cdot \vec{v}) = \nabla \cdot \vec{v}$. Esto nos da que para el flujo medio será:

$$\nabla \cdot \overline{\vec{v}} = 0 \tag{2.39}$$

Para las ecuaciones de movimiento se utiliza un proceso similar, si usamos la ecuación de Navier-Stokes 2.26 (sin la derivada substancial):

$$\rho\left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + \nabla \cdot (v_x \vec{v})\right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 v_x + \rho g_x \qquad (2.40)$$

$$\rho\left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + \nabla \cdot (v_y \vec{v})\right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \nabla^2 v_y + \rho g_y \qquad (2.41)$$

$$\rho\left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + \nabla \cdot (v_z \vec{v})\right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \nabla^2 v_z + \rho g_z \qquad (2.42)$$

Los tiempos promedios de cada término en estas ecuaciones pueden ser escritas de la siguiente forma:

$$\frac{\overline{\partial u}}{\partial t} = \frac{\partial \overline{u}}{\partial t}; \frac{\overline{\partial p}}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial x}; \overline{\nabla^2 u} = \nabla^2 \overline{u}; \overline{\nabla \cdot (v_x \vec{v})} = \nabla \cdot (\overline{v_x} \overline{\vec{v}}) + \nabla \cdot \overline{(v'_x \vec{v'})}$$
(2.43)

Sustituyendo estas relaciones en la ecuaciones de Navier-Stokes, tenemos:

$$\frac{\partial \overline{v_x}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{v_x}\overline{v}) + \nabla \cdot (\overline{v_x'}\overline{v}) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x} + \nu \nabla^2 \overline{v_x} + g_x \qquad (2.44)$$

$$\frac{\partial \overline{v_y}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{v_y}\overline{v}) + \nabla \cdot (\overline{v_y'}\overline{v}) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{p}}{\partial y} + \nu \nabla^2 \overline{v_y} + g_y$$
(2.45)

$$\frac{\partial \overline{v_z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{v_z} \overline{v}) + \nabla \cdot (\overline{v_z'} \overline{v}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial z} + \nu \nabla^2 \overline{v_z} + g_z$$
(2.46)

Se acostumbra poner los términos que fluctúan del lado derecho de las ecuaciones para mostrar que son términos de tensión turbulentos adicionales a las ecuaciones de movimiento:

$$\frac{\partial \overline{v_x}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{v_x}\overline{v}) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x} + \nu \nabla^2 \overline{v_x} - \left(\frac{\partial \overline{v_x'}^2}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v_x'}v_y'}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v_x'}v_z'}{\partial z}\right) + g_x \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial \overline{v_y}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{v_y} \overline{v}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial y} + \nu \nabla^2 \overline{v_y} - \left(\frac{\partial \overline{v_y' v_x'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v_y' v_z'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v_y' v_z'}}{\partial z} \right) + g_y \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial \overline{v_y}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{v_y v}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial y} + \nu \nabla^2 \overline{v_y} - \left(\frac{\partial \overline{v_z' v_x'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v_z' v_y'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v_z'}}{\partial z}\right) + g_z \quad (2.49)$$

El conjunto de ecuaciones anteriores son llamadas las ecuaciones de **Reynolds**. Los términos de tensiones extra en las ecuaciones anteriores se escriben de la siguiente manera:

$$\tau_{xx} = -\rho \overline{v_x'^2}; \tau_{yy} = -\rho \overline{v_y'^2}; \tau_{zz} = -\rho \overline{v_z'^2}; \tau_{xy} = \tau_{yx} = -\rho \overline{v_x' v_y'};$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = -\rho \overline{v_x' v_z'}; \tau_{yz} = \tau_{zy} = -\rho \overline{v_y' v_z'}$$
(2.50)

Estos términos extras son llamados tensiones de Reynolds. En flujos turbulentos las tensiones normales $-\rho \overline{v'_x}^2$, $-\rho \overline{v'_y}^2$ y $-\rho \overline{v'_z}^2$ son simpre diferentes de cero, porque continen las velocidades cuadradas de las fluctuaciones. La tensiones cortantes $-\rho \overline{v'_x} v'_y$, $-\rho \overline{v'_x} v'_z$ y $-\rho \overline{v'_y} v'_z$ son asociados con correlaciones entre las diferentes componentes de velocidad. Si v'_x , v'_y y v'_z son fluctuaciones estadísticamente independientes entonces $\overline{v'_x} v'_y = 0$. Sin embargo, las tensiones cortantes son también diferentes de cero y usualmente son mucho más grandes que la tensiones viscosas en un flujo turbulento. La ecuación de transporte promediada en el tiempo para una propiedad ϕ es:

$$\frac{\partial \overline{\phi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\phi}\overline{v}) = \Gamma \nabla^2 \phi - \left[\frac{\partial \overline{v'_x \phi'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'_y \phi'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'_z \phi'}}{\partial z} \right] + S_\phi \tag{2.51}$$

Esta ecuación es para el caso en que el coeficiente difusivo es constante (viscosidad constante), en el caso en que no sea, es necesario sustituir el término $\Gamma \nabla^2 \phi$ por $\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)$.

Nótese que se ha considerado que la densidad ρ es constante, puesto que en el presente la densidad del agua es constante.

2.10. Número de Reynolds

El físico irlandés Osborne Reynolds estudió las ecuaciones de Navier - Stokes para intentar determinar cuándo dos flujos diferentes pueden considerarse semejantes. La naturaleza del flujo, es decir, que sea laminar o turbulento, y su posición relativa de la tendencia a que sea laminar o turbulento, se expresa por el *número de Reynolds*. Dos flujos se dice que son *dinámicamente semejantes* cuando:

- 1. Son semejantes geométricamente, es decir, las relaciones lineales correspondientes están en una relación constante;
- 2. Las líneas de corriente correspondientes son semejantes geométricamente, o las presiones en puntos correspondientes están en una relación constante.

Reynolds dedujó que dos sistemas de flujo son dinámicamente semejantes si las ecuaciones diferenciales generales son idénticas. Adimensionalizando al sistema de ecuaciones gobernantes (junto con condiciones de frontera e iniciales), Reynolds encontró que el parámetro adimensional $ul\rho/\mu$ debía ser el mismo en ambos casos. Por lo tanto el número de Reynolds se define como:

$$R_e = \frac{uL\rho}{\mu} = \frac{yL}{\nu} \tag{2.52}$$

donde:

- u, es una velocidad característica,
- L,es una longitud característica,

 ρ , densidad,

 μ , viscosidad.

Reynolds encontró que el flujo en laminar cuando la velocidad se reducía hasta que se hiciera R_e menor que 2000, éste es el *número de Reynolds crítico* para el movimiento de fluidos en el interior de tuberías.

2.11. Modelo $\kappa - \varepsilon$

El modelo $\kappa - \varepsilon^5$ es un procedimiento que cierra el sistema de ecuaciones de flujo medio (ver ecns. 2.39, 2.48, 2.49, 2.48 y 2.51). Este modelo usa las ecuaciones de Reynolds y forma las bases para el cálculo de la turbulencia. Específicamente sirve para calcular la turbulencia en los términos convectivo y difusivo, esto pasa cuando el flujo recircula. En los problemas analizados en este trabajo, estos términos están presentes, puesto que el flujo recircula. Es importante mencionar que este modelo es válido cuando el flujo es completamente turbulento.

La energía cinética instantánea k(t) de un flujo turbulento es la suma de la energía cinética media $\overline{k} = \frac{1}{2}(\overline{v_x^2} + \overline{v_y^2} + \overline{v_z^2})$ y la energía cinética turbulenta $k = \frac{1}{2}(\overline{v_x'^2} + \overline{v_y'^2} + \overline{v_z'^2})$:

$$k(t) = \overline{k} + k \tag{2.53}$$

El desarrollo de arriba es necesario extenderlo con el uso de la rapidez de deformación⁶ y la tensión turbulenta. Para facilitar la subsecuencia de los cálculos es común escribir las componentes de la rapidez de deformación e_{ij} y la tensión τ_{ij} en la forma tensorial (matriz):

$$e_{ij} = \begin{pmatrix} e_{xx} & e_{xy} & e_{xz} \\ e_{yx} & e_{yy} & e_{yz} \\ e_{zx} & e_{zy} & e_{zz} \end{pmatrix} \quad y \quad \tau_{ij} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix}$$

La descomposición de la rapidez de deformación de un elemento de fluido en un flujo turbulento en una componente media y un fluctuante, $e_{ij}(t) = E_{ij} + e'_{ij}$, da como resultado los elementos de la matriz:

$$e_{xx}(t) = E_{xx} + e'_{xx} = \frac{\partial \overline{v_x}}{\partial x} + \frac{\partial v'_x}{\partial x};$$

$$e_{yy}(t) = E_{yy} + e'_{yy} = \frac{\partial \overline{v_y}}{\partial y} + \frac{\partial v'_y}{\partial y};$$

$$e_{zz}(t) = E_{zz} + e'_{zz} = \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial z} + \frac{\partial v'_z}{\partial z};$$

⁵Existen más métodos para modelar la turbulencia, sin embargo en el presente trabajo sólo se hablará del modelo $\kappa - \varepsilon$. Para mayor información véase, por ejemplo, el texto [1].

⁶La rapidez de deformación lineal de un elemento de fluido tiene 9 componentes en 3 dimensiones, 6 de las cuales son independientes en flujos isotrópicos (que se desplazan en todas las direcciones). Son denotados por el símbolo $e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial j} + \frac{\partial v_j}{\partial i} \right)$

$$e_{xy}(t) = E_{xy} + e'_{xy} = e_{yx}(t) = E_{yx} + e'_{yx} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \overline{v_x}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v_y}}{\partial x} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial v'_x}{\partial y} + \frac{\partial v'_y}{\partial x} \right];$$

$$e_{xz}(t) = E_{xz} + e'_{xz} = e_{zx}(t) = E_{zx} + e'_{zx} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \overline{v_x}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial x} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial v'_x}{\partial z} + \frac{\partial v'_z}{\partial x} \right];$$

$$e_{yz}(t) = E_{yz} + e'_{yz} = e_{zy}(t) = E_{zy} + e'_{zy} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \overline{v_z}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v_y}}{\partial z} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial v'_z}{\partial y} + \frac{\partial v'_z}{\partial z} \right];$$

El producto de un vector \vec{a} y un tensor b_{ij} es un vector \vec{c} con componentes que pueden ser calculados por aplicación de las reglas ordinarias del álgebra de matrices:

$$\vec{a}b_{ij} \equiv a_i b_{ij} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \end{pmatrix} = c_j = \vec{c}$$

El producto escalar entre 2 tensores a_{ij} y b_{ij} es evaluado como sigue:

$$a_{ij} \cdot b_{ij} = a_{11}b_{11} + a_{12}b_{12} + a_{13}b_{13} + a_{21}b_{21} + a_{22}b_{22} + a_{23}b_{23} + a_{31}b_{31} + a_{32}b_{32} + a_{33}b_{33}$$

Hemos usado para la componente x el valor de 1, para la componente y el valor de 2 y para la componente z el valor de 3.

