



# **SIMULACIÓN DEL MEZCLADO DE DOS FLUIDOS MISCIBLES EN UN RECINTO CERRADO MEDIANTE EL MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS**

**Ivan Fernando Rueda Duarte**

Universidad Industrial de Santander  
Facultad de Ingeniería Fisicomecánicas  
Escuela de Ingeniería Mecánica  
Bucaramanga, Colombia

2018

# **SIMULACIÓN DEL MEZCLADO DE DOS FLUIDOS MISCIBLES EN UN RECINTO CERRADO MEDIANTE EL MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS**

**Ivan Fernando Rueda Duarte**

Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de Ingeniero  
Mecánico.

**ESCUELA DE INGENIERÍA MECÁNICA**

Director:

**Dr. David Alfredo Fuentes Díaz**

Doctor en tecnología energética

Universidad Industrial de Santander  
Facultad de Ingeniería Fisicomecánicas  
Escuela de Ingeniería Mecánica  
Bucaramanga, Colombia

2018

## **Dedicatoria**

A mí familia por el apoyo incondicional durante toda mi vida.

A mis amigos por la ayuda y el soporte infinito.

Al final la paciencia y la resiliencia dieron frutos.

## **Agradecimientos**

A Tiby, Omar Mogollon por la gigantesca ayuda prestada.

A David Fuentes, por tanto tiempo y paciencia dedicada.

A mis padres, hermanos y sobrinos.

Al equipo de Super computación y Calculo Científico de la UIS, por el apoyo técnico prestado.

A mi por ser tan cool.

# Contenido

<b>Introducción</b>	<b>18</b>
<b>1 Justificación</b>	<b>20</b>
1.1 Encuentro de las aguas . . . . .	20
1.2 Oleoductos . . . . .	22
<b>2 Objetivo del Proyecto de Grado</b>	<b>24</b>
2.1 Objetivo General . . . . .	24
2.2 Objetivos Específicos . . . . .	24
<b>3 Corrientes generadas por gravedad</b>	<b>25</b>
3.1 Introducción . . . . .	25
3.2 Descripción del fenómeno . . . . .	29
3.3 Modelamiento Matemático . . . . .	31
<b>4 Marco Teórico</b>	<b>36</b>
<b>5 Metodología</b>	<b>44</b>
5.1 OpenFOAM . . . . .	44
5.2 Desarrollo de la Simulación . . . . .	45
5.3 Determinación Número de Procesadores . . . . .	48
5.4 Determinación de la Malla . . . . .	49
5.5 Simulación en 3D . . . . .	55
<b>6 Comprobación Respecto a la Literatura</b>	<b>58</b>

6.1 Orientación Horizontal . . . . .	59
6.2 Orientaciones inclinadas . . . . .	65
6.3 Orientación Vertical . . . . .	74
<b>7 Caso de estudio</b>	<b>79</b>
7.1 Orientación horizontal . . . . .	79
7.2 Orientaciones inclinadas . . . . .	85
7.3 Orientación Vertical . . . . .	94
<b>8 Conclusiones</b>	<b>101</b>
<b>9 Recomendaciones</b>	<b>103</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>104</b>
<b>Anexos</b>	<b>107</b>

# Lista de Figuras

Figura 1	A la izquierda, se observa el río Negro y el río Solimões separados, a la derecha cuando se juntan los dos ríos y forman el río Amazonas - Imagen obtenida de Google Maps. . . . .	21
Figura 2	A la izquierda, se observa los dos ríos imagen del río al inicio de la mezcla, imagen de la derecha la mezcla de fluidos aguas abajo - Imagen obtenida de Google Maps. . . . .	21
Figura 3	Oleoducto (gris claro) con inclinación considerable, vía Bucaramanga - Barrancabermeja, a la altura de Brisas de México, Coordenadas (7.144967, -73.272821) - Imagen de Google Street View.	23
Figura 4	Una nube de tormenta de polvo masivo está cerca de envolver un campamento militar, Al Asad, Iraq, abril 27, 2005. DoD photo by Corporal Alicia M. Garcia, U.S. Marine Corps. - Fuente: <a href="https://en.wikipedia.org/wiki/Dust_storm">https://en.wikipedia.org/wiki/Dust_storm</a> . . . . .	26
Figura 5	Delta del río Magdalena - De Alexrk2 - Source for this data set was the Global Land Cover Facility, Dominio público- Fuente: <a href="https://es.wikipedia.org/wiki/Rio_Magdalena">https://es.wikipedia.org/wiki/Rio_Magdalena</a> . . . . .	27
Figura 6	Difusión entre el agua dulce y agua salada- Boca de Ceniza, Colombia - imagen obtenida de Google Maps. . . . .	28
Figura 7	Las fuerzas que actúan en la flotación <sup>1</sup> . . . . .	38

---

<sup>1</sup>WIKIPEDIA. *Bouyancy*. 2017. URL: <https://en.wikipedia.org/wiki/Buoyancy>.

Figura 8	Ejemplo del fenómeno en nubes en Sagunto, Valencia, España. Fotografía Minerva Gracia García - Pinterest: <a href="https://co.pinterest.com/pin/198228821070589484/">https://co.pinterest.com/pin/198228821070589484/</a> . . . . .	40
Figura 9	Inestabilidad Rayleigh-Taylor presentada por fluidos de diferentes densidades, en azul fluido más pesado - Youtube: <a href="https://youtu.be/yabqo7VFTYs">https://youtu.be/yabqo7VFTYs</a> . . . . .	41
Figura 10	Nodos centrados en volumen de control <sup>2</sup> . . . . .	43
Figura 11	Archivos que componen un caso típico de OpenFoam. . . . .	45
Figura 12	Ubicación de los fluidos en el instante inicial. . . . .	47
Figura 13	Gráfica tiempo utilizado para el procesamiento en paralelo - A la izquierda, gráfica para una malla de 50, a la derecha, para una malla 100. . . . .	48
Figura 14	Forma típica de dividir el problema en paralelo. . . . .	50
Figura 15	A. malla 100, B. malla 150, C. malla 200, D. malla 250. . . . .	51
Figura 16	Gráfico comparación tiempo de procesamiento y malla; arriba tiempo en días, abajo en horas. . . . .	52
Figura 17	Gráfica tamaño de las simulaciones frente a la malla. . . . .	53
Figura 18	Arriba gráfica entre tiempo de reconstructPar y malla, abajo gráfica entre tiempo de las aplicaciones complementarias y malla. . .	54
Figura 19	Fronteras en las condiciones iniciales del campo de velocidad. . . . .	55
Figura 20	Simulación con $At = 5x10^{-3}$ a un tiempo de 20 segundos. a) Imagen sin recortar normal a z, b) Imagen recortada a 0.5 en z, c) Imagen recortada a 0.75 en z, d) isocontornos 0.5, con color para representar el campo de velocidad. . . . .	56

---

<sup>2</sup>FERZIGER, J H y PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics* - J. 2002.

Figura 21	Simulación con $\gamma = 0,99$ a) Imagen con tiempo de simulación de 20 segundos, b) isocontorno a 0.5 a 20 segundos, el ajuste de colores simboliza el campo de velocidad, c) Imagen de simulación a 50 segundos, d) isocontorno a 0.5 a 50 segundos, el ajuste de colores representa el campo de velocidad. . . . .	57
Figura 22	Imagen en el instante inicial de la simulación, en rojo el fluido pesado, en azul el liviano. . . . .	59
Figura 23	Imágenes de la simulación, a la izquierda en un tiempo de 8 segundos, a la derecha en un tiempo 50 segundos. . . . .	61
Figura 24	A la izquierda, imagen del artículo línea negra simulación y línea gris datos obtenidos experimentalmente; a la derecha, gráfica obtenida en la simulación. . . . .	61
Figura 25	A la izquierda, imagen del artículo línea negra simulación y línea gris datos obtenidos experimentalmente; a la derecha, gráfica obtenida en la simulación. . . . .	62
Figura 26	A la izquierda, imagen del artículo línea negra simulación y línea gris datos obtenidos experimentalmente; a la derecha, gráfica obtenida en la simulación. . . . .	62
Figura 27	Captura de imagen en un tiempo $t^* = 40$ , los tres puntos negros representan las alturas $h_{ADV}^*$ 0.063, 0.125, 0.188, desde la parte del fondo hacia arriba respectivamente. . . . .	65
Figura 28	Captura de imagen en un tiempo $t^* = 59$ , los tres puntos negros representan las alturas $h_{ADV}^*$ 0.063, 0.125, 0.188, desde la parte del fondo hacia arriba respectivamente. . . . .	65
Figura 29	Geometría utilizada para las simulaciones . . . . .	66