2.12. Ecuaciones del modelo $\kappa - \varepsilon$

El modelo $\kappa - \varepsilon$ tiene 2 ecuaciones, una para κ (energía cinética turbulenta) y otra para ε (rapidez de disipación). Usamos κ y ε para definir la velocidad de escala ϑ y la longitud de escala l:

$$\vartheta = \kappa^{1/2}, \ l = \frac{\kappa^{3/2}}{\varepsilon}$$

Experimentos realizados sugieren que la viscosidad cinemática turbulenta ν_t , la cual tiene dimensiones m^2/s , es proporcional al producto de la velocidad de escala turbulenta ϑ (m/s) y la longitud de escala l (m). Por lo tanto:

$$\nu_t = C\vartheta l$$

Donde C es una constante de proporcionalidad dimensional. Entonces la viscosidad de remolino (viscosidad turbulenta dinámica) está dada por:

$$\eta = C\rho\vartheta l = \rho C_{\mu} \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \tag{2.54}$$
donde C_{μ} es una constante de proporcionalidad dimensional. El modelo estándar usa las siguientes ecuaciones de transporte para κ y ε :

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\kappa \mathbf{U}) = \nabla \cdot \left(\frac{\eta}{\sigma_{\kappa}} \nabla \kappa\right) + 2\eta E_{ij} \cdot E_{ij} - \rho\varepsilon$$
(2.55)

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varepsilon \mathbf{U}) = \nabla \cdot \left(\frac{\eta}{\sigma_{\kappa}}\nabla\varepsilon\right) + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{\kappa}2\eta E_{ij}.E_{ij} - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{\kappa} \qquad (2.56)$$

donde:

$$C_{\mu} = 0.09; \ \sigma_{\kappa} = 1.00; \ \sigma_{\varepsilon} = 1.30; \ C_{1\varepsilon} = 1.44; \ C_{2\varepsilon} = 1.92$$
 (2.57)

Los valores de las constantes han sido determinados en experimentos de flujo turbulento para aire y agua [22], [23].

Para calcular las tensiones de Reynolds con el modelo $\kappa - \varepsilon$ se usa la siguiente relación:

$$-\rho \overline{v'_i v'_j} = \eta \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \kappa \delta_{ij} = 2\eta E_{ij} - \frac{2}{3} \rho \kappa \delta_{ij}$$
(2.58)

donde la δ_{ij} es la delta de Kronecker definida de la siguiente forma:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

Los términos que interesan en el presente trabajo para aplicar la ecuación 2.58 son las tensiones normales de Reynolds, es decir, cuando i = j, por lo tanto para $\tau_{xx} = -\rho \overline{v_x'^2}$, $\tau_{yy} = -\rho \overline{v_y'^2}$ y $\tau_{zz} = -\rho \overline{v_z'^2}$. Como se considera un fluido incompresible, entonces:

$$2\eta E_{ij} = 2\eta \left[\frac{\partial \overline{v_x}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v_y}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial z} \right] = 2\eta \nabla \cdot \overline{\vec{v}} = 0$$
(2.59)

Lo que implica

$$\overline{v_i^2} = \frac{2}{3}\kappa$$

Intesidad Turbulenta

La intensida turbulenta, I, se define como la proporción de la velocidad de fluctuaciones, v', entre la velocidad del flujo medio, v_{avg} .

Para un flujo interno, la intesidad turbulenta en la entrada es totalmente dependiente de la historía del flujo. La intensidad turbulenta puede ser estimada con la fómula que se deriva de una correlación empírica para un flujo en un tubo circular:

$$I \equiv \frac{u'}{u_{avg}} = 0.16 \left(\text{Re}_{D_H} \right)^{-1/8}$$
(2.60)

Para flujos internos, la longitud caracterítica es igual al diámetro hidráulico $L = D_H$. El diámetro hidráulico se define como $D_H = 4\frac{A_t}{P_m}$, donde A_t es el Área transversal de la tubería y P_m es el perímetro mojado de la *vena líquida*.

Condiciones de Frontera

Las ecuaciones de modelo κ y ε son elípticas por el término del gradiente de difusión. Su comportamiento es similar a las otras ecuaciones de flujo elíptico, las cuales siguen las siguientes condiciones de frontera:

- 1. Entrada: Los valores de κ y ε debe ser conocidos.
- 2. Salida o eje de simetría: $\partial \kappa / \partial n = 0$ y $\partial \varepsilon / \partial n = 0$.
- 3. Torrente libre: $\kappa = 0$ y $\varepsilon = 0$.
- 4. Paredes Sólidas: El valor de la velocidad es cero.

ŀ

Si no se conoce la información de la entrada, la distribución de entrada para κ y ε en el flujo interno puede ser obtenido de la *intensidad turbulenta I* y una longitud característica L del material por medio de las siguientes relaciones:

$$\kappa = \frac{3}{2} \left(\overline{v}_{ref} I \right)^2; \ \varepsilon = C_{\mu}^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{l}; \ l = 0.07L$$
(2.61)

2.13. MVF para problemas de convección - difusión

El MVF es el que se usa en el trabajo ya que Fluent usa este método. En el presente trabajo esta presente la convección y la difusión⁷. La ecuación estacionaria para la convección - difusión puede ser derivada de la ecuación 2.27 para una propiedad general ϕ , puesto que es estacionario la ecuación de trasporte no depende del tiempo, entonces:

$$\rho \nabla \cdot (\phi \vec{v}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_{\phi} \tag{2.62}$$

La integración formal sobre un volumen de control da:

$$\rho \int_{A} \vec{n} \cdot (\phi \vec{v}) dA = \int_{A} \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_{\phi}$$
(2.63)

⁷En realidad, es posible ignorar el término difusivo en algunos problemas.

El problema principal en la discretización de los términos convectivos es el cálculo del valor de la propiedad de trasporte ϕ en una cara del volumen de control y su flujo convectivo sobre estas fronteras. En el apéndice D se introduce el método de diferenciación central para obtener las ecuaciones discretizadas para los términos de difusión y fuente. Apartir del método introducido en este apéndice, podemos aplicar el mismo método para el término de convección.

2.13.1. Convección - Difusión en una dimensión

En la ausencia de término fuente, la convección y difusión estacionaria de una propiedad ϕ en un flujo con un campo de velocidad v en una dimensión está gobernada (con densidad constante) por:

$$\rho \frac{d}{dx}(v\phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx}\right) \tag{2.64}$$

El flujo tiene que satisfacer también la ecuación de continuidad:

$$\frac{d(\rho v)}{dx} = \frac{dv}{dx} = 0 \tag{2.65}$$

Consideramos el volumen de control en una dimensión mostrada en la figura 2.3 y usamos la notación introducida en el apéndice D. Nuestra atención se enfoca sobre un nodo general P; los nodos vecinos son identificados por W y E y las caras del volumen de control por w y e.



Figura 2.3: Malla en una dimensión [1]

Integrando la ecuación de transporte 2.64 sobre el volumen de control de la Figura 2.3 da:

$$(\rho v A \phi)_e - (\rho v A \phi)_w = \left(\Gamma A \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e - \left(\Gamma A \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w$$
(2.66)

E integrando la ecuación de continuidad 2.65 tenemos:

$$(\rho vA)_e - (\rho vA)_w = 0 (2.67)$$

Para obtener las ecuaciones discretizadas para el problema de convección - difusión tenemos que aproximar los términos en la ecuación 2.66. Es conveniente definir las variables F y D para representar el flujo de masa convectiva por unidad de área y la conductancia de la difusión en las caras de las celdas:

$$F = \rho v; D = \frac{\Gamma}{\delta x}$$

Los valores de la cara de la celda de las variables F y D pueden escribirse como:

$$F_w = (\rho v)_w , \quad F_e = (\rho v)_e$$
 (2.68)

$$D_w = \frac{\Gamma_w}{\delta_{x_{WP}}} \quad , \quad D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta_{x_{PE}}} \tag{2.69}$$

Suponiendo que $A_w = A_e = A$ y empleando la aproximación de diferenciación central para representar la contribución del término de difusión sobre el lado derecho de la ecuación, la ecuación convectiva - difusiva integrada 2.64 podemos ahora escribirla como:

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W)$$
(2.70)

y la ecuación de continuidad integrada 2.65 como

$$F_e - F_w = 0 \tag{2.71}$$

También suponemos que el campo de velocidad es de algún modo conocido, el cual aparece en F_e y F_w . Primero se resuelve la ecuación 2.70, para ello necesitamos calcular la propiedad de transporte ϕ en las caras e y w. Para poder llegar a este propósito necesitamos el esquema de diferenciación central.

2.13.2. Esquema de diferenciación central

La aproximación de diferenciación central ha sido usada para representar los términos de difusión los cuales aparecen en el lado derecho de la ecuación 2.70 y parece lógico tratar la interpolación lineal para calcular los valores de las caras de las celdas para términos convectivos. Para una malla uniforme podemos escribir los valores de las caras de las caras de las caras de las celdas para la propiedad ϕ como

$$\phi_e = (\phi_P + \phi_E)/2 \tag{2.72}$$

$$\phi_w = (\phi_W + \phi_P)/2 \tag{2.73}$$

Sustituyendo las relaciones anteriores dentro de los términos convectivos en la ecuación 2.70 tenemos

$$\frac{F_e}{2}(\phi_P + \phi_E) - \frac{F_w}{2}(\phi_W + \phi_P) = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W)$$
(2.74)

Esta ecuación puede ser reorganizada de la siguiente forma:

$$\left[\left(D_w + \frac{F_w}{2}\right) + \left(D_e - \frac{F_e}{2}\right) + \left(F_e - F_w\right)\right]\phi_P = \left(D_w + \frac{F_w}{2}\right)\phi_W + \left(D_e + \frac{F_e}{2}\right)\phi_E$$
(2.75)

Identificando los coeficientes de ϕ_W y ϕ_E como a_W y a_E las expresiones para la diferenciación central para la ecuación discretizada convectiva-difussiva son:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \tag{2.76}$$

donde

$$a_W = D_w + \frac{F_w}{2} \tag{2.77}$$

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} \tag{2.78}$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) (2.79)$$

Podemos darnos cuenta que la ecuación 2.76 para problemas de convección-difusión estacionario toma la misma forma general que la ecuación D.12 para difusión pura. La diferencia es que los coeficientes contienen términos adicionales para la convección.

2.14. MVF para flujos no estacionarios

En la sección anterior se desarrolló el MVF para un flujo estacionario, en esta sección se tomarán en cuanto los problemas que dependen del tiempo. La ley de conservación para el transporte de un escalar en un flujo no estacionario tiene la forma de la ecuación 2.27. El primer término de la ecuación representa la rapidez de cambio y es cero en flujos estacionarios. La integración del volumen finito de la ecuación 2.27 sobre un volumen de control debe ser sobre un paso de tiempo finito Δt .

A continuación se hará el desarrollo del MVF para Flujos no estacionarios en una dimensión.

El flujo no estacionario en una dimensión está gobernada por la ecuación siguiente:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \frac{\partial v \phi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + S_{\phi}$$
(2.80)

Integrando la ecuación anterior sobre un volumen de control y sobre un intervalo de tiempo t a $t + \Delta t$ da:

$$\rho \int_{CV} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} dt dV + \rho \int_{A} \int_{t}^{t+\Delta t} v \phi dt dA$$
$$= \int_{A} \int_{t}^{t+\Delta t} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dt dA + \int_{CV} \int_{t}^{t+\Delta t} S_{\phi} dt dV$$
(2.81)

Para el gradiente de tiempo, por medio del Apéndice E tenemos que:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \tag{2.82}$$

Para el primer término del lado izquierdo de la ecuación 2.81 tenemos

$$\rho \int_{CV} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} dt dV = \rho \int_{CV} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} dt dV$$

$$= \rho \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \Delta t \Delta V = \rho (\phi_P - \phi_P^0) \Delta V$$
(2.83)

Para el segundo término del lado izquierdo de la ecuación 2.81 tenemos:

$$\rho \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{A} v\phi dAdt = \rho \int_{t}^{t+\Delta t} \left[(vA\phi)_{e} - (vA\phi)_{w} \right] dt$$
(2.84)

Los valores de los flujo ϕ_e y ϕ_w pueden ser sustituidos por sus valores discretos $(\phi_E + \phi_P)/2$ y $(\phi_P + \phi_W)/2$, respectivamente. Si definimos a $F = \rho v$, entonces la ecuación anterior se puede escribir de la siguiente forma:

$$\rho \int_{t}^{t+\Delta t} \left[F_{e} \frac{\phi_{E} + \phi_{P}}{2} - F_{w} \frac{\phi_{P} + \phi_{W}}{2} \right] dt = \rho \left[F_{e} \frac{\phi_{E} + \phi_{P}}{2} - F_{w} \frac{\phi_{P} + \phi_{W}}{2} \right] \Delta t \quad (2.85)$$

Para el primer término del lado derecho de la ecuación 2.81 tenemos

$$\int_{A} \int_{t}^{t+\Delta t} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dt dA = \int_{t}^{t+\Delta t} \left(\Gamma A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \Big|_{w}^{e} dt$$
(2.86)

Discretizando el valor del gradiente de la siguiente forma y además definiendo a la conductancia

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{e} = \frac{\phi_{E} - \phi_{P}}{\delta x_{PE}}; \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{w} = \frac{\phi_{P} - \phi_{W}}{\delta x_{WP}}; D = \frac{\Gamma}{\delta x}$$
(2.87)

Entonces el valor de la integral anterior es

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \left(\Gamma A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \Big|_{w}^{e} dt = \left[D_{e} A_{e} (\phi_{E} - \phi_{P}) - D_{w} A_{w} (\phi_{P} - \phi_{W}) \right] \Delta t$$
(2.88)

Para el último término tenemos

$$\int_{CV} \int_{t}^{t+\Delta t} S_{\phi} dt dV = \int_{t}^{t+\Delta t} \bar{S}_{\phi} \Delta V dt = \bar{S}_{\phi} \Delta V \Delta t = (S_u + S_P \phi_P) \Delta t$$
(2.89)

El cambio de volumen es $\Delta V = A \Delta x$ y si además suponemos que $A = A_e = A_w$, entonces la ecuación 2.81 toma la siguiente forma:

$$\rho(\phi_P - \phi_P^0) A \Delta x + \rho \left[F_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - F_w \frac{\phi_P + \phi_W}{2} \right] \Delta t = \left[D_e A_e(\phi_E - \phi_P) - D_w A_w(\phi_P - \phi_W) \right] \Delta t + \left(S_u + S_P \phi_P \right) \Delta t$$

$$(2.90)$$

Si multiplicamos toda la ecuación anterior por $1/(\Delta t A)$ tenemos

$$\rho(\phi_P - \phi_P^0) \frac{\Delta x}{\Delta t} + \rho \left[F_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - F_w \frac{\phi_P + \phi_W}{2} \right] = \left[D_e A_e(\phi_E - \phi_P) - D_w A_w(\phi_P - \phi_W) \right] + \left(S_u + S_P \phi_P \right)$$
(2.91)

Reordenando la ecuación

$$\left(\rho\frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{F_e}{2} - \frac{F_w}{2} + D_e + D_w - S_P\right)\phi_P = \rho\frac{\Delta x}{\Delta t}\phi_P^0 + \left(D_e - \frac{F_e}{2}\right)\phi_E + \left(D_w + \frac{F_w}{2}\right)\phi_W + S_u$$
(2.92)

$$\left(\rho\frac{\Delta x}{\Delta t} + D_e - \frac{F_e}{2}D_w + \frac{F_w}{2} + F_e - F_w - S_P\right)\phi_P = \rho\frac{\Delta x}{\Delta t}\phi_P^0 + \left(D_e - \frac{F_e}{2}\right)\phi_E + \left(D_w + \frac{F_w}{2}\right)\phi_W + S_u$$

$$(2.93)$$

Por lo tanto, podemos escribir la ecuación simplificando los coeficientes:

$$a_P \phi_P = a_P^0 \phi_P^0 + a_E \phi_E + a_W \phi_W + S_u \tag{2.94}$$

Lo anterior se puede generalizar para tres dimensiones, usando el mismo razonamiento que se usa en el apéndice D.

Capítulo 3

Metodología

Los problemas que se van a modelar en el presente trabajo son: el tanque de temple y el distribuidor (de colada continua). El problema consiste en visualizar el campo de velocidades permitiendo al observador el ubicarse en cualquier punto al interior del sistema. Debe notarse que esta capacidad no la tiene el programa comercial que se utilizó, además del interés de realizar la visualización en el Observatorio Virtual IXTLI¹ de la UNAM.

El tanque de temple es un reactor que enfría (templa) las piezas de acero. Este proceso es una práctica común en la industria, que tiene por finalidad dotar a las piezas de las propiedades mecánicas idóneas para su uso; en partícular, se busca una dureza significativa.

El distribuidor es un reactor intermedio entre la olla proveniente de los hornos y los moldes, su función es principalmente la de recibir el acero proveniente de la olla, contener el metal fundido con pérdidas mínimas de calor y entregar el acero limpio al molde.

El campo de velocidades en el interior de un reactor cobra importancia debido a que influye directamente en la transferencia de calor durante el proceso que se está tratando. Para el caso del tanque de temple, cuando el campo de velocidades en el interior es

¹Ixtli, el observatorio de Visualización de la Universidad Nacional Autónoma de México, es una sala de alta tecnología diseñada para visualizar y simular objetos complejos e imágenes en tercera dimensión, mediante un sistema de realidad virtual inmersa. Para mayor información acerca de la sala véase [27].

Al observar la comparación de las imágenes nos podemos dar cuenta de que la solución del problema y la visualización son muy parecidos. Con ayuda de la sala Ixtli, podemos ver el patrón de flujo (campo de velocidades) en el interior de los reactores metalúrgicos; ya sea para efectos de investigación, educación, etc..

irregular, se presentan defectos en la producción, tales como agrietamiento y distorción extrema en las piezas templadas. Por otra parte, es importante caracterizar la calidad del flujo (% de flujo pistón, volumen de mezcla y volumen muerto) en un distribuidor de colada continua porque incide directamente en la calidad del acero colado y en la vida útil del refractario que reduce el interior del distribuidor. Para ambos sistemas se cuenta con modelos físicos en el Depto. de Ingeniería Metalúrgica de la Facultad de Química; para visualizar el patrón de flujo en los modelos físicos se adiciona colorante de color rojo. En este trabajo la visualización del flujo consiste, entonces, en observar la evolución en el tiempo del campo de concentración de ese colorante.

3.1. Planteamiento

3.1.1. Tanque de Temple

El modelo físico del tanque de temple con agitación por propela fue diseñado y construido con lámina de acrílico de 6 mm de espesor (0.006 m)[11]. En la Figura 3.1 se muestra el modelo físico con las dimensiones acotadas en centímetros. La sección transversal del modelo, es decir, el espesor mide 11.1 cm (0.111 m).



Figura 3.1: Corte Transversal del Modelo; las dimensiones se encuantran acotadas en centímetros y los ángulos en grados [11]

El impulso del agua en el interior del modelo se llevó a cabo con una propela de

tipo marino de 3.5 pulgadas de diámetro (.0889 m), fabricada en acero inoxidable, y ajustada directamente a un motor trifásico Siemens. El funcionamiento de la propela se maneja mediante un controlador Siemens Micromaster 420, que permite ajustar las revoluciones por segundo de la propela (Hz), existiendo una relación frecuencia del motor a frecuencia de la propela [11]:

$$\frac{f_m}{f_p} = 2$$



Figura 3.2: Propela [11]

El modelo se divide en dos zonas (véase Figura 3.3): la Zona 1, donde se ubica la propela y en el cual el agua es impulsada por la rotación de la propela a través de las dos canaletas ubicadas en la parte inferior del tanque; y la zona 2, que es la parte que se resolvió y se visualizó. El agua regresa a la zona 1 por medio de un rebosadero que separa a las dos regiones.



Figura 3.3: Delimitación de las zonas del tanque de temple [11]

Se ha modificado la geometría del problema para tener una malla regular(Véase Figura 3.4) y sea más facíl el uso del visualizador que ofrece Amira. El nuevo espesor del tanque es de 10.8 cm. La línea roja indica la salida del fluido, mientras que las líneas azules indican las entradas del fluido al modelo. La propela del tanque se fijó a una frecuencia de propela de 10 hz, esto da como resultado una velocidad² de flujo de 0.0155 m/s para ambas canaletas.

²El valor de la velocidad fue extraido a partir de los resultados de PIV (*Particle Image Velocimetry*), resultado obtenido por el M. en I. Benjamin Beltran Fragoso [11]



Figura 3.4: Geometría modificada de la Zona 2 del Tanque de Temple; las dimensiones se encuentran acotadas en centímetros.

Como resultado de la velocidad obtenida, se calculó el número de Reynolds, la intensidad turbulenta, la energía cinética turbulenta y la rapidez de disipación.

- Canaleta Superior:
 - Diámetro Hidraúlico:

$$D_H = 4 \frac{0.036m \cdot 0.108m}{2 \cdot 0.036m + 2 \cdot 0.108m} = 0.054m$$

• Número de Reynolds:

$$R_e = \frac{(0.0155m/s)(0.054m)(998.2kg/m^3)}{0.001003kg/(ms)} = 832.994$$

• Intensidad Turbulenta:

$$I = 0.16(832.994)^{-1/8} = 0.069030$$

• Energía Cinética Turbulenta:

$$\kappa = \frac{3}{2} \left(0.0155 m/s \cdot 0.069030 \right)^2 = 1.7172 E^{-6} m^2/s^2$$

• Rapidez de disipación:

$$\varepsilon = 0.09^{3/4} \frac{(1.7172E^{-6}m^2/s^2)^{3/2}}{0.07 \cdot 0.054m} = 9.7823E^{-6}m^2/s^3$$

- Canaleta Inferior:
 - Diámetro Hidraúlico:

$$D_H = 4 \frac{0.036m \cdot 0.108m}{2 \cdot 0.036m + 2 \cdot 0.108m} = 0.047m$$

• Número de Reynolds:

$$R_e = \frac{(0.0155m/s)(0.047m)(998.2kg/m^3)}{0.001003kg/(ms)} = 724.342$$

• Intensidad Turbulenta:

$$I = 0.16(724.342)^{-1/8} = 0.07025$$

• Energía Cinética Turbulenta:

$$\kappa = \frac{3}{2} \left(0.0155 m/s \cdot 0.07025 \right)^2 = 1.7783 E^{-6} m^2/s^2$$

• Rapidez de disipación:

$$\varepsilon = 0.09^{3/4} \frac{(1.7783E^{-6}m^2/s^2)^{3/2}}{0.07 \cdot 0.047m} = 1.1854E^{-7}m^2/s^3$$

La velocidad, la energía cinética turbulenta y la rapidez de disipación son los parámetros iniciales que se introducirán en Fluent, para la solución del problema.

3.1.2. Distribuidor

El modelo físico del Distribuidor también fue diseñado y construido con lámina de acrílico de 6 mm de espesor $(0.006 \text{ m})^3$. En la Figura 3.5 se muestra el modelo físico con las dimensiones acotadas en centímetros⁴.

 $^{^3 \}mathrm{Diseño}$ y construcción hecho por el Dr. Bernardo Hernández Morales de la Facultad de Química de la UNAM.

 $^{^4\}mathrm{La}$ entrada tiene 2 pulgadas de diámetro (0.0508 m) y las salidas tiene 1 pulgada de diámetro (0.0254 m)

Como ya se había mencionado antes, para visualizar los resultados en Amira se modificó la geometría del distribuidor (Véase Figura 3.6), para tener una malla regular. En este caso el flujo (de 30 l/min para el caso estudiado)se midió a través de un flujómetro⁵, la altura que alcanza el agua se fijó a 7*cm*, por esta razón la altura del modelo es la misma.



Figura 3.5: Modelo Físico del distribuidor; las dimensiones están acotadas en centímetros





El color azul indica la entrada de fluido y el color rojo indica la salida de fluido. En este caso tenemos 2 salidas y una entrada⁶. Existe un relación que sirve para calcular

⁵Instrumento utilizado para regular el flujo en una tuberia.