Figura 30	A la izquierda, imagen del artículo; a la derecha, gráfica obtenida en las simulaciones. . . . .	69
Figura 31	A la izquierda, imagen del artículo; a la derecha, gráfica obtenida en las simulaciones. . . . .	70
Figura 32	Simulaciones realizadas, el número es correspondiente a la Tabla 5. . . . .	72
Figura 33	Geometría utilizada en la simulación, en rojo fluido con mayor densidad; en azul fluido con menor densidad. . . . .	74
Figura 34	De izquierda a derecha, simulaciones del 1 al 4, en un tiempo de simulación de 15 segundos. . . . .	77
Figura 35	Geometría utilizada para la realización de las simulaciones. . .	79
Figura 36	Gráfica de resultados obtenidos, a la izquierda velocidad frente a Atwood, a la derecha velocidad frente viscosidad cinemática. . . . .	81
Figura 37	Remolinos generados en las esquinas de la simulación 1. . . .	82
Figura 38	Imágenes del frente de mezcla de las simulaciones 1 a 6. . . .	83
Figura 39	Gráfica de velocidad frente al tiempo en la simulación 1. . . . .	84
Figura 40	Imagen de la simulación en el instante 3600 segundos, a la izquierda simulación 1 ( $At = 0,01$ ), a la derecha simulación 3 ( $At = 0,0004$ ). . . . .	84
Figura 41	a) Gráfica con viscosidad Constante y variando el número de Atwood, para las diferentes orientaciones, b) gráfica 2 con número de Atwood constante y variando la viscosidad, para las diferentes orientaciones. . . . .	88
Figura 42	Imagen de las simulaciones en un tiempo de 10 segundos. . .	89

Figura 43	a) Gráfica con viscosidad Constante y variando el número de Atwood, para las diferentes orientaciones, b) gráfica 2 con número de Atwood constante y variando la viscosidad, para las diferentes orientaciones . . . . .	90
Figura 44	Imagen de las simulaciones en un tiempo de 49 segundos. . .	92
Figura 45	Gráficas de velocidad frente a tiempo, a la derecha gráfica 1, a la izquierda gráfica 2. . . . .	93
Figura 46	Desarrollo de inestabilidades Rayleigh-Taylor, a la izquierda para una mezcla de $At = 0,01$ a 11 segundos, a la derecha mezcla de $At = 0,004$ en un tiempo 70 segundos. . . . .	96
Figura 47	Desarrollo de inestabilidades Rayleigh-Taylor, a la izquierda para una mezcla de $At = 0,01$ a 11 segundos, a la derecha mezcla de $At = 0,004$ en un tiempo 70 segundos. . . . .	97
Figura 48	Imágenes de las simulaciones en el tiempo de muestra, simulaciones del 1 al 6. . . . .	98
Figura 49	Imágenes de las simulaciones en el tiempo de muestra a isocontorno a concentración igual 0.5, simulaciones del 1 al 6. . . . .	99

# Lista de Tablas

Tabla 1	Malla frente a No. procesadores . . . . .	49
Tabla 2	Datos dados en el artículo . . . . .	59
Tabla 3	Datos utilizados en la simulación del caso de comprobación Hatcher . . . . .	60
Tabla 4	Error en el pico inicial. . . . .	63
Tabla 5	Datos utilizados en las simulaciones. . . . .	67
Tabla 6	Simulaciones en la orientación vertical . . . . .	75
Tabla 7	Comparación de los resultados obtenidos en el artículo respecto a las simulaciones. . . . .	76
Tabla 8	Datos utilizados en las simulaciones. . . . .	80
Tabla 9	Resultados de velocidad obtenidos en las simulaciones del caso de estudio en orientación horizontal. . . . .	80
Tabla 10	Datos utilizados en las simulaciones. . . . .	86
Tabla 11	Datos utilizados en las simulaciones. . . . .	94
Tabla 12	Resultados obtenidos en la simulación. . . . .	95

## LISTA DE ANEXOS

	<b>pág.</b>
Anexo A: Ejecutar el programa en SLURM . . . . .	107
Anexo B: Código implementado . . . . .	108

# Resumen

**Título:** Simulación del mezclado de dos líquidos mediante volúmenes finitos.<sup>3</sup>

**Autor:** Ivan Fernando Rueda Duarte.<sup>4</sup>

**Palabras Claves:** CFD, OpenFOAM, mezclado de líquidos, volúmenes finitos, corrientes generadas por gravedad, computación en paralelo.

**Descripción:** El movimiento de dos líquidos dado por corrientes gravitacionales es de gran importancia para conocer los fenómenos que ocurren en la naturaleza tales como el desplazamiento de una avalancha de nieve, la mezcla de agua dulce con agua de mar en los deltas de ríos, mezcla de contaminantes en un estanque, entre otros, este movimiento es regido por las propiedades reológicas de los mismos, estas, junto con el coeficiente de difusión establecen la relación de mezcla además del movimiento en la interfaz de los líquidos.

El estudio de estos fenómenos ayuda a entender cómo el comportamiento y movimiento de los fluidos es afectado por las propiedades de los mismos, además de ayudar a conocer los factores claves que influyen en el proceso; por ejemplo, mostrar que la velocidad de desplazamiento de un fluido sobre otro, es afectada en mayor medida por la diferencia de densidades entre los dos mas que por la viscosidad cinemática.

En este documento se presenta un estudio llevado a cabo con el fin de describir los fenómenos que afectan al mezclado de fluidos en una cavidad confinada, en diferentes inclinaciones. El desarrollo del mismo se realizó mediante simulaciones en OpenFOAM ®, el cual se ejecutó en paralelo en el supercomputador GUANE de la Universidad Industrial de Santander. Este documento pretende servir como guía para la realización de librerías en C++, que ayuden en la labor investigativa y de aprendizaje.

---

<sup>3</sup>Trabajo de grado.

<sup>4</sup>Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas. Escuela de Ingeniería Mecánica. Director: PhD. David Alfredo Fuentes Díaz

## Abstract

**Title:** Simulation of the mixing of two liquids by finite volumes.<sup>5</sup>

**Author:** Ivan Fernando Rueda Duarte.<sup>6</sup>

**Keywords:** CFD, OpenFOAM, liquid mixing, finite volumes, gravity currents, parallel computing.

**Description:** The movement of two liquids given by Gravity Currents is of great importance in order to know the phenomena which happens in nature such as the displacement of a snow avalanche, the mixture of fresh water with sea water in the delta of rivers, mixture of pollutants in a pond, among others. This movement is governed by the rheological properties of them together with the diffusion coefficient establishes the relationship of mixing also the movement at the interface of the liquids. The study of these phenomena leads us to understand how the fluid behavior and movement, which is affected by the properties of the same, besides helping to be aware of the key factors that influence the process, such as known that the speed of movement of a fluid over another is affected to a greater extent by the difference of densities between the two, than kinematic viscosity.

This paper aims to present a study carried out with the purpose of describing the phenomena which affects the mixing of fluids in a confined cavity, in different sloping. The development of the same was carried out by means of simulations in OpenFOAM, which was executed in parallel in the supercomputer GUANE of the Industrial University of Santander. This document is intended as a guide for the development of libraries in C ++, which will aid in the research work and learning.

---

<sup>5</sup>Degree work.

<sup>6</sup>Faculty of Physical-mechanical Engineering. mechanical Engineering School. Director: PhD. David Alfredo Fuentes Díaz

## Introducción

En la actualidad el estudio del movimiento de los fluidos es acaparado por el CFD (*Computer Fluid Dynamics*), este se apoya en las ciencias computacionales para desarrollar las considerables cantidades de ecuaciones en un periodo de tiempo. Conforme ha avanzado la tecnología, el CFD ha proporcionado visualizaciones y soluciones más completas y complejas a fenómenos de la vida cotidiana. Para estas visualizaciones es necesario conocer las ecuaciones que rigen el fenómeno, solucionar dichas ecuaciones y visualizar los datos obtenidos, para su posterior análisis. Los procesos son realizados mediante un software enfocado en este tema, algunos de carácter privado, no permiten ver el método de solución de ecuaciones usado o efectuar alguna modificación, por otra parte existen otros gratuitos, que sí permiten ver su solución y pueden ser modificados para diferentes propósitos; Este es el caso de OpenFOAM, un software de licencia GPLv3, de uso libre.