⁶La entrada y las salidas son cuadradas.

la velocidad del flujo que pasa por el flujometro:

$$v = \frac{M_f}{A}$$

Donde, v es la velocidad del flujo, M_f es el valor que marca la válvula al elevarse con el paso de fluido⁷ y A es el área de la tuberia. Por lo tanto la velocidad es:

$$v = \frac{30 \ l/min}{(0.04 \ m)^2} = \frac{30\frac{l}{min} \cdot \frac{1 \ min}{60 \ s} \cdot \frac{.001 \ m^3}{1 \ l}}{(0.04 \ m)^2} = \frac{0.0005m^3/s}{0.0016 \ m^2} = 0.3125 \ m/s$$

Como resultado de la velocidad obtenida, se calculó el número de Reynolds, la intensidad turbulenta, la energía cinética turbulenta y la rapidez de disipación.

Diámetro Hidraúlico:

$$D_H = 4 \frac{(0.04m)^2}{4 \cdot 0.04m} = 0.01m$$

• Número de Reynolds:

$$R_e = \frac{(0.3125m/s)(0.01m)(998.2kg/m^3)}{0.001003kg/(ms)} = 3110$$

• Intensidad Turbulenta:

$$I = 0.16(3110.0448)^{-1/8} = 0.059$$

• Energía Cinética Turbulenta:

$$\kappa = \frac{3}{2} \left(0.3125m/s \cdot 0.059 \right)^2 = 5.0215 E^{-4} m^2 / s^2$$

• Rapidez de disipación:

$$\varepsilon = 0.09^{3/4} \frac{(5.0215E^{-4}m^2/s^2)^{3/2}}{0.07 \cdot 0.01m} = 2.641455E^{-3}m^2/s^3$$

3.2. Mallado

Como ya se mencionó anteriormente, la solución de los problemas de mecánica de fluidos computacional (CFD) consta de 3 etapas, la primera es el pre - procesamiento, que es el mallado del modelo.

⁷Las unidades son litros por minuto (l/min)

Para los objetivos de este trabajo se necesita un programa que genere un mallado regular para esta etapa. En el presente trabajo se utilizó Gambit [25].

Gambit es un software que sirve para la generación de malla y geometría para Fluent a través de una interfaz gráfica. Gambit forma parte de los programas llamados CAD⁸ (*Computer Aided Design*), por esta razón es capaz de cargar formatos de otros CADs, por ejemplo, ACIS, STEP, IGES, etc.

El programa está predeterminado para tener compatibilidad con el programa Fluent 5 o 6. Sin embargo, es necesario exportar la malla en formato MSH (File \rightarrow Export \rightarrow Mesh...), para que Fluent pueda cargar la malla generada por dicho software y pueda entonces porcesar la información.

La pantalla principal de Gambit se muestra en la Figura 3.7. Para iniciar podemos identificar en el lado superior derecho de la pantalla 4 botones, los cuales siguen el orden con que se trabaja en este software⁹[4].



Figura 3.7: Ventana Principal de Gambit

	Crear y modificar la geometría del modelo.
Ē	Crear y modificar la malla del modelo.
آھ	Especificar las fronteras del modelo.

⁸El diseño asistido por computadora es la herramienta principal para la creación de entidades geométricas. Para mayor información véase [24]

⁹En el presente trabajo sólo se hablará de los 3 primeros.

Las opciones para el 1er botón son las siguientes:

T	Crear y modificar los vértices del modelo.
ſ	Crear y modificar las lineas del modelo.
D	Crear y modificar las caras del modelo.
Ø	Crear y modificar los volumenes del modelo.

Las opciones para el 2do botón son las siguientes:

đ	Crear y modificar nodos en 1 dimensión.
đ	Crear y modificar nodos en 2 dimensiones.
Ø	Crear y modificar nodos en 3 dimensiones.

Las opciones para el 2do botón son las siguientes:

Especificar los tipos de frontera.

Malla del Tanque de Temple

Para lograr que la malla del tanque fuera regular se escogió un tamaño de intervalo de separación de un nodo a otro igual a 0.006 ya que éste es el espesor del material con el que está contruido el tanque. Con esta separación dió como resultado 47 nodos en el eje x, 73 nodos en el eje y y 18 nodos en el eje z, para dar un total de 67488 nodos en todo el volumen, el mallado del tanque se muestra en la Figura 3.8.

Malla del Distribuidor

Para el caso del distribuidor se aplicó la misma metodología, sólo que esta vez se ocupó como referencia la mitad de la magnitud de los lados de las salidas -es decir, 0.01- esto dió como resultado un total 159 nodos en el eje x, 8 nodos en el y y 13 nodos en el z, para dar un total de 16518 nodos en todo el volumen, el mallado del distribuidor se muestra en la Figura 3.9.



Figura 3.8: Vista Isométrica del Tanque de Temple



Figura 3.9: Vista Isométrica del Distribuidor

3.3. Solución

Para resolver los problemas antes mencionados, vamos a utilizar un programa llamado Fluent, esta es la segunda etapa de la simulación de CFD.

Fluent es una herramienta de escritorio que simula el flujo de fluidos, la transferencia de calor y las reacciones químicas en sistemas de flujo, mediante la aplicación de MVF. Para mayor información véase [17]. Además de resolver los problemas, cuenta con un poderoso visualizador que permite observar la solución del problema. Sin embargo, este visualizador no permite observar la solución del sistema en su interior (cuando esto es requerido), como lo son los visualizador científicos Amira, OpenDX, etc.

Lo primero que se tiene que hacer para usar Fluent es escoger una dimensión del espacio en la ventana de inicio (Figura 3.10) (en el presenta trabajo ambos problemas están en 3 dimensiones). La pantalla principal de Fluent se muestra en la Figura 3.11. Para cargar la malla exportada por Gambit (archivo con extensión msh), vamos al menú File \rightarrow Read \rightarrow Case..., esto nos abrirá una ventana donde se escoge la dirección donde se encuentra la malla.

FLUENT Version	
Versions	
2d 2ddp	
3d 3ddp	
Selection	
3d	
Mode Full Simulation 💌	
Run Exit	

Figura 3.10: Ventana de Inicio de Fluent

Una vez cargada la malla (véase la Figura 3.12) procedemos a definir las condiciones del problema en el menú Define¹⁰.

- Estabilidad: Define → Models → Solver..., esto abre una ventana (véase Figura 3.13) donde se escoge el estado del sistema (estacionario o no estacionario).¹¹
- Modelo turbulento: Define → Models → Viscous..., esto abre una ventana (véase Figura 3.14) donde se escoge el modelo con el cual se modelará la turbulencia¹²,

¹⁰En ambos casos primero se resulve el problema en estado estacionario, para después resolverlo en estado no estacionario y poder inyectar el colorante

¹¹Las otras opciones están predeterminadas por Fluent.

 $^{^{12} \}mathrm{En}$ nuestro caso ambos problemas se modelaron con el modelo $\kappa-\varepsilon$



Figura 3.11: Pantalla Principal de Fluent

ELUENT [3d, pbns, lam]	
File Grid Define Solve Adapt Surface Display Plot Report Parallel Help	
Welcome to Fluent 6.3.26	A
Copyright 2006 Fluent Inc. All Rights Reserved	
Loading "C:\Fluent.Inc\Fluent6.3.26\lib\fl_s1119.dmp" Done.	
Loading "C:\Users\Luis/.cxlayout" Done.	
> Reading "C:Users:Luis/Desktop/Tesis FracticalTesis FracticalTangue de Temple/TangueTemple.nsh" 5788 nodes 195556 mixed interior Faces, zone 5. 64714 heraderia Cells, zone 7.	
Building grid, interfac, donlins, default-interior default-interior usli fludendurtion zones.	
smeil comouction zones, Done.	

Figura 3.12: Pantalla de Fluent con malla cargada

Solver	
Solver • Pressure Based • Density Based	Formulation f Implicit C Explicit
Space C 2D C Axisymmetric C Axisymmetric Swirl G 3D Velocity Formulation C Absolute C Relative	Time
Gradient Option Green-Gauss Cell Bas Green-Gauss Node Ba C Least Squares Cell Ba	Porous Formulation sed Sed Superficial Velocity Physical Velocity ased
ОК	Cancel Help

Figura 3.13: Resolvedor

también permite introducir las constantes del modelo (presentadas anteriormente para el modelo $\kappa - \varepsilon$), el tipo de modelo $\kappa - \varepsilon$; en el caso de que el usuario tenga su propio código fuente en C para un modelado especial de algunas secciones del modelo, existe una sección en la ventana donde se introduce dicha función, esta es *User-Defined Functions*; si se tiene un tratamiento especial para las paredes del modelo, entonces se puede cambiar la opción *Standard Wall Functions* por la que se le acomode al usuario.

- Materiales: Define → Materials..., esto abrirá una ventana (véase Figura 3.15) donde se agregan los materiales que se van a utilizar, en ambos problemas se agrega agua líquida, esto se logra dando un click en el botón "Fluent Database..." y escogemos en la ventana (véase Figura 3.16) el material water-liquid (H₂O < I >), después damos click en el botón Copy y el material se agregará al problema.
- Condiciones de Operación: Define → Operating Conditions..., esto abrirá una ventana (véase Figura 3.17) en la cual activamos la aceleración debido a la fuerza de gravedad¹³, ya que ésta afecta a ambos problemas.
- Condiciones de Frontera: Define → Boundary Conditions..., esto abrirá una ventana (véase Figura 3.18) la cual permite introducir o modificar las entradas y el fluido del sistema en cuestión. Primero escogemos la entrada que se va a editar y

 $^{^{13}}$ Ponemos la constante de aceleración de la gravedad (9.81) en la dirección del ejey con signo negativo, puesto que Fluent maneja así sus coordenadas

Figura 3.14: Modelos Turbulentos

lame		Material Type	Order Materials By
air		fluid	▼ ● Name
Chemical Formula		Fluent Fluid Materials	C Chemical Formula
		air	▼ Fluent Database
		Mixture	User-Defined Databas
		none	*
roperties			
Density (kg/m3)	constant	▼ Edit	
	1.225		
Viscosity (kg/m-s)	constant	▼ Edit	
	1.7894e-05		
	,		

Figura 3.15: Materiales

Fluent Database Materials	
Fluent Fluid Materials	Material Type fluid Order Materials By © Name © Chemical Formula
Density (kg/m3)	constant View 998.2
رب پریز-در Thermal Conductivity (w/m-k)	constant View
Viscosity (kg/m-s)	0.6 constant view
Nove Edit Cov	

Figura 3.16: Base de Datos de Materiales

Operating Conditions	
Pressure Gravity	
Operating Pressure (pascal)	🗹 Gravity
101325	Gravitational Acceleration
Reference Pressure Location	X (m/s2) 0
X (m) 👔	Y (m/s2) -9.81
Y (m) 🔋	Z (m/s2) 👔
Z (m) 👔	Variable-Density Parameters
	Specified Operating Density
OK Cancel Help	

Figura 3.17: Condiciones de Operación

💶 Boundary Conditio	ins 🔀
Zone Canaleta_inferior canaleta_superior default-interior fluid salida wall	Туре
	ID
Set Copy	Close Help

por último el Fluido. Para poder editar dichas opciones damos click en el botón Set....

Figura 3.18: Condiciones de Frontera

• Entrada (Véase Figura 3.19): En la pestaña Momentum, introducimos la magnitud de la velocidad y en la sección turbulencia introducimos los parámetros del modelo $\kappa - \varepsilon^{14}$ que fueron calculados para ambos modelos en la sección 3.1.

💶 Velocity Inlet 🛛 🔀
Zone Name
canaleta_inferior
Momentum Thermal Radiation Species DPM Multiphase UDS
Velocity Specification Method Magnitude, Normal to Boundary
Reference Frame Absolute
Velocity Magnitude (m/s) g constant
Turbulence
Specification Method K and Epsilon
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2) 1 constant
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3) 1 constant
OK Cancel Help

Figura 3.19: Entrada de Velocidad

- Fluido: En esta ventana cambiamos el material de aire a Agua Líquida (Véase Figura 3.20).
- Solución: Primero tenemos que inicializar los parámetros introducidos, para ellos vamos al menú Solve → Initialize → Initialize..., el cual mostrará una ventana

 $^{^{14}}$ Todas las demás pestañas no se toman en cuenta por el momento

🗳 Fluid 🛛 🔀		
Zone Name		
fluid		
Material Name water-liquid v Edit		
Porous Zone		
🗖 Laminar Zone		
Source Terms		
Fixed Values		
Motion Porous Zone Reaction Source Terms Fixed Values		
Rotation-Axis Origin Rotation-Axis Direction		
×(m) g × g		
Y (m) 8 Y 8		
Motion Type Stationary		
OK Cancel Help		

Figura 3.20: Fluido

(Véase Figura 3.21) donde seleccionamos all-zone de la sección Compute From, después damos click en el botón Init.

Solution Initialization		
Compute From Re	Reference Frame	
all-zones 🗸 🧹	• Relative to Cell Zone	
ſ	Absolute	
Initial Values		
Gauge Pressure (pascal) 👔	^	
X Velocity (m/s) 👩		
Y Velocity (m/s) 👩		
Z Velocity (m/s)	•	
Init Reset Apply Cl	lose Help	

Figura 3.21: Inicializar Solución

 Iterando: Para empezar a iterar el método númerico, vamos al menú Solve → Iterate..., el cual abrirá una ventana (Véase Figura 3.22) en la cual introducimos 500 en el número de iteraciones y después damos click en el botón Iterate y Fluent empezará a resolver el problema.

Cuando el programa se detiene es porque encontró la solución¹⁵. Para ver si el programa hizo bien su trabajo le pedimos al programa que grafique los errores (residuales).

 $^{^{15}}$ No siempre se detiene cuando encuentra la solución, a veces diverge el problema porque no introdujeron bien las condiciones iniciales.

🖴 lterate 🛛 💽
Iteration
Number of Iterations 500
Reporting Interval 1
UDF Profile Update Interval 1
Iterate Apply Close Help

Figura 3.22: Empieza a Iterar el Método Numérico

Si los errores se minimizan significa que es la solución del problema, a continuación se muestran los residuales de ambos problemas.

La gráfica de los residuales del tanque de temple se muestra en la Figura 3.23.



Figura 3.23: Residuales del tanque de temple

La gráfica de los residuales del distribuidor se muestra en la Figura 3.24.

En las dos gráficas de los residuales se puede observar que éstos se minimizan, llegando a valores menores a los criterios de convergencia seleccionados, por lo que es la solución de los problemas en estado estacionario. Ahora procedemos a resolver los problemas en estado no estacionario, esto con el fin de inyectar el colorante y poder visualizar el patron de flujo. Para cambiar el estado del problema nos vamos a la ventana del resolvedor que se mostró en la Figura 3.13. Después de cambiar el problema a estado no estacionario, activamos la opción 'transporte de especiesén el menú Define \rightarrow Models \rightarrow Species \rightarrow Transport & Reaction..., esto abrirá una ventana (Véase Figura 3.25) en la cual activamos esta opción.

Después de activar la opción de transporte de especies, vamos al menú Define \rightarrow Material... para agregar otro material, el cual tiene las mismas propiedades que el agua y sólo cambiamos el nombre de este material¹⁶. El procedimiento para agregar un nuevo

¹⁶En lugar de que se llame water - liquid que es un material ya existente en el problema, le ponemos



Figura 3.24: Residuales del distribuidor

Species Model	
Model C Off Species Transport Non-Premixed Combustion Premixed Combustion Partially Premixed Combustion Composition PDF Transport Reactions Volumetric	Mixture Properties Mixture Material mixture-template View Number of Volumetric Species 3
Options Inlet Diffusion Diffusion Energy Source Full Multicomponent Diffusion Thermal Diffusion OK	y Cancel Help

Figura 3.25: Transporte de Especies

material es el mismo que se utilizó al agregar agua líquida. En la ventana de Materiales (Véase Figura 3.15) en la opción Material Type cambiamos de fluido a *mixture* y en el marco Properties en la opción Density cambiamos incompressible-ideal-gas a volumeweighted-mixing-law, esto porque estamos manejando fluidos y no gases. En el mismo marco hay una opción Mixture Species y adelante hay un botón Edit..., pulsamos ese botón y aparecerá una lista de todos los materiales agregados al problema, en la parte derecha de la ventana agregamos sólo 2 materiales, el Rojo54 y el agua líquida¹⁷ (Véase Figura 3.26), después pulsamos el botón Change/Create. En seguida nos vamos al menú Define \rightarrow Boundary condition ...; en las ventanas de entradas del problema en la pestaña Species ponemos una fracción de 1 en la opción Rojo54 (Véase Figura 3.27).

Species			
Mixture mixture-template			
Available Materials	Selected Species		
air nitrogen (n2) oxygen (o2) water-vapor (h2o)	Rojo54 h2o <l></l>		
	Add Remove		
Selected Site Species	Selected Solid Species		
Add Remove	Add Remove		
OK Cancel Help			

Figura 3.26: Especies

Después de cambiar las opciones antes mencionadas, nos vamos al menú Solve \rightarrow Initialize \rightarrow Initialize ..., en la opción Compute From ponemos all-zone y pulsamos en botón Apply¹⁸ (Véase Figura 3.21). Después nos vamos al menú Solve \rightarrow Iterate; la ventana que empieza a iterar el método númerico ha cambiado (Véase Figura 3.28), en ésta escribimos en la opción Time Step Size 0.01 y en la opción Number of Time Steps tecleamos el número que de el tiempo de simulación que se desee iterar el método. Por ejemplo: Si se quieren 2 segundos ponemos en Number of Time Steps 200 y como en Time Step Size pusimos 0.01 entonces 0.01 ×200 = 2 seg. Para poder seguir el patrón

Rojo54 que es un material que tiene las mismas propiedades que el agua.

¹⁷Es importante que el Rojo54 este primero que el agua líquida, puesto que el problema va a inyectar el primero sobre el segundo. Como ya resolvimos el problema en estado estacionario con agua, tendríamos incongruencias.

¹⁸Si pulsamos el botón Init, inicializaríamos el problema y perderíamos la solución que ya tenemos en estado estacionario.

Velocity Inlet		×
Zone Name		1
canaleta_inferior		
Momentum Thermal Radi	ation Species DPM	Multiphase UDS
Species Mass Fractions		
Rojo54 1	constant	▼ ▲
]		<u>_</u>
0	K Cancel Hel	p

Figura 3.27: Fracción de la Especies

de flujo tenemos que guardar¹⁹ gradualmente la solución del problema en un cierto paso de tiempo. Cada paso de tiempo guardado nos permitirá visualizar el pratrón de flujo en Fluent, o si no, exportar la solución del paso de tiempo a un visualizador externo²⁰.

💽 Iterate 🛛 💌		
Time		
Time Step Size (s) .01		
Number of Time Steps 200		
Time Stepping Method		
• Fixed		
C Adaptive		
C Variable		
Options		
Data Sampling for Time Statistics		
Iteration		
Max Iterations per Time Step 500		
Reporting Interval 1		
UDF Profile Update Interval 1		
Iterate Apply Close Help		

Figura 3.28: Ventana Iterar del estado no estacionario

¹⁹Se tiene que guardar el caso y los datos.

 $^{^{20}\}mathrm{Como}$ ya se mencionó anteriormente el visualizador externo será Amira

Capítulo 4

Resultados

4.1. Datos Experimentales

Los datos experimentales obtenidos fueron capturados con una cámara estándar de videograbación y a través de un software comercial (Microsoft Movie Maker) se obtuvieron las fotografías siguientes:

4.1.1. Tanque de Temple



Figura 4.1: Distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de 23 s



Figura 4.2: Distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de 35 s

4.1.2. Distribuidor



Figura 4.3: Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 6 s



Figura 4.4: Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 15 s



Figura 4.5: Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 25 s

4.2. Visualización con Fluent

Fluent después de resolver los problemas permite visualizar la solución, aunque con limitaciones. Para comenzar tomemos el caso del tanque de temple:

4.2.1. Tanque de Temple



Figura 4.6: Distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de 23 s

Los colores de la imagen representan la concentración de colorante, el espectro de colores va del azul al rojo, cuanto más rojo sea mayor concentración abrá, y si el color es más azul menos concentración abrá. Si comparamos la figura 4.6 con la figura 4.2, podemos ver que son muy similares. Esto valida la simulación realizada en Fluent.





En la figura 4.7, podemos ver la similitud con la figura 4.2, puesto que en el modelo matemático el flujo ya se empieza a pegar a la pared al igual que el modelo físico, y la concentración mayor se encuentra por pasar a la Zona 1.

4.2.2. Distribuidor



Figura 4.8: Colorante inyectado en el Distribuidor después de 6 seg

Comparando la figura 4.8 con la figura 4.3 (recuerde que para el modelo matemático se tomó una altura de 7 cm, que la altura que alcanza el agua en la figura 4.3, que es lo que se ve en la figura 4.8), podemos ver que ambas imágenes son parecidas, ya que se aprecia como el colorante se va pegando a la parte superior formado una especie de pico.



Figura 4.9: Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 15 s



Figura 4.10: Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 25 s

Si comparamos las figuras 4.9, 4.10 con las figuras 4.4, 4.4, respectivamente. Nos podemos dar cuenta de que tienen una forma muy similar. Se puede concluir, enconces, que el modelo matemático del distribuidor también es válido.

Tomando estas consideraciones, podemos exportar la solución encontrada por Fluent a un archivo que pueda leer el visualizador Amira.

4.3. Visualización con Amira

Después de haber guardado las soluciones del los problemas en estado no estacionario, procedemos a exportar el archivo. Los archivos se tienen que exportar por cada paso de tiempo que uno lo desee uno por uno. Para exportar un archivo que pueda ser leido por Amira, primero tenemos que exporta el archivo con extensión Data Explorer (DX). Este archivo fungirá como archivo temporal para generar un archivo de Amira.

Para exportar el archivo primero cargamos un caso guardado con los datos respectivo (File \rightarrow Read \rightarrow Case&Data...). Después de cargar el caso y los datos oprimimos el botón ENTER, después seguimos tecleamos -file \rightarrow ENTER \rightarrow export \rightarrow dx -, después nos pide un nombre a nuestro archivo (*nom_archiv.dx*) y seguido de un doble Intro, escribimos la variable que queremos exportar - que en ambos casos es *concentrationrojo54* - y oprimimos el botón ENTER, para finalizar tecleamos q y oprimimos de nuevo ENTER. Para ilustrar dicho procedimiento, véase la figura 4.11.

```
Markaing "C:\Users\Luis\Desktop\Tesis Practica\Tesis Practica\Tanque de Temple\CorridaInestable-1500.dat"...
Done.
adapt/ file/ report/
display/ grid/ salue/
display/ parallel/ surface/
exit plot/ view/
> file
/file> export
/file/export> dx
DX file name [] CorridaInestable15s.dx
()
Surfaces(1) [()]
TECPL0T scalar(1>) concentration-rojo54
TECPL0T scalar(2>) q
Writing "CorridaInestable15s.dx"...
Wrote 67488 nodes.
Wrote 07488 uelocities.
Wrote 3x67488 velocities.
Wrote 3x67488 velocities.
Wrote 0414 elements.
Wrote 0414 eleme
```

Figura 4.11: Procedimiento para exportar

Esto nos generará un archivo DX. En el archivo exportado se imprimen las posiciones de cada nodo, la conectividad de los nodos, las velocidades y por último la concentración del colorante (concentration - rojo54). En este caso sólo nos interesa la concentración de colorante.

Lo primero que se hizo fue copiar la concentración del colorante a un archivo sin extensión y se le antepuso una cabecera (Véase el apéndice A) con lo cual se puede guardar el archivo con extensión AM.

Al cargar el archivo generado de la forma anterior en Amira, la visualización que vemos en la pantalla no es adecuada. Para ilustrar este error véase la figura 4.12 que debería de corresponder a la misma visualización que la figura 4.9, puesto que se tomó la solución de ese paso de tiempo y se exportó a Amira.