El fenómeno de las corrientes generadas por gravedad (CG) estudiado en el presente trabajo, es observado tanto en la naturaleza como en las procesos generados por los humanos. En la naturaleza estos fenómenos son contemplados de manera inofensiva como la desembocadura de un río en el océano, los frentes de vientos marinos, corrientes marinas, e incluso en eventos peligrosos como las tormentas de arena, avalanchas de nieve, erupciones volcánicas, entre otros. Considerando ahora los efectos generados por el hombre se encuentran de diferente naturaleza tales como dispersión de contaminantes en un afluente, mezclado de combustibles en un oleoducto o en liberación de gases peligrosos. Como se ha descrito, las CGs, son fenómenos frecuentemente observados y de gran importancia para la explicación de desastres naturales, es por esto que se ha decidido estudiar los comportamientos internos que las atañen.

En el desarrollo del presente trabajo se realizó la simulación de una cavidad

cuadrada y rectangular, con dos fluidos de diferente densidad, dispuestos en diferentes orientaciones; para su solución se utilizó el método numérico de volúmenes finitos, OpenFOAM fue el programa usado, empleando el solver *twoLiquidMixingFOAM*, el cual permite la simulación de un flujo multicomponente.

Las simulaciones descritas anteriormente, se llevaron a cabo a razón de obtener un mayor conocimiento de la dinámica del mezclado de los fluidos, así como para verificar y apropiarse de la teoría que rigen los fenómenos Kelvin-Helmholtz y Rayleigh-Taylor descritos en la literatura. El entendimiento de estos fenómenos es primordial para describir, estudiar y profundizar en otros estudios de mayor envergadura, tales como los desastres naturales. La comprensión física de los desastres naturales ayuda a la mitigación de los daños a las poblaciones circundantes. Por estas razones la Escuela de Ingeniería Mecánica de la Universidad Industrial de Santander ha impulsado el estudio de fenómenos físicos con el fin de ayudar en la fomentación, comprensión y creación de estos conocimientos, y así realizar estudios que sean pieza clave para aplicaciones más complejas en el futuro.

Es bajo estas premisas que el presente proyecto se desarrolló, estudiando el mezclado de fluidos para diferentes orientaciones (horizontal, vertical e inclinadas) con el objetivo de esclarecer los fenómenos y aportar una base para proyectos e investigaciones futuras. De esta forma en el trabajo actual, se extienden cotejos entre literatura y OpenFOAM, con motivo de verificar su validez, después, se realizaron simulaciones en diferentes orientaciones y geometrías con el objetivo de ayudar a la comprensión de los fenómenos físicos antes descritos.

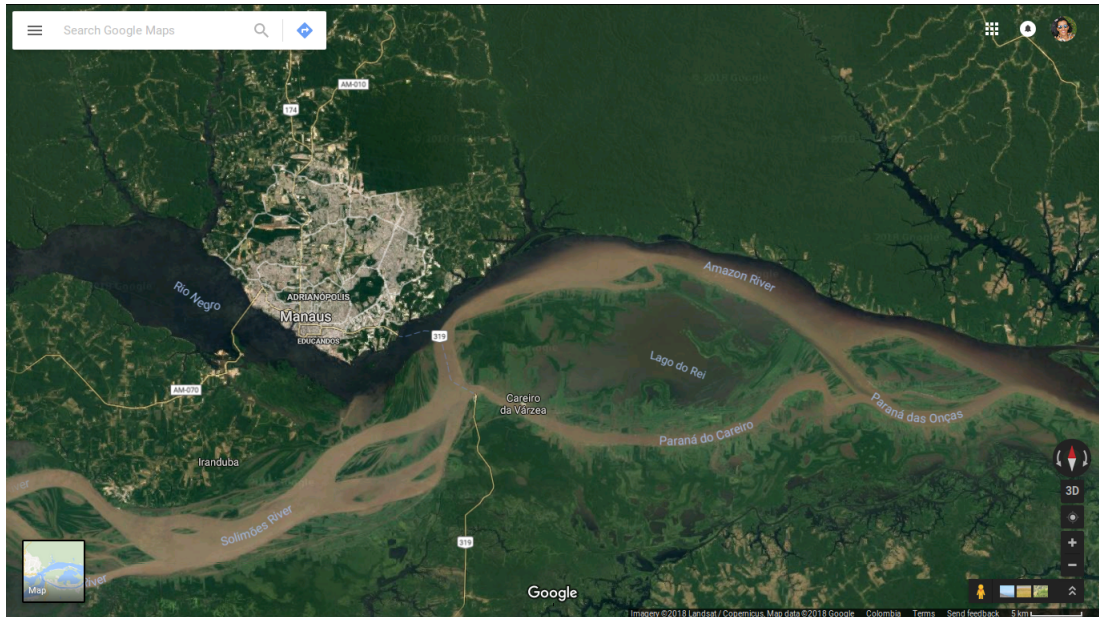
# 1. Justificación

A continuación se presentan casos de estudio reales, los cuales pueden estudiarse con las teorías planteadas en el presente proyecto, estos casos sirven como ejemplo del amplio campo que abarca el mezclado de fluidos y sus posibles usos en el mundo real.

## 1.1. Encuentro de las aguas

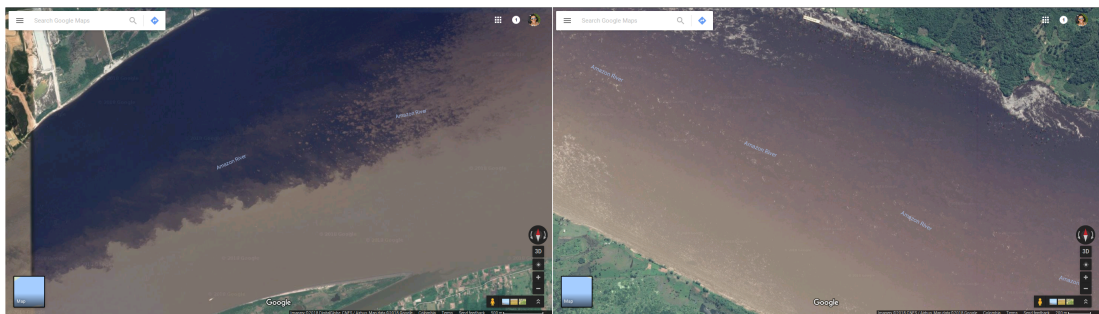
En la ciudad de Manaus, Estado de Amazonas, Brasil, se presenta una convergencia de dos ríos importantes para Brasil, el río Negro (de coloración negra) y el río Amazonas (de coloración arcillosa). En la concurrencia de estos dos ríos, se visualiza un espectáculo llamativo, los dos ríos no se mezclan inmediatamente, al contrario la combinación de estos se da decenas de kilómetros después, diluyéndose uno (río Negro), dentro del otro (río Amazonas). Esta disolución es explicada por la difusividad, donde un fluido (soluto) de menor proporción se diluye en un fluido (disolvente) de mayor proporción, a cabo de un tiempo solo se vera una fase, de las dos fases iniciales, el tiempo necesario es dado por las propiedades químicas de los dos fluidos.

La mezcla de los ríos, es observada transversalmente a la orientación de flujo de estos, es allí donde se puede apreciar mejor la interacción de los dos fluidos, como se observa en la Figura 1.



**Figura 1.** A la izquierda, se observa el río Negro y el río Solimões separados, a la derecha cuando se juntan los dos ríos y forman el río Amazonas - Imagen obtenida de Google Maps.

El mezclado de los dos fluidos (dos ríos), no se da inmediatamente, en cambio se da en diferentes partes debido a que es un proceso que requiere de tiempo, es por ello que se observa en la Figura 2, la diferencia de color a distancias diferentes, más de 120 kilómetros aguas abajo, donde el río Negro esta oculto, dado que se diluyo en el río Amazonas.



**Figura 2.** A la izquierda, se observa los dos ríos imagen del río al inicio de la mezcla, imagen de la derecha la mezcla de fluidos aguas abajo - Imagen obtenida de Google Maps.

Así mismo este fenómeno también es observable en menor medida, cuando el río Sogamoso, se encuentra con el embalse Topocoro, a la altura del puente El Tablazo, las aguas del río, que arrastran sedimento, forman una pequeña capa sobre algunos kilómetros del embalse, mostrando una similitud al fenómeno anteriormente explicado.

## **1.2. Oleoductos**

Debido a la gran importancia de los combustibles fósiles del siglo 20 y posteriores, se ha creado una larga red de oleoductos para transportar derivados del petróleo, éstos han sido construidos en todo tipo de terrenos. En el caso de Colombia, donde su topografía es complicada, a adquirido gran importancia el estudio de los mismos. Tomando como ejemplo, se considera el oleoducto que bombea gasolina desde Barrancabermeja a 75 msnm. hasta Bucaramanga a 959 msnm., debido a la diferencia de altura se hace comprensible, que exista un cambio de terreno el cual induce un mezclado de IOs fluidos en el bombeo.

Dicho oleoducto suele inclinarse para adaptarse a los desniveles del terreno, como se observa en la Figura 3, donde las inclinaciones del terreno, delimitan la inclinación de la tubería, presentando una inclinación importante que induce una mezcla de los fluidos. Como se mencionará más adelante estas inclinaciones aumentan la velocidad del frente de velocidad de la mezcla de los fluidos, provocando un aumento en el mezclado de los mismos, esto resulta desastroso para la empresa operaria del oleoducto dado que presenta una pérdida de valor del producto debido a la contaminación de fluidos más baratos en los fluidos más costosos, como es el caso de mezcla de la gasolina corriente en la gasolina extra, provocando que esta última pierda parte de su valor comercial.



**Figura 3.** Oleoducto (gris claro) con inclinación considerable, vía Bucaramanga - Barrancabermeja, a la altura de Brisas de México, Coordenadas (7.144967, -73.272821) - Imagen de Google Street View.

## **2. Objetivo del Proyecto de Grado**

### **2.1. Objetivo General**

Contribuir a la misión de la Universidad Industrial de Santander mediante la generación de conocimiento a través de la simulación del mezclado de flujo multicomponente en un recinto cerrado.

### **2.2. Objetivos Específicos**

1. Resolver el problema planteado en 3D, mediante volúmenes finitos, utilizando OpenFOAM.
2. Desarrollar estudios paramétricos de las distintas orientaciones horizontales, inclinadas y verticales en una cavidad cubica.
3. Comprobar los resultados obtenidos por OpenFOAM frente a la literatura reseñada.

## 3. Corrientes generadas por gravedad

### 3.1. Introducción

Corrientes generadas por gravedad (*Gravity currents*) (CG) también conocidas como corrientes de densidad o flotabilidad (del inglés: *density currents or bouyancy currents*), son corrientes generadas debido al efecto producido por la fuerza gravitacional en una mezcla de dos o más fluidos de diferentes densidades. Estas corrientes pueden gestarse por la diferencia de densidad originada por la acumulación de un soluto, por la disimilitud de densidades de dos fluidos de naturalidad distinta o por la diferencia de temperaturas, en el presente trabajo se desprejará el tercer caso y se considera que no hay un cambio de temperatura, siendo esto un proceso adiabático, por lo cual se desestimará el intercambio de energía dado por la mezcla entre el soluto y el solvente.

Las corrientes generadas por gravedad son fenómenos comunes en la naturaleza y en la interacción de los seres vivos, lo que las hace de gran importancia para los diferentes asentamientos humanos, dado que muchos de ellos, son amenazados cada año por desastres naturales. Es por esto y para evitar víctimas fatales debido a desastres naturales, que la prevención y mitigación es vital, además se hace imprescindible un estudio profundo de los fenómenos físicos internos en estas adversidades para entender su generación, desarrollo y posible contención. Es con estudios pequeños de fenómenos que se pueden luego desarrollar estructuras más completas de los desastres naturales, así mismo se hace evidente que los estudios pequeños son semillas que germinan en proyectos más grandes, más completos y de mayor contribución a la ciencia, es así como las palabras de Sir. Issac Newton <sup>1</sup> cobran vida “*Si he logrado ver más lejos, ha sido porque he subido a hombros de*

---

<sup>1</sup>Recuperado en 2/12/2017 Disponible en [http://www.lainsignia.org/2005/abril/dial\\_006.htm](http://www.lainsignia.org/2005/abril/dial_006.htm)

*gigantes”.*

Las CG están presentes tanto en fenómenos destructivos: Erupciones volcánicas, avalanchas de nieve, tormenta de arena, dispersión de contaminantes, liberaciones de gases peligrosos, como en fenómenos no destructivos: desembocadura del río en el océano, o mezclado de combustibles en un oleoducto. Para citar un ejemplo de fenómenos destructivos se considera una tormenta de arena como se aprecia en la Figura 4, donde el aire frío (más denso) saturado de arena y polvo, desplaza el aire caliente (menos denso), provocando una CG, este tipo de fenómeno natural puede ser sumamente peligroso a altas velocidades.

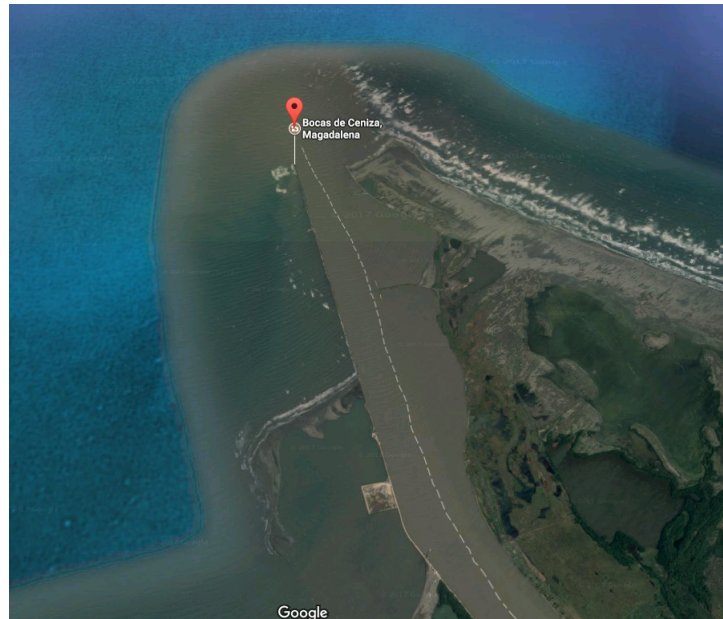


**Figura 4.** Una nube de tormenta de polvo masivo está cerca de envolver un campamento militar, Al Asad, Iraq, abril 27, 2005. DoD photo by Corporal Alicia M. Garcia, U.S. Marine Corps. - Fuente: [https://en.wikipedia.org/wiki/Dust\\_storm](https://en.wikipedia.org/wiki/Dust_storm)

Por otro lado, se tiene CG, menos destructivas como la desembocadura del río Magdalena en el mar Caribe como se observa en la Figura 5, allí se visualiza la mezcla del río Magdalena (agua dulce con sedimentos) y el mar Caribe (agua salada), estos fluidos al ser miscibles se mezclan y difuminan, como se aprecia en la Figura 6, allí se observa como el agua de río (soluto) se difumina en el agua de mar (solvente), produciendo una opacidad en el agua de las playas circundantes.



**Figura 5.** Delta del río Magdalena - De Alexrk2 - Source for this data set was the Global Land Cover Facility, Dominio público- Fuente: [https://es.wikipedia.org/wiki/Rio\\_Magdalena](https://es.wikipedia.org/wiki/Rio_Magdalena)



**Figura 6.** Difusión entre el agua dulce y agua salada- Boca de Ceniza, Colombia - imagen obtenida de Google Maps.

La importancia del estudio de las CG radica en describir apropiadamente los fenómenos que las componen, con el fin de definir apropiadamente sucesos más grandes para traer a colación; una comprensión a fondo de las CG ayudaría a poder describir los desastres naturales y aportar soluciones a su mitigación y prevención, con ello prevenir desastres como lo vivido en Armero en 1985, donde la erupción del volcán Nevado del Ruiz, derritió la nieve y produjo una corriente de lodo y rocas, que cobró la vida de más de 20000 personas.

Estos son algunos de los ejemplos que se citan para traer al debate el estudio de las corrientes generadas por gravedad, sin embargo su uso puede ser aún mayor, dependiendo del enfoque planteado por el investigador en el futuro. Tal es el caso de medir la altura de deslizamiento de agua y sedimentos que se podría realizar para ayudar a mitigar los deslizamientos de tierra y lodo que se da en la vía de Bucaramanga - San Vicente de Chucurí, la cual en cada temporada invernal se ve afectada por deslizamientos y con ello evitar afectaciones a las poblaciones.

### 3.2. Descripción del fenómeno

“El flujo de la corriente generadas por gravedad es dirigido por una diferencia de densidad, que resulta en una diferencia de presión en el plano horizontal. Esta diferencia de presión es balanceada por el campo de velocidad dinámica en dirección horizontal”<sup>2</sup>.

El efecto gravitacional asociado a la diferencia de densidad está dado por la reducción de velocidad que es función de la gravedad reducida ( $g'$ ).

$$g' = \left(\frac{\rho_c - \rho_a}{\rho_c}\right)g = \epsilon g \quad (1)$$

Donde  $\rho_a$  es la densidad del fluido ambiente,  $\rho_c$  la densidad del fluido de la corriente (más denso) y  $\epsilon$  es la diferencia de densidad relativa. Esta reducción de gravedad ( $g'$ ) es esencial para hallar la velocidad, la cual es necesaria para hallar la caracterización del flujo.