Figura 4.12: Visualización errónea

Al haber tenido estos problemas al visualizar los datos en Amira, se tuvó que pensar en una solución para poder cargar los archivo exportados de Fluent a Amira. Alejandro Salazar Sánchez miembro del Departamento de Visualización de la Dirección de Servicios de Cómputo Académico (DGSCA) de la UNAM, escribió un código en el lenguaje C++ (Véase el Apéndice B) que convertiría los archivos DX en archivos AM. Este código básicamente ordena las concentraciones con respecto a la posición de cada nodo y entonces así se pudieron visualizar los datos generados por Fluent en Amira. La ventaja de usar el visualizador de Amira, es que permite ver el patrón de flujo dentro y fuera del reactor, cosa que no se puede visualizar en Fluent. El resultado de exportar y convertirlos a un formato de Amira con el código fuente en C (Véase el apéndice B):

4.3.1. Tanque de Temple

Vamos a hacer la comparación del resultado experimental con el resultado matématico para el Tanque de Temple:



Figura 4.13: Visualización en Amira de la distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de 23 s



Figura 4.14: Visualización en Amira del la distribución del colorante inyectado en el tanque de temple después de 35 s
4.3.2. Distribuidor

Ahora vamos a hacer la comparación para el caso del Distribuidor de colada continua:



Figura 4.15: Distribución del colorante inyectado en el cistribuidor después de 6 s



Figura 4.16: Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 15 s



Figura 4.17: Distribución del colorante inyectado en el distribuidor después de 25 s

Capítulo 5

Conclusión

En los años veintes las personas que intentaban resolver los problemas de la Dinámica de Fluidos, tenían muchas complicaciones, ya que los cálculos los tenían que hacer a mano. Después con la invención de la computadora, éstas resolvian los problemas dando como resultados números que eran muy díficiles de interpretar por la gran cantidad de información que la computadora daba. Al principio de los años 90's cuando ya se empezaban a desarrollar programas para interpretar los resultados que la computadora había resuelto, ya se podía tener una idea de lo que pasaba en el sistema físico, puesto que se podían analizar de mejor manera los datos. Sin embargo el avance de la tecnología permite hoy en día comprender de una mejor forma el patrón de flujo (campo de velocidades) no sólo visto desde la pared sino que podemos analizar el interior sistemas (en este caso el interior de los reactores metalúgicos).

Amira permite visualizar dicho patrón en una sala de realidad virtual, donde es posible observar con mayor eficiencia el comportamiento del fluido. Los datos obtenidos fueron visualizados en la sala de realidad virtual Ixtli de la Universidad Nacional Autónoma de México, ahora el investigador responsable podrá analizar de mejor manera estos datos.

Es posible visualizar el patrón de flujo en el interior de los reactores metalúrgicos por medio de cálculos realizados con herramientas de CFD. En este trabajo se utilizó el software comercial Fluent para la solución de los problemas.

Se puede tener resultados confiables cuando se modifica un poco la geometría del problema, esto es de gran importancia debido a que, al ser este el primer esfuerzo en una nueva dirección, era importante simplificar los cálculos lo más posible. Con ayuda del código en C, se pudieron convertir los datos exportados por Fluent a un formato compatible para Amira, ahora podremos visualizar el patrón de flujo en el interior de los reactores metalúrgicos en diferentes posiciones depende de como lo desee el investigador. Desde luego, esta nueva capacidad puede también explorarse en el salón de clases (que ahora será el Observatorio Vistual IXTLI).

Se pudo visualizar el patrón de flujo en el interior de los 2 reactores a partir de los cálculos realizados en Fluent.

Este trabajo ya fue ocupado para fines didácticos para que los alumnos de la carrera en Ingeniería Química Metalúrgica, pudíeran entender mejor el comportamiento del patrón de flujo en el interior de estos reactores.

La aportación de este trabajo es brindar el código fuente en el lenguaje C++ para que los alumnos y profesores de la carrera en Ingeniería Química Metalúrgica puedan visualizar cualquier reactor metalúrgico y que además se presenta la metodología que hay que seguir para visualizar los datos que proporciona Fluent.

A través del presente trabajo se podría extender el problema a mallas irregulares, aplicando interpolación.

Apéndice A

Estructura de archivo de Amira

Amira tiene un formato nativo para definir campos escalares. En el presente trabajo se hablo de archivos con extensión AM, a este forma se le conoce como **amiramesh**. Los datos están en forma de un campo escalar en tres dimensiones. La estructura de los archivos (extensión AM) usados en el presente trabajo es:

```
# AmiraMesh 3D ASCII 2.0
# CreationDate: Fri Jul 03 11:27:21 2008
define Lattice 159 8 13
Parameters {
    BoundingBox 0.0 159 0.0 8 0.0 13
    CoordType "uniform",
    Content "159x8x13 float, uniform coordinates"
}
Lattice { double Data } @1
# Data section follows
@1 0.001 0.002
```

La primera línea es una etiqueta que deben tener todos los archivos con formato de amiramesh, en este caso me dice que los datos serán proporcionados en formato ASCII¹. Las demás lineas con el caracter "#" al principio serán comentarios y no serán tomados en cuenta por Amira. La línea "define Lattice 159 8 13" nos dice que estamos definiendo una malla estructurada tridimensional de tamaño $159 \times 8 \times 13$. La palabra "Parameters" presenta carios parámetros que se le pueden dar a Amira, en el presenta trabajo se da las coordenadas "BoundingBox", es decir, un cubo que contiene a los datos, "CoorType" nos dice que el tipo de coordenadas es uniforme, "Content" da información para presentar en Amira. La línea "Lattice double Data 1" nos dice que los datos son de tipo byte y serán listados en donde se encuentre la etiqueta 1. La línea que comienza con 1 nos lista todos los datos en formato ASCII, es decir, dará los datos separados con espacios en blancos.

¹En el presente trabajo sólo se ocupa este formato, pero debe mencionarse que existen otros, como por ejemplo BINARY. Véase [5]

Apéndice B

Códigos fuentes en C

El código fuente en C++ para el Tanque de Temple fue creado por Alejandro Salazar del Departamento de Visualización de la Dirección General de Servicios de Cómputo Acádemico de la Universidad Nacional Autónoma de México y el programa básicamente ordenan los datos exportados por Fluent, ya que al momento de visulizarlos nos dimos cuenta de que Fluent exporta los datos de forma irregular (esto para el caso de visualización con Amira). Entonces con ese fin se creo el archivo en C++, para que ordenará los datos. Para el Distribuidor de colada continua sólo modifique un poco el programa para que me diera buenos resultados. A continuación se muestran los códigos usados para ordenar los datos que Fluent exporta y poder visualizarlos en Amira:

B.1. Código fuente para el tanque de temple

#include<iostream>
#include<fstream>
#include<fstream>
using namespace std;
#define XX 48
#define YY 74
#define ZZ 19
double x[XX*YY*ZZ];
double y[XX*YY*ZZ];

```
double z[XX*YY*ZZ];
double p[XX][YY][ZZ];
int main(void)
{
  int i,j,k,n,s;
  int ii,jj,kk;
  double pi;
  double xmin=999999.99, ymin=999999.99, zmin=999999.99,
  xmax=-99999.99,ymax=-99999.99,zmax=-99999.99;
  char nombre[100],line[256];
  for(n=100,s=1;n<=4000;n+=100,s++)
  {
   sprintf(nombre,"tanque%d.dx",n);
   ifstream archivo_ent(nombre,ios::in);
   archivo_ent.getline(line,256);
   archivo_ent.getline(line,256);
   archivo_ent.getline(line,256);
   archivo_ent.getline(line,256);
     for(i=0;i<XX*YY*ZZ;i++)</pre>
      {
       archivo_ent>>x[i];
       archivo_ent>>y[i];
       archivo_ent>>z[i];
       if(x[i]>xmax)xmax=x[i];
       if(x[i]<xmin)xmin=x[i];</pre>
       if(y[i]>ymax)ymax=y[i];
       if(y[i]<ymin)ymin=y[i];</pre>
       if(z[i]>zmax)zmax=z[i];
       if(z[i]<zmin)zmin=z[i];</pre>
      }
```

```
for(i=0;i<128220;i++)</pre>
       {
       archivo_ent.getline(line,256);
       }
//48 74 19 = 67488
//(0.0,0.282) (0.0,0.438) (0.0-0.108)
     for(i=0;i<XX*YY*ZZ;i++)</pre>
      {
       ii=(int)round(((x[i]-xmin)*(XX-1.0))/(xmax-xmin));
       jj=(int)round(((y[i]-ymin)*(YY-1.0))/(ymax-ymin));
       kk=(int)round(((z[i]-zmin)*(ZZ-1.0))/(zmax-zmin));
       archivo_ent>>p[ii][jj][kk];
      }
   sprintf(nombre,"Tiempo%d.am",s);
   ofstream archivo_sal(nombre,ios::out);
   archivo_sal<<"# AmiraMesh 3D ASCII 2.0\n";</pre>
   archivo_sal<<"# CreationDate: Fri Jan 12 11:27:21 2001\n";</pre>
   archivo_sal<<"define Lattice "<<XX<<" "<<YY<<" "<<ZZ<<"\n";</pre>
   archivo_sal<<"Parameters {\n";</pre>
   archivo_sal<<"BoundingBox 0.0 "<<XX<<" 0.0 "<<YY<<" 0.0 "<<ZZ<<endl;
   archivo_sal<<"CoordType \"uniform\",\n";</pre>
   archivo_sal<<"Content \""<<XX<<"x"<<YY<<"x"<<ZZ
   <<" float, uniform coordinates\"\n";
   archivo_sal<<"}\n";</pre>
   archivo_sal<<"Lattice { double Data } @1\n";</pre>
   archivo_sal<<"# Data section follows\n";</pre>
   archivo_sal<<"@1\n";</pre>
   for(k=0;k<ZZ;k++)
    for(j=0;j<YY;j++)</pre>
     for(i=0;i<XX;i++)</pre>
```

```
{
    archivo_sal<<p[i][j][k]<<" ";
}
}</pre>
```

B.2. Distribuidor

```
#include<iostream>
#include<fstream>
#include<math.h>
using namespace std;
#define XX 159
#define YY 8
#define ZZ 13
double x[XX*YY*ZZ];
double y[XX*YY*ZZ];
double z[XX*YY*ZZ];
double p[XX][YY][ZZ];
int main(void)
{
  int i,j,k,n,sal;
  int ii,jj,kk;
  double pi;
  double xmin=99999.99, ymin=99999.99, zmin=99999.99,
  xmax=-99999.99,ymax=-99999.99,zmax=-99999.99;
  char nombre[100],line[256];
  //for(n=2700,sal=52;n<=3000;n+=100,sal++)</pre>
  {
```

```
sprintf(nombre,"dis25s.dx");
   //sprintf(nombre,"./tinta%02d.dx",n);
   ifstream archivo_ent(nombre,ios::in);
   archivo_ent.getline(line,256);
   archivo_ent.getline(line,256);
   archivo_ent.getline(line,256);
   archivo_ent.getline(line,256);
     for(i=0;i<16518;i++)</pre>
      {
       archivo_ent>>x[i];
       archivo_ent>>y[i];
       archivo_ent>>z[i];
       if(x[i]>xmax)xmax=x[i];
       if(x[i]<xmin)xmin=x[i];</pre>
       if(y[i]>ymax=y[i];
       if(y[i]<ymin)ymin=y[i];</pre>
       if(z[i]>zmax)zmax=z[i];
       if(z[i]<zmin)zmin=z[i];</pre>
      }
     for(i=0;i<29776;i++)</pre>
       {
       archivo_ent.getline(line,256);
       }
//48 74 19 = 67488
//( 0.0 , 0.282 ) ( 0.0 , 0.438 ) ( 0.0 - 0.108)
     for(i=0;i<16518;i++)</pre>
      {
       ii=(int)round(((x[i]-xmin)*(XX-1.0))/(xmax-xmin));
       jj=(int)round(((y[i]-ymin)*(YY-1.0))/(ymax-ymin));
       kk=(int)round(((z[i]-zmin)*(ZZ-1.0))/(zmax-zmin));
```

```
archivo_ent>>p[ii][jj][kk];
    }
 //sprintf(nombre,"Tiempo0.am",n);
      sprintf(nombre,"dis25s.am");
      ofstream archivo_sal(nombre,ios::out);
 archivo_sal<<"# AmiraMesh 3D ASCII 2.0\n";</pre>
 archivo_sal<<"# CreationDate: Fri Jan 12 11:27:21 2001\n";</pre>
 archivo_sal<<"define Lattice "<<XX<<" "<<YY<<" "<<ZZ<<"\n";
 archivo_sal<<"Parameters {\n";</pre>
 archivo_sal<<"BoundingBox 0.0 "<<XX<<" 0.0 "<<YY<<" 0.0 "<<ZZ<<endl;
 archivo_sal<<"CoordType \"uniform\",\n";</pre>
 archivo_sal<<"Content \""<<XX<<"x"<<YY<<"x"<<ZZ<<" float,
                 uniform coordinates\"\n";
 archivo_sal<<"}\n";</pre>
 archivo_sal<<"Lattice { double Data } @1\n";</pre>
 archivo_sal<<"# Data section follows\n";</pre>
 archivo_sal<<"@1\n";</pre>
 //archivo_sal.precision(10);
 //archivo_sal.setf(ios_base::fixed,ios_base::floatfield);
 for(k=0;k<ZZ;k++)
  for(j=0;j<YY;j++)</pre>
   for(i=0;i<XX;i++)</pre>
    {
      archivo_sal<<p[i][j][k]<<" ";</pre>
    }
}
```