El número de Froude ( $Fr$ ) relaciona el efecto de las fuerzas de inercia y las fuerzas de gravedad que actúan en un fluido.

$$Fr_{LE} = \frac{u_{LE}}{(g'h_{LE})^{1/2}} \quad (2)$$

Donde  $h_{LE}$  y  $u_{LE}$  son la altura y velocidad del frente respectivamente. El número de Froude ( $Fr$ ) es cercano a 1, cuando  $\phi = h_0/H = 1$  donde  $h_0$  es la profundidad del fluido pesado en el instante inicial,  $H$  la altura del fluido ambiente, en los

---

<sup>2</sup>HATCHER, T. “A Finite Volume Implementation of the Shallow Water Equations for Boussinesq Gravity Currents”. Tesis de maestría. Auburn University, 2012, pág. 114.

casos en que GC sea profundo. Sin embargo Huppert & Simpson<sup>3</sup> encontraron experimentalmente un valor para Froude según  $\phi$ , sin embargo en este trabajo se tomo  $\phi = 1$ .

Aunque en este trabajo se desprecia el efecto de las fuerzas viscosas entre los dos fluidos, es clave mencionar su importancia para  $Re < 10$ , pero dado que aquí se encuentra  $Re > 1000$  se desestima este efecto. Para encontrar este número de Reynolds es necesario enunciar la velocidad ( $U$ ) a partir de la relación encontrada ampliamente en la literatura<sup>4</sup>.

$$U = \sqrt{g'h_0} \quad (3)$$

A partir de esta velocidad se halla el número de Reynolds de la siguiente forma y contrastado en la literatura<sup>5</sup>, donde  $\nu$  representa la viscosidad cinemática.

$$Re = \frac{Uh_0}{\nu} \quad (4)$$

---

<sup>3</sup>HUPPERT, Herbert E. y SIMPSON, John E. "The slumping of gravity currents". En: *Journal of Fluid Mechanics* 99.04 (1980), pág. 785. ISSN: 0022-1120. DOI: 10.1017/S0022112080000894. URL: [http://www.journals.cambridge.org/abstract{\\\_}S0022112080000894](http://www.journals.cambridge.org/abstract{\_}S0022112080000894).

<sup>4</sup>HÄRTEL, Carlos, MEIBURG, Eckart y NECKER, F. "Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. Part 1. Flow topology and front speed for slip and no-slip boundaries". En: 418 (2000), págs. 189-212; BIRMAN, V. K., MARTIN, J. E. y MEIBURG, E. "The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 2. High-resolution simulations". En: *Journal of Fluid Mechanics* 537.-1 (2005), pág. 125. ISSN: 0022-1120. DOI: 10.1017/S0022112005005033. URL: [http://www.journals.cambridge.org/abstract{\\\_}S0022112005005033](http://www.journals.cambridge.org/abstract{\_}S0022112005005033).

<sup>5</sup>HATCHER, "A Finite Volume Implementation of the Shallow Water Equations for Boussinesq Gravity Currents"; BIRMAN, MARTIN y MEIBURG, "The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 2. High-resolution simulations".

### 3.3. Modelamiento Matemático

Para el desarrollo de la simulación mediante CFD se hace necesario conocer y determinar las ecuaciones diferenciales que lo rigen. Para el fenómeno de CG, las ecuaciones que le gobiernan son planteadas desde la mecánica de fluidos. En la literatura consultada se observa que los diferentes autores hacen referencia principalmente a tres ecuaciones: Conservación de la masa, Conservación de la cantidad del momento y Conservación de las especies químicas.

Los diferentes autores consultados describen las ecuaciones para este fenómeno de corrientes generadas por gravedad dependiendo de lo que ellos consideran más importante para la simulación, es por ello que se encuentran discrepancias en las ecuaciones planteadas.

En la tesis de maestría de Flórez<sup>6</sup>, se propone el siguiente esquema.

Conservación de la masa

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0$$

Conservación de cantidad de movimiento

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}\vec{V}) = -\frac{\nabla(\bar{p})}{\rho} + \nu \nabla^2 \vec{V} + \vec{g} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tau^R$$

Conservación de las especies químicas

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla \rho_A) = (\nabla \cdot \rho D_{AB} \nabla \alpha_A)$$

---

<sup>6</sup>FLÓREZ, C. "Determinación del campo de flujo y de concentraciones de la interfase de dos fluidos incompresibles que se desplazan a través de una tubería usando el método de volúmenes finitos". Tesis de maestría. Universidad Industrial de Santander, 2015, pág. 156.

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u_1 h_1) &= 0 & \frac{\partial h_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u_2 h_2) &= 0 \\ \frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} &= -\frac{1}{\rho_1} \frac{\partial p_0}{\partial x} - g \frac{\partial h_1}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial t} + u_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} &= -\frac{1}{\rho_2} \frac{\partial p_0}{\partial x} - g \frac{\partial h_1}{\partial x} \end{aligned}$$

Donde  $V$  representa velocidad media del flujo,  $\nu$  la viscosidad cinemática,  $\rho$  la densidad,  $D$  el coeficiente de difusión,  $\alpha$  concentración del líquido,  $g$  gravedad y  $\tau^R$  el tensor de esfuerzos de Reynolds.

En el trabajo realizado por Florez se tuvo en cuenta los efectos turbulentos; en el presente estudio no se mencionan debido a que no conciernen a la investigación.

En un estudio realizado por Hatcher<sup>7</sup>, presenta un modelo diferente basándose en el estudio de Rottman y Simpson<sup>8</sup>, el cual toma un modelo de dos capas en donde se toma a consideración un conjunto de ecuaciones diferenciales:

Aquí se observa una relación muy básica entre los dos fluidos. En el artículo el autor desarrolla estas ecuaciones mediante la aproximación de Boussinesq, además de tener en cuenta una serie de números adimensionales tales como el número de Froude que relaciona el efecto de las fuerzas de inercia con las fuerzas de gravedad sobre un fluido y número de Reynolds para caracterizar el movimiento de un fluido. La importancia en este artículo para la investigación radica en que se realizaron simulaciones mediante el método de volúmenes finitos que sirve como marco de referencia. También se realizó un desarrollo matemático de gran importancia el cual debido a su extensión no se plasmó aquí.

<sup>7</sup>HATCHER, T. y VASCONCELOS, J. "Finite-Volume and Shock-Capturing Shallow Water Equation Model to Simulate Boussinesq-Type Lock-Exchange Flows". En: *Journal of Hydraulic Engineering* 139.12 (2013), págs. 1223-1233. ISSN: 0733-9429. DOI: 10.1061/(ASCE)HY.1943-7900.0000775.

<sup>8</sup>ROTTMAN, J W y SIMPSON, J E. "Gravity currents produced by instantaneous releases of a heavy fluid in a rectangular channel". En: *Journal of Fluid Mechanics* 135 (1983), págs. 95-110. ISSN: 00221120. DOI: 10.1017/S0022112083002979. URL: [http://www.journals.cambridge.org/abstract/{\\\_}S0022112083002979](http://www.journals.cambridge.org/abstract/{\_}S0022112083002979).

Un tercer enfoque es dado por Birman<sup>9</sup>, el cual toma un conjunto de tres ecuaciones gobernantes en su artículo, luego las discretiza utilizando una combinación de métodos espectrales y diferencias finitas, a continuación se muestran las ecuaciones, las cuales no utilizan la aproximación de Boussinesq, ya que ese fue el propósito de dicho artículo.

$$\nabla \cdot u = 0$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{1}{1-\gamma} \rho e_g - \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\rho S)$$

$$\frac{Du}{Dt} = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \rho$$

---

<sup>9</sup>BIRMAN, MARTIN y MEIBURG, “The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 2. High-resolution simulations”.

Donde  $D/Dt$  denota la derivada material,  $S$  la razón del tensor esfuerzo,  $\gamma = \rho_2 - \rho_1$  la razón de densidad donde 1 es más pesado que 2,  $Re$  el número de Reynolds y  $Pe$  el número de Péclet.

Finalmente se utilizó en este proyecto las ecuaciones planteadas en OpenFOAM<sup>10</sup>, y expresadas en su solver *twoLiquidMixingFOAM*:

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \alpha_1) - \nabla \cdot \left( \left( D + \frac{1}{Sc} D_t \right) \nabla \alpha_1 \right) = 0 \quad (6)$$

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$$

Donde  $D$  representa la difusión molecular,  $D_t$  la difusión molecular debido a la turbulencia y  $Sc$  el número de Schmidt.