}

Apéndice C

Fundamentos matemáticos

C.1. Derivadas con respecto al tiempo

Como ejemplo coloquial, consideremos la concentración de peces en el río Papaloapan. Como los peces se mueven, su concentración ψ será una función de posición (x, y, z)y del tiempo (t). Por lo tanto, $\psi = \psi(x, y, z, t)$.

C.1.1. Derivada parcial con respecto al tiempo

Supongamos que estamos sobre un puente sobre el río y observamos cómo varía la concentración de peces exactamente debajo de nosotros con el tiempo. Como estamos observando, desde un posición fija en el espacio entonces la concentración se describe con $\partial \psi / \partial t$.

C.1.2. Derivada total con respecto al tiempo

Supongamos que viajamos en una lancha con motor que se mueve en el río en una dirección tal que existen tres componentes: en contra, a través y a favor de la corriente. Al referir la variación de la concentración de peces con respecto al tiempo, los números deben de reflejar también el movimiento de la lancha. Por lo tanto, la concentración es descrita por la derivada total:

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{dz}{dt}$$
(C.1)

donde dx/dt, dy/dt y dz/dt son las componentes de la velocidad de la lancha.

C.1.3. Derivada substancial con respecto al tiempo

Supongamos que viajamos en una canoa que simplemente flota. En este caso la velocidad del observador es exactamente la velocidad de la corriente v. La variación de concentración de peces con respecto al tiempo, depende de la velocidad local de la corriente. Este es un caso especial de la derivada total con respecto al tiempo que se denomina "derivada substancial" o, a veces, "derivada siguiendo el movimiento". Está relacionada con la derivada parcial con respecto al tiempo de la siguiente forma:

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + v_x \frac{\partial\psi}{\partial x} + v_y \frac{\partial\psi}{\partial y} + v_z \frac{\partial\psi}{\partial z}$$
(C.2)

en donde v_x , v_y y v_z son las componentes de la velocidad local del fluido v.

C.2. Operador Nabla

El operador vectorial ∇ llamado operador Nabla está definido por

$$\nabla \equiv \hat{i}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{j}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z}$$
(C.3)

C.3. Gradiente

Si $\phi(x, y, z)$ tiene primeras derivadas parciales continuas, entonces se define el gradiente de ϕ como:

grad
$$\phi = \nabla \phi = \hat{i} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial \phi}{\partial z}$$
 (C.4)

C.4. Divergencia

Si A(x, y, z) tiene primeras derivadas parciales continuas, entonces se define la divergencia por

div
$$\vec{A} = \nabla \cdot \vec{A} = \frac{\partial A_1}{\partial x} + \frac{\partial A_2}{\partial y} + \frac{\partial A_3}{\partial z}$$
 (C.5)

C.5. Teorema de la divergencia

La integral de la divergencia de un vector sobre un volumen V es igual a la integral de superficie de la componente normal del vector sobre la frontera de la superficie S. $Que \ es,$

$$\int_{V} \nabla \cdot \vec{F} dv = \oint_{S} \vec{F} \cdot \vec{n} da \tag{C.6}$$

C.6. Laplaciano

Si $\phi(x,y,z)$ tiene primeras derivadas parciales continuas, entonces:

$$\nabla \cdot \nabla \phi = \left(\hat{i}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{j}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right) \cdot \left(\hat{i}\frac{\partial\phi}{\partial x} + \hat{j}\frac{\partial\phi}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)$$
(C.7)

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}$$
(C.8)

Entonces el operador ∇^2 es llamado Laplaciano

Apéndice D

MVF para problemas de Difusión

D.0.1. Introducción

El MVF (método de volumen finito), puede ser ilustrado considerado el proceso de transporte más simple de todos: difusión pura en el estado estacionario. La ecuación que gobierna la difusión estacionaria es:

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_{\phi} = 0 \tag{D.1}$$

La integración del volumen de control, el cual forma el paso clave del MVF que lo distingue de las otras técnicas de CFD, toma la forma siguiente:

$$\int_{CV} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) \, dV + \int_{CV} S_{\phi} dV = 0 \tag{D.2}$$

D.0.2. MVF para difusión de estado estacionario en una dimensión

Considere la difusión de estado estacionario de una propiedad ϕ en un dominio de una dimensión definido el la figura D.1. El proceso es descrito por:

$$\frac{d}{dx}\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right) + S = 0 \tag{D.3}$$

donde Γ es el coeficiente de difusión y S es el término fuente. Los valores de la frontera de ϕ in los puntos A y B estan prescritos. Una ejemplo de este proceso en una dimensión es la conducción de calor en una alambre.



Figura D.1: Dominio definido en 1 dimensión

Paso 1: Generación de la Malla

El primer paso en el MVF es dividir el dominio en volumenes de control discretos. Si ubicamos nodos en el espacio entre A y B. Las fronteras de los volumenes de control son posicionados a mediados del camino entre nodos adyacentes. Cada nodo es rodeado por un volumen de control o celda. La convención usual de los métodos de CFD es mostrado en la Figura D.2.

Un nodo en general está definido por P y sus vecinos en una geometría de una dimensión, los nodos del oeste y el este, son definidos por W y E respectivamente. La cara del lado oeste del volumen de control es referido por 'w'y el lado este por 'e'. Las distancias entre los nodos W y P y entre los nodos P y E, están definidos por δx_{WP} y δx_{PE} , respectivamente. Similarmente las distancias entre la cara w y el punto P y entre P y la cara e estan denotados por δx_{WP} y δx_{Pe} respectivamente. La Figura D.2 muestra que el ancho del volumen de control es $\Delta x = \delta x_{we}$.



Figura D.2: Malla en una dimensión

Paso 2: Discretización

El paso clave del MVF es la integración de la ecuación que gobierna sobre un volumen de control, la cual produce una ecuación discretizada en su nodo P. Para la ecuación que describe la difusión de estado estable en una dimensión [ecuación (D.3)] tenemos:

$$\int_{\Delta V} \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dV + \int_{\Delta V} S dV = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w + \overline{S} \Delta V = 0$$
(D.4)

Aqui A es el área de la sección cruzada de la cara del volumen de control, ΔV es el volumen y \overline{S} es el valor medio de la fuente S sobre el volumen de control. La ecuación (D.4) afirma que el flujo difusivo de ϕ saliendo de la cara Este menos el flujo difusivo de ϕ entrando a la cara Oeste es igual a la generación de ϕ . Por lo tanto constituye a una ecuación de balance sobre el volumen de control.

Para poder continuar con la discretización, es necesario discretizar el coeficiente de difusión Γ y el gradiente $d\phi/dx$ en el lado Este ('e') y el Oeste ('w'). Las aproximaciones lineales parecen ser lo más obvio y el camino más simple para calcular los valores de interfaces y gradientes. Esta práctica es llamada diferenciación central. En una malla linealmente uniforme los valores interpolados para Γ_e y Γ_w estan dados por:

$$\Gamma_w = \frac{\Gamma_W + \Gamma_P}{2} \tag{D.5}$$

$$\Gamma_e = \frac{\Gamma_P + \Gamma_E}{2} \tag{D.6}$$

Los términos para el flujo difusivo están evaluados por:

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx}\right)_{e} = \Gamma_{e} A_{e} \left(\frac{\phi_{E} - \phi_{P}}{\delta x_{PE}}\right) \tag{D.7}$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx}\right)_{w} = \Gamma_{w} A_{w} \left(\frac{\phi_{P} - \phi_{W}}{\delta x_{WP}}\right)$$
(D.8)

En situaciones prácticas, el término fuente S puede ser una función de la variable dependiente. En muchos casos el MVF se apróxima al término fuente por medio de la forma lineal:

$$\overline{S}\Delta V = S_u + S_p \phi_P \tag{D.9}$$

Sustituyendo las ecuaciones (D.8), (D.8) y (D.9) en la ecuación (D.4) da:

$$\Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}}\right) - \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}}\right) + (S_u + S_p \phi_P) = 0 \tag{D.10}$$

Esta ecuación puede ser reorganizada como:

$$\left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}}A_e + \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}}A_w - S_p\right)\phi_P = \left(\frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}}A_w\right)\phi_W + \left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}}A_e\right)\phi_E + S_u \quad (D.11)$$

Escribiendo los coeficientes de ϕ_W y ϕ_E en la ecuación (D.11) como a_W y a_E , y el coeficiente de ϕ_P como a_P , la ecuación se convierte en:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u \tag{D.12}$$

donde

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \tag{D.13}$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \tag{D.14}$$

$$a_P = a_W + a_E - S_P \tag{D.15}$$

Los valores de S_u y S_p pueden ser obtenidos del modelo: $\overline{S}\Delta V = S_u + S_p\phi_P$. Las ecuaciones (D.12) y (D.9) representan las formas discretizados de la ecuación (D.1).

Paso 3: Solución de las ecuaciones

Las ecuaciones discretizadas de la forma (D.12) deben ser montadas en cada nodo para resolver un problema. Para volumenes de control que son adyacentes al las fronteras del dominio la ecuación general discretizada (D.12) es modificada para incorporar las condiciones de frontera.

D.0.3. MVF en dos dimensiones

La metodología usada en la discretización de las ecuaciones en una dimensión puede ser extendida a dos dimensiones. La ecuación de difusión de estado estable es:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S = 0 \tag{D.16}$$

Una porción de la malla usada en 2 dimensiones para la discretización se muestra en la Figura D.3.

Ahora también tenemos 2 nodos vecinos más, el Norte ('N') y el Sur ('S'). Cuando la ecuación (D.16) es formalmente integrada sobre el volumen de control obtenemos:

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx \cdot dy + \int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx \cdot dy + \int_{\Delta V} S_{\phi} dV = 0$$
(D.17)

Observando que $A_e = A_w = \Delta y$ y $A_n = A_s = \Delta x$, obtenemos:



Figura D.3: Malla en dos dimensión

$$\left[\Gamma_e A_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e - \Gamma_w A_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w\right] + \left[\Gamma_n A_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_n - \Gamma_s A_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_s\right] + \overline{S}\Delta V = 0 \quad (D.18)$$

como se vió anteriormente esta ecuación representa el balance de la generación de ϕ en el volumen de control y los flujos a través de sus celdas. Usando las aproximaciones usadas en la sección anterior podemos escribir las expresiones para el flujo a través de las caras en el volumen de control:

Flujo sobre la cara Oeste =
$$\Gamma_w A_w \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_w = \Gamma_w A_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}}$$
 (D.19)

Flujo sobre la cara Este =
$$\Gamma_e A_e \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \Gamma_e A_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}}$$
 (D.20)

Flujo sobre la cara Sur =
$$\Gamma_s A_s \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_s = \Gamma_s A_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_{SP}}$$
 (D.21)

Flujo sobre la cara Norte =
$$\Gamma_n A_n \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_n = \Gamma_n A_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_{PN}}$$
 (D.22)

Sustituyendo las ecuaciones anteriores en la ecuación (D.16) obtenemos:

$$\Gamma_e A_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} - \Gamma_w A_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} + \Gamma_n A_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_{PN}} - \Gamma_s A_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_{SP}} + \overline{S} \Delta V = 0 \quad (D.23)$$

Cuando el término fuente es representado en la forma lineal $\overline{S}\Delta V = S_u + S_p \phi_P$, entonces la ecuación anterior puede ser reorganizada de la siguiente forma:

$$\left(\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} + \frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}} + \frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}} - S_p\right)\phi_P = \left(\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}}\right)\phi_W + \left(\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}}\right)\phi_E + \left(\frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}}\right)\phi_N + \left(\frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}}\right)\phi_S + S_u$$
(D.24)

La ecuación anterior se puede escribir de la forma general discretizada para nodos interiores:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_S\phi_S + a_N\phi_N + S_u$$
(D.25)

donde

$$a_{W} = \frac{\Gamma_{w}A_{w}}{\delta x_{WP}}$$

$$a_{E} = \frac{\Gamma_{e}A_{e}}{\delta x_{PE}}$$

$$a_{S} = \frac{\Gamma_{s}A_{s}}{\delta y_{SP}}$$

$$a_{N} = \frac{\Gamma_{n}A_{n}}{\delta y_{PN}}$$

$$a_{P} = a_{W} + a_{E} + a_{S} + a_{N} - S_{n}$$

Obtenemos la distribución de la propiedad ϕ en una situación de dos dimensiones dadas, escribiendo las ecuaciones discretizadas dela forma (D.25) en cada nodo de la malladel dominio subdividido. En las fronteras donde las temperaturas o los flujos son conocidos las ecuaciones son modificadas e incorporadas a las condiciones de frontera.

D.0.4. MVF en tres dimensiones

La difusión de estado estacionario en tres dimensiones es descrita por:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S = 0 \tag{D.26}$$

Ahora es usada una malla tridimensional para subdividir el dominio. Un típico volumen de control se muestra en la Figura D.4.

Una celda contiene ahora al nodo P que tiene 6 nodos vecinos identificados como Oeste, Este, Sur, Norte Abajo y Arriba (W, E, S, N, B, T). La notación w, e, s, n, by t son usados para referirnos al las caras de las celdas Oeste, Este, Sur, Norte Abajo y Arriba, respectivamente.

Integrando la ecuación (D.26) sobre el volumen de control mostrado, tenemos

$$\begin{bmatrix} \Gamma_e A_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e - \Gamma_w A_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Gamma_n A_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_n - \Gamma_s A_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_s \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Gamma_t A_t \left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)_t - \Gamma_b A_b \left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)_b \end{bmatrix} + \overline{S} \Delta V = 0 \tag{D.27}$$



Figura D.4: Malla en tres dimensión

Siguiendo el procedimiento desarrollado para discretizar los casos en 1 y 2 dimensiones la ecuación anterior se convierte en:

$$\begin{bmatrix} \Gamma_e \frac{(\phi_E - \phi_P)A_e}{\delta x_{PE}} - \Gamma_w \frac{(\phi_P - \phi_W)A_w}{\delta x_{WP}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Gamma_n \frac{(\phi_N - \phi_P)A_n}{\delta y_{PN}} - \Gamma_s \frac{(\phi_P - \phi_S)A_s}{\delta y_{SP}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Gamma_t \frac{(\phi_T - \phi_P)A_t}{\delta z_{PT}} - \Gamma_b \frac{(\phi_P - \phi_B)A_b}{\delta z_{BP}} \end{bmatrix} + (S_u + S_p \phi_P) = 0$$
(D.28)

Podemos reorganizar la ecuación anterior como la ecuación discretizada para nodos interiores:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_S\phi_S + a_N\phi_N + a_B\phi_B + a_T\phi_T + S_u$$
(D.29)

donde

$$\begin{aligned} a_W &= \frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} \\ a_E &= \frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} \\ a_S &= \frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}} \\ a_N &= \frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}} \\ a_B &= \frac{\Gamma_b A_b}{\delta z_{BP}} \\ a_T &= \frac{\Gamma_t A_t}{\delta z_{PT}} \\ a_P &= a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T - S_p \end{aligned}$$

Apéndice E

Precisión de una simulación de flujo

El perfeccionamiento de la malla es la herramienta principal a disposición del usuario de CFD para la mejora de la precisión de una simulación. El usuario normalmente realiza una primera simulación sobre una malla gruesa para obtener una impresión general de las características de la solución. Posteriormente la malla es refinada para obtener una mejor solución. Estos resultados son llamados "independientes de la malla". En este apéndice se muestra una breve base teórica para la mejora de este método. Considere una malla igualmente espaciada mostrada en la figura E.1.



Figura E.1: Malla en una dimensión

Para una función $\phi(x + \Delta x)$ la expansión en serie de Taylor alrededor del punto x

es:

$$\phi(x + \Delta x) = \phi(x) + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_x \Delta x + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_x \frac{\Delta x^2}{2!} + \cdots$$
(E.1)

En nuestra notación usamos los valores discretos ϕ_P y ϕ_E para $\phi(x)$ y $\phi(x + \Delta x)$ respectivamente en la ecuación anterior, entonces podemos escribirla de la siguiente forma:

$$\phi_E = \phi_P + \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_P \Delta x + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_P \frac{\Delta x^2}{2!} + \cdots$$
(E.2)

Reorganizando la ecuación:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{P} = \frac{\phi_{E} - \phi_{P}}{\Delta x} - \left(\frac{\partial^{2}\phi}{\partial x}\right)_{P} \frac{\Delta x^{2}}{2!} - \cdots$$
(E.3)

Entonces

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_P = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} + \text{Términos Truncados}$$
 (E.4)

Si despreciamos los términos truncados podemos escribir

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_P \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \tag{E.5}$$

El error involucrado en la aproximación anterior es debida a los términos despreciados. La fómula E.3 sugiere que el error de truncamiento puede ser reducido cuando Δx decrece rapidamente. En general los términos truncados de un esquema de diferencias finitas contienen término Δx^n . El exponente n de Δx gobierna la rapidez en el cual el error tiende a cero con una malla refinada y es llamado el *orden de la aproximación de diferencia*. Entonces la ecuación E.5 se dice que es de primer orden en Δx y la escribimos de la siguiente manera:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_P = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} + O(\Delta x) \tag{E.6}$$

Esta se usa en los puntos $E \neq P$ (donde $x_E > x_P$) para evaluar el gradiente $\partial \phi / \partial x$ en P, la formula E.6 es llamada la diferencia adelante con respecto al punto P. Para la diferencia hacia atrás se hace un método similar, la cual queda de la siguiente manera:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_P = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} + O(\Delta x) \tag{E.7}$$

Las ecuaciones E.6 y E.7 son ambas precisiones de primer orden. Si hacemos la diferencia entre $\phi(x + \Delta x)$ y $\phi(x - \Delta x)$ tenemos:

$$\phi(x + \Delta x) - \phi(x - \Delta x) = 2\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_P \Delta x + \left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_P \frac{\Delta x}{3!} + \cdots$$
(E.8)

La tercera fómula para $(\partial \phi / \partial x)_P$ puede ser obtenida reordenando la ecuación anterior:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_P = \frac{\phi_E - \phi_P}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \tag{E.9}$$

La ecuación anterior usa los valores de $E ext{ y } W$ para evaluar el gradiente en el punto medio P, y es llamada la fómula de diferencia central. La fómula de diferenciación central es una precisión de segundo orden. La dependencia cuadrática del error sobre la malla significa que el error se reduce más rapidamente en un esquema de segundo orden que en un esquema de primer orden.

Como ejemplo tomemos el punto e, entonces tenemos:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{2(\Delta x/2)} = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \tag{E.10}$$

Bibliografía

- Versteeg, H. K., Malalasekera, W., An Introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method, Wiley, New York, 1995.
- [2] Enzo, Levi, El Agua Según la Ciencia, Castell Mexicana S.A., México, 1989.
- [3] FLUENT 6.3 Users'Guide (2006), Fluent Europe Ltd, Sheffield, UK.
- [4] GAMBIT 2.3 Users'Guide (2006), http://202.41.85.84/doc/gambit2.2/html/ users_guide/ugtoc.htm, Nov/2007.
- [5] Barrón García, Hector, Marín Carrera, Raúl, Direct Volume Rendering con Amira, Dept. de Visualización, DGSCA - UNAM, 2006
- [6] Villegas Díaz, Candy M., Fuentes Viruette, Alex, Creación de demostraciones animadas con AMIRA, Dept. de Realidad Virtual, DGSCA - UNAM, 2006
- [7] LATEX User's guide. http://www.latex-project.org/guides/, Mayo/2008.
- [8] Streeter, Victor I. y Wylie, E. Benjamin. *Mecánica de los Fluidos*, McGraw-Hill Interamericana, México, 2000.
- [9] PSTricks User's Guide. http://www.dante.de/CTAN/graphics/pstricks/base/ doc/pstricks-doc.pdf, Sep/2008.
- [10] Filippo Mori, Lapo. Tables in ET_EX2ε: Packages and Methods. http://www.tug. org/pracjourn/2007-1/mori/mori.pdf, Sep/2008.
- [11] Beltran Fragoso, Benjamin, Modelación Matemática y computacional del Flujo de Fluidos en un Tanque de Temple, Tesis de Maestría, UNAM, Facultad de Química, 2007.
- [12] Zemansky, Mark W., Calor y Termodinámica, Aguilar, Madrid, 1961.

- [13] García-Colín, Leopoldo, Introducción a la Termodinámica clásica, Trillas, México, 1990.
- [14] Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N., Fenómenos de transporte, Repla, México, 1987.
- [15] Huang, K., Statistical Mechanics, Wiley & Sons, USA, 1987.
- [16] Spigel, M. Murray, Matemáticas Avanzadas: para ingeniería y Ciencias, McGraw-Hill, México, 1999.
- [17] Fluent versión 6.3.26, http://www.fluent.com/, Ago/2007.
- [18] Zienkiewicz, O. C., El método de los elementos finitos, Reverte, 1981.
- [19] Segerlind, L. J., Applied finite element analysis, Wiley&Sons, New York.
- [20] Smith, G. D., Numerical solution of Partial Differencial Equations: Finite difference methods, 3ra edición, Clarendon Press, Oxford, 1985.
- [21] Gottlieb, D. y Orszag, S. A., Numerical analysis of spectral methods: Theory and applications, SIAM, Philadelphia, 1977.
- [22] Solorio Díaz, Gildardo, Control de la turbulencia y flujo del acero líquido en un distribuidor de coldada continua mediante la buza de alimentación, tesis de doctorado, Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, 2004.
- [23] Ramírez López, Pável Ernesto, Análisis de la dinámica de flujo y efectos de solidificación en el molde de planchón de acero al bajo carbono producido por la colada continua, tesis de maestría, Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, 2006.
- [24] Duggal, Vijay, A general guide to Computer Aided Design & Drafting -CADD, CAD, Cadd primer, New York, 2007.
- [25] Gambit: CFD preprocessor from Fluent. http://www.fluent.com/software/ gambit/index.htm.
- [26] Hansen, C. H. y Johnson, C. R., The visualization handbook, Elsevier, USA, 2005.
- [27] Sala de Realidad Virtual Ixtli (UNAM), http://www.ixtli.unam.mx/, Ago/2007.