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = -\nabla(P_{rgh}) - gh \nabla p + \nabla \cdot (\rho \tau) \quad (7)$$

Donde:

$$\tau = -\frac{2}{3} \mu_{efectiva} \nabla \cdot U I + \mu_{efectiva} \nabla U + \mu_{efectiva} (\nabla U)^T$$

$$\mu_{efectiva} = \alpha_1 (\mu_{efectiva})_1 + \alpha_2 ((\mu_{efectiva}))_2$$

$$P = P_{rgh} + \rho gh$$

---

<sup>10</sup>PAL, Soureshh. *Multi phase Solvers of OpenFOAM with governing equations*. URL: <https://www.scribd.com/document/273550286/Multi-phase-Solvers-of-OpenFOAM-with-governing-equations> (visitado 23-07-2017).

Para el presente trabajo se utilizaron estas últimas ecuaciones, las condiciones de frontera en las paredes todas las cavidades simuladas se tomaron como deslizamiento.

## 4. Marco Teórico

En el presente capítulo se expone un resumen de las teorías pertinentes para el desarrollo del proyecto, en ellas se observa una relación clave de la densidad y el movimiento de los líquidos, de gran importancia para el discernimiento del fenómeno. Además se plantean fenómenos observados en las simulaciones realizadas y descritos en la literatura; así mismo inestabilidades que se generan debido a las diferentes orientaciones de la cavidad.

### Efecto Boycott

A.E. Boycott en 1920, describió inicialmente este efecto como: “Si colocamos sangre oxalada o desfribinada en tubos estrechos, el sedimento de los corpúsculos bajará mucho más rápido en tubos inclinados que en los verticales”<sup>1</sup> .

El efecto Boycott sirve para describir las diferentes velocidades que se generan en los líquidos, debido a la orientación de la cavidad. T. Séon<sup>2</sup> describe la observación de este fenómeno en sus estudios: “Una de las características interesantes que observamos es el aumento de la velocidad examinada a menudo en frentes de desplazamiento cuando la inclinación de los tubos con respecto a la vertical aumenta. Esto sugiere una analogía con la aceleración de la sedimentación de partículas cuando el tubo está inclinado del mismo (efecto Boycott)”.

---

<sup>1</sup>BOYCOTT, A. E. *Sedimentation of Blood Corpuscles*. 1920. DOI: 10.1038/104532b0. URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/104532b0>.

<sup>2</sup>SÉON, Thomas. “Du mélange turbulent aux courants de gravité en géométrie confinée”. Tesis de doctorado. Université Pierre et Marie Curie, 2006, pág. 181.

Con esto se quiere dar a conocer que los fluidos dispuestos en recipientes inclinados tendrán una velocidad mayor de precipitación que si estuvieran en un recipiente dispuesto verticalmente.

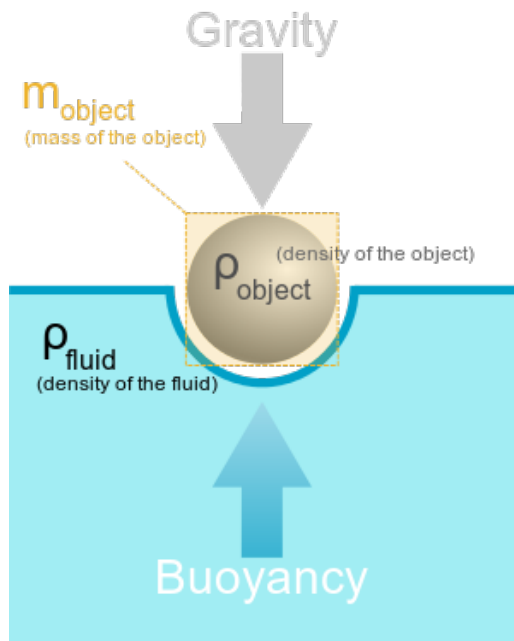
## **Fuerza de Flotabilidad**

“Un cuerpo en un fluido, ya sea que flote o esté sumergido, experimenta una fuerza hacia arriba igual al peso del fluido que desplaza”<sup>3</sup>. Es mediante esta fuerza, que la mezcla de dos líquidos se mueven debido a su diferencia de densidad, esto hace que los líquidos más pesados descendan al fondo del recipiente y lo más ligeros suban.

Tal como se aprecia en la Figura 7, la esfera en caso de ser más densa que el líquido va a descender aunque está sienta una fuerza de empuje hacia arriba (“Bouyancy”), de ser más ligera que el líquido, la esfera flotaría.

---

<sup>3</sup>MOTT, R. *Mecánica de fluidos*. Vol. Sexta. 2006.



**Figura 7.** Las fuerzas que actúan en la flotación<sup>4</sup>.

## Número de Atwood

El número de Atwood ( $At$ ) es un número adimensional usado en el estudio de las inestabilidades hidrodinámicas en flujos de densidad estratificada; en él se muestra una razón de densidades:

$$At = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1 + \rho_2} \quad (1)$$

“Donde  $\rho_1$  es la densidad del fluido más pesado y  $\rho_2$  es la densidad del fluido más ligero. Este número toma valores entre 0 y 1. Cuando es 0 no hay diferencia entre la densidad de los fluidos, y 1 cuando el fluido más ligero es el vacío”<sup>5</sup>. Este número se utilizará después para caracterizar la diferencias de densidades entre los líquidos.

<sup>5</sup>WIKIPEDIA. *Atwood Number*. 2017. URL: <https://en.wikipedia.org/wiki/Buoyancy>.

## **Coeficiente de Difusión**

“El coeficiente de difusión es un valor que representa la facilidad con que cada soluto en particular se mueve en un disolvente determinado”<sup>6</sup>. La facilidad de disolver el soluto afecta el estado de mezcla, por lo tanto el coeficiente de difusión es dependiente de los siguientes factores.

- Temperatura
- Viscosidad del solvente
- Tamaño y forma del soluto
- Naturaleza del soluto y el solvente

## **Inestabilidad Kelvin - Helmholtz**

La inestabilidad ocurre cuando hay una diferencia de velocidad en los fluidos involucrados en una interfaz de mezcla, esto provoca que el fluido con la mayor velocidad gire sobre el otro (con menor velocidad) dando como resultado los vórtices como se observa en la Figura 8.

---

<sup>6</sup>DE LA LANZA, G. *Diccionario de hidrología y ciencias afines*. 1999.



**Figura 8.** Ejemplo del fenómeno en nubes en Sagunto, Valencia, España. Fotografía Minerva Gracia García - Pinterest: <https://co.pinterest.com/pin/198228821070589484/>.

### **Inestabilidad Rayleigh - Taylor**

La inestabilidad de Rayleigh - Taylor, ocurre cuando un fluido pesado empuja uno más ligero, usualmente en una cavidad donde el fluido pesado esta sobre el ligero esto provoca que el fluido pesado entre al campo del ligero a baja velocidad causando una figura en una forma parecida a unos dedos como se aprecia en la Figura 9, es por esto que algunos autores hacen referencia a dedos, cuando se habla de ella.



**Figura 9.** Inestabilidad Rayleigh-Taylor presentada por fluidos de diferentes densidades, en azul fluido más pesado - Youtube: <https://youtu.be/yabqo7VFTYs>.

## Número de Schmidt

“El número de Schmidt ( $S_c$ ), es un número adimensional definido como el cociente entre la difusión viscosa y la difusión másica, es de gran importancia en procesos de transferencia de masa”<sup>7</sup>.

$$S_c = \frac{\nu}{D} \quad (2)$$

Donde  $\nu$  es la viscosidad cinemática ( $m^2/s$ ) y  $D$  es la difusión másica ( $m^2/s$ ). El número de Schmidt también puede usarse como el coeficiente de difusividad hidráulica sobre el coeficiente de difusión.

---

<sup>7</sup>WIKIPEDIA. *Número de Schmidt*. 2017. URL: [https://es.wikipedia.org/wiki/N%C3%BAmero\\_de\\_Schmidt](https://es.wikipedia.org/wiki/N%C3%BAmero_de_Schmidt).

## Aproximación de Boussinesq

Esta aproximación es utilizada en el campo de flujo impulsado por flotabilidad, se desprecia la diferencia de densidad excepto en los términos en los que son multiplicados por la gravedad. Su esencia radica en que la diferencia de inercia es despreciable pero la gravedad es suficientemente fuerte para hacer que el peso específico sea apreciable entre los dos fluidos. Esta aproximación es muy precisa para muchos flujos y ayuda a que la física y matemática sea más simple, también puede usarse si las variaciones de densidad son pequeñas, para cambios grandes no es recomendable utilizarla<sup>8</sup>.

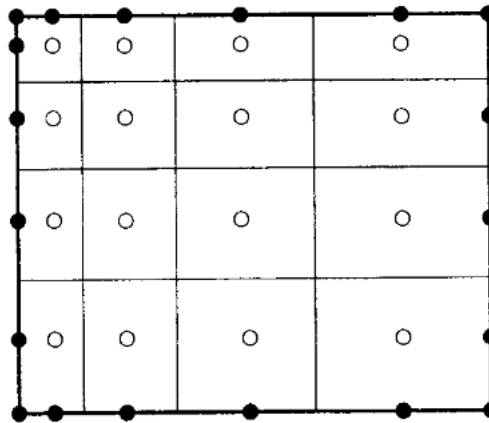
## Métodos de Volúmenes Finitos

Este método de volúmenes finitos (VF), usa la forma integral de la ecuación de conservación como punto inicial. El dominio solución es subdividido en un número finito de pequeños volúmenes de control (VC) en un malla, para dar una explicación más cómoda se toma una malla estructurada cartesiana. Una aproximación común es definir el VC mediante una malla apropiada y asignando el nodo computacional al centro del VC, como se percibe en la Figura 10. Una ventaja de utilizar este método recae en que el valor nodal representa la media sobre el VC<sup>9</sup>.

---

<sup>8</sup>BIRMAN, MARTIN y MEIBURG, "The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 2. High-resolution simulations".

<sup>9</sup>FERZIGER, J H y PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics* - J. 2002.



**Figura 10.** Nodos centrados en volumen de control<sup>10</sup>.

Cabe resaltar que existen otros métodos de VF, variaciones especializadas como celda-vértice esquema, esquema de doble malla entre otros. En el presente trabajo solo se tomará en cuenta el primer método.

Como escribe Ferziger<sup>11</sup>, la ecuación de conservación es aplicada a cada uno de los VC, como también a todo el dominio solución. Si se sumara la ecuación para todos los VC, se obtendría la ecuación de conservación, ya que las integrales de superficie de las caras del VC se cancelan, esto representa una de las principales ventajas del método.

Otro aspecto a tener en consideración es que este método es ampliamente utilizado en la mecánica de fluidos debido a su amplia difusión en el medio, sus paradigmas matemáticos y de programación son más asertivos que otros métodos y claro por su utilización en software de renombre como Ansys Fluent, Ansys CFX y OpenFOAM, ayuda a su mayor difusión.

---

<sup>11</sup>FERZIGER y PERIC, *Computational Methods for Fluid Dynamics* - J.

## 5. Metodología

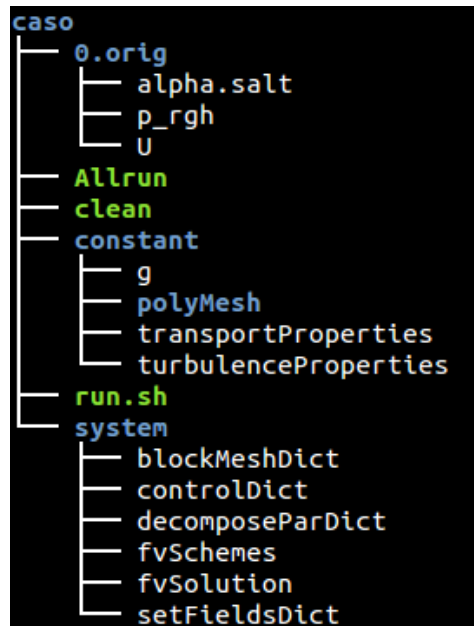
### 5.1. OpenFOAM

Es un software desarrollado en C++ que cuenta con una serie de herramientas muy diversas que permiten realizar estudios y simulaciones de diferentes áreas entre ellas el CFD. Este software es Open Source con licencia GPLv3, su ejecución se realiza desde terminal mediante *scripts*, gracias a su uso extendido se puede realizar simulaciones en paralelo y también con malla dinámica.

El desarrollo de los casos se define en tres fases:

#### **Pre-procesamiento**

En este paso se definen las propiedades de la mezcla, las condiciones de frontera en el inicio de la simulación, la malla a utilizar, la discretización utilizada y la forma que se divide el caso para su solución en paralelo. Como se observa en la Figura **11**, se tiene una estructura predeterminada para el repertorio del caso, en la cual las propiedades del fluido se guardan en la carpeta **constant**, las directrices (como se resuelve el caso) se guardan en la carpeta *system* y las condiciones iniciales de frontera se guardan en la carpeta *0.orig*.



**Figura 11.** Archivos que componen un caso típico de OpenFoam.

### **Procesamiento**

En esta parte se da solución al caso, esta puede ser en serial o en paralelo mediante OpenMPI; para cada problema físico existe un solver enfocado en el fenómeno a simular. En el Anexo **A** se muestra el código para correr el trabajo en paralelo y en el Anexo **B** se muestra el código del caso.

### **Post-procesamiento**

Después de la solución del problema se procede a visualizar y procesar los datos obtenidos, para esto se utiliza ParaView en el se puede visualizar el fenómeno a través del tiempo, exportar a vídeo y exportar los datos de la simulación.

## **5.2. Desarrollo de la Simulación**

Debido a que la simulación en 3D, requiere bastante potencia de cómputo, se utilizó Guane, el supercomputador de la Universidad Industrial de Santander con

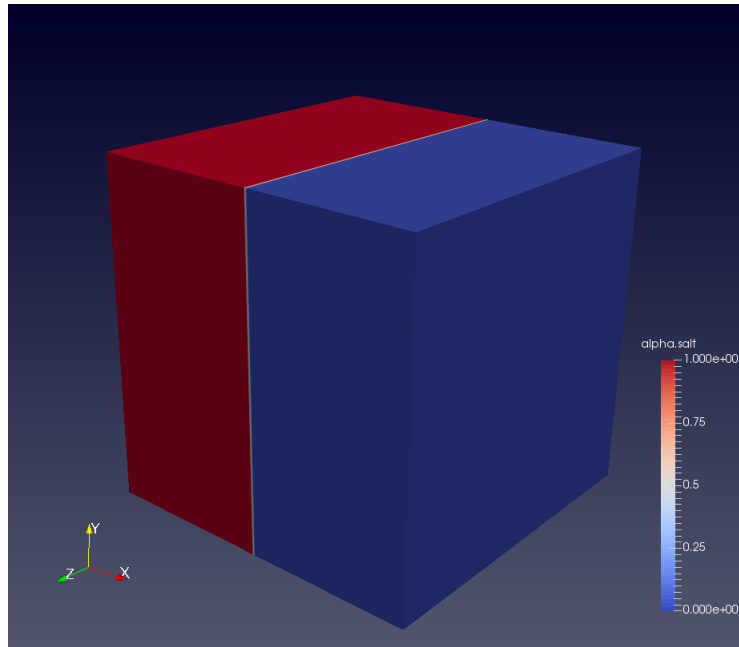
ayuda del equipo técnico de Supercomputación y cálculo científico (SC3). Posterior a ello se descargó en un computador personal con interfaz gráfica, en la cual se realizó el post-procesamiento; es conveniente decir que este computador debe poseer gran espacio para almacenar los datos, así como una amplia memoria ram. En los anexos se puede observar el código estándar implementado para la solución.

### **Pre-procesamiento**

En las pruebas preliminares se tuvo en cuentas las consideraciones de frontera descritas en los diversos artículos<sup>1</sup>, en estas condiciones de frontera se consideraron: paredes con condición de deslizamiento (*slip*), una pequeña diferencia de densidades entre los dos fluidos, en cuanto a las características geométricas se optó por una cavidad cuadrada de dimensiones 1mx1mx1m, con un fluido al lado del otro como se observa en la Figura **12**, donde el fluido rojo representa el fluido más denso y el fluido azul el menos denso.

---

<sup>1</sup>BIRMAN, MARTIN y MEIBURG, “The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 2. High-resolution simulations”; LOWE, RYAN J., ROTTMAN, JAMES W. y LINDEN, P. F. “The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 1. Theory and experiments”. En: *Journal of Fluid Mechanics* 537.-1 (2005), pág. 101. ISSN: 0022-1120. DOI: 10.1017/S0022112005005069. URL: [http://www.journals.cambridge.org/abstract/{\\\_}S0022112005005069](http://www.journals.cambridge.org/abstract/{\_}S0022112005005069).



**Figura 12.** Ubicación de los fluidos en el instante inicial.

### **Procesamiento**

Se ejecutó la aplicación *blockMesh* para generar el mallado y *setFields* para ubicar los fluidos. Los diferentes casos se resolvieron con procesamiento paralelo. Se dividió el caso mediante la aplicación *decomposePar*, en subdominios de malla y se resolvió utilizando el *solver: twoLiquidMixingFOAM* en paralelo, posteriormente se ensambló con *reconstructPar*. El código de la simulación puede consultarse en el Anexo **B**.

*twoLiquidMixingFOAM* un software desarrollado para el mezclado de 2 fluidos incompresibles miscibles. Este utiliza el método de volúmenes finitos para discretizar las ecuaciones diferenciales que atañen el caso, además puede ejecutarse en paralelo.

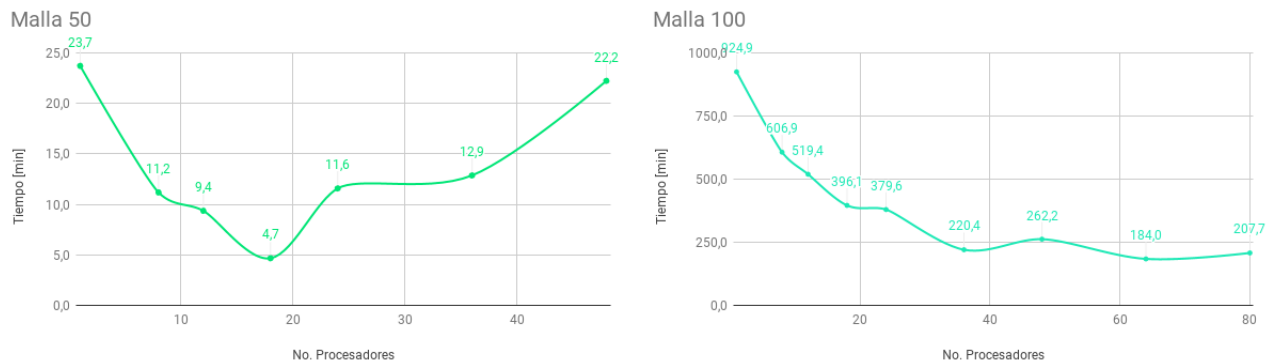
### **Post-procesamiento**

Tecleando *paraFoam* en una terminal, abre *ParaView* para la visualización, en este

software se puede capturar un vídeo de como sucedió el comportamiento de los fluidos o exportar datos de la simulación, entre otras aplicaciones.

### 5.3. Determinación Número de Procesadores

El método para determinar la cantidad óptima de procesadores consistió en simular el mismo ejercicio en 3D variando el número de procesadores, luego se realizó el mismo procedimiento para una malla más grande. La ejecución en serie se tomó como un solo procesador. Es clave decir que para los tres ejes coordenados se utilizó el mismo número ejemplo: malla 50, entonces  $x=50$ ,  $y=50$ ,  $z=50$  ( $50 \times 50 \times 50$ ).



**Figura 13.** Gráfica tiempo utilizado para el procesamiento en paralelo - A la izquierda, gráfica para una malla de 50, a la derecha, para una malla 100.

Como se aprecia en la Figura 13, se llega a un punto de tiempo mínimo y luego vuelve a crecer, esto debido a que cuando el problema se divide en más partes, los procesadores tomarán más tiempo en comunicarse entre ellos, provocando que el tiempo de computo sea mayor, así mismo el tiempo de reconstrucción aumenta considerablemente. Es clave mencionar que la reducción de tiempo gracias a la

paralelización fue de 80,17 % y 80,11 % para la malla 50 y malla 100 respectivamente.

#### 5.4. Determinación de la Malla

OpenFoam ejecuta la malla basándose en los parámetros estipulados en *blockMeshDict*, el usuario define la cantidad de elementos en que se desea dividir el problema, en cada eje coordenado  $(x,y,z)$ . Para determinar el tamaño de la malla a emplear se realizó una serie de simulaciones, con distintas mallas desde 50 hasta 250, siendo 80 el número máximo de procesadores que se pueden utilizar, dada la configuración del hardware en Guane.

Las simulaciones se realizaron en paralelo según la cantidad de procesadores óptima para cada malla, eso quiere decir que para la malla 50 (menos fina), utilizó un número de procesadores menor que para la malla de 250, como se muestra en la Tabla 1.

Malla	Procesadores
50	24
100	64
150	64
200	64
250	80

**Tabla 1.** Malla frente a No. procesadores

La cantidad óptima para las mallas tomó en consideración que Guane permite un uso máximo de 4 nodos en el que cada nodo tiene 24 procesadores, eso quiere decir que se puede utilizar un máximo de 96 procesadores y el número siguiente a 80 procesadores a utilizar es 100, dado que OpenFOAM utiliza librerías *scotch*,

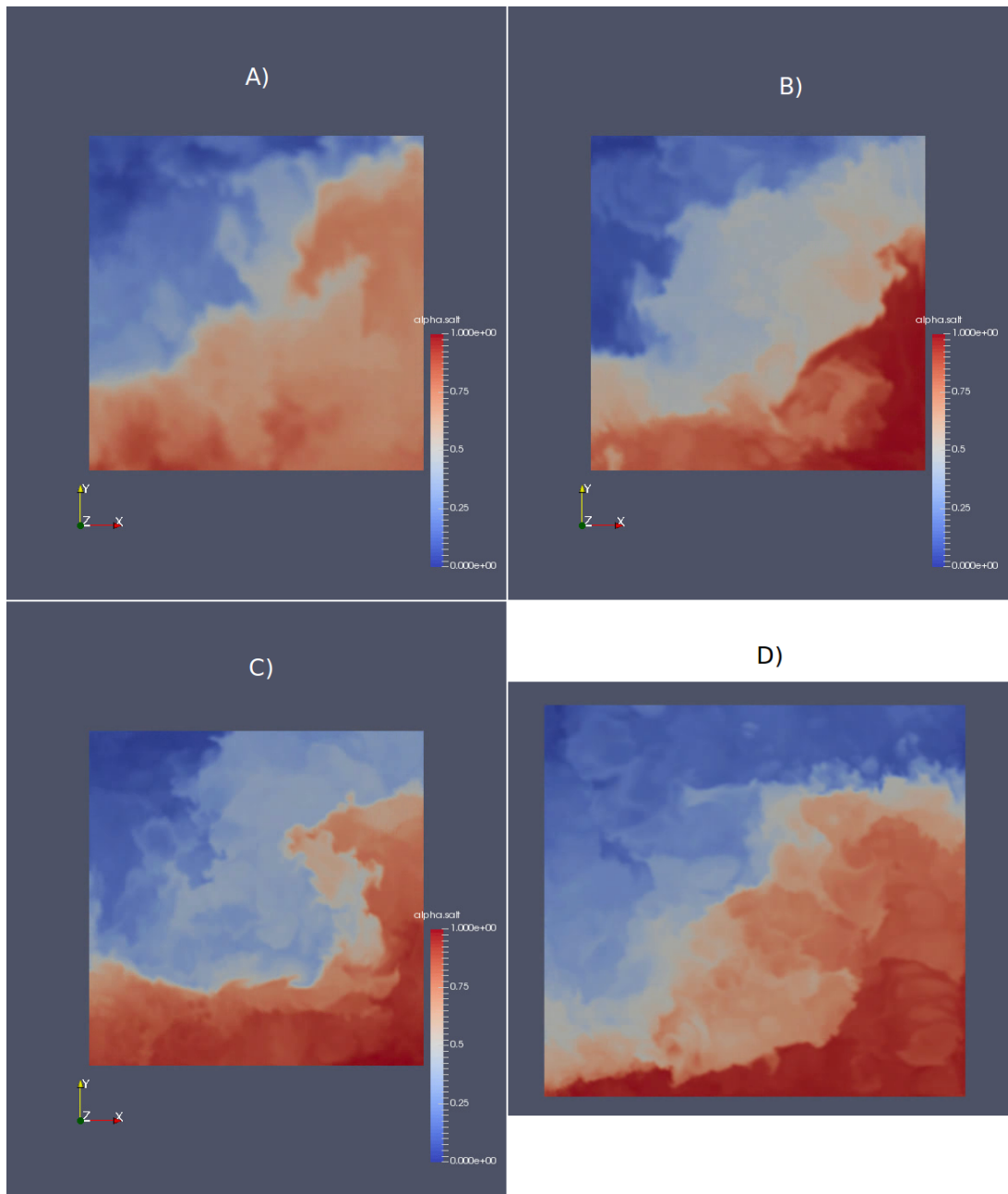
para dividir el problema y ejecutarlo en paralelo, estas librerías están ligadas a *decomposeParDict*, en el cual se define la cantidad como se aprecia en la Figura 14, allí se define la cantidad de subdominios en los que se va a dividir el problema en cada uno de los ejes (x,y,z) y el número total de subdominios (número de procesadores a utilizar) es la multiplicación de los 3 subdominios.

```
numberOfSubdomains 80;  
  
method            simple;  
  
simpleCoeffs  
{  
    n              (4 4 5);  
    delta          0.001;  
}
```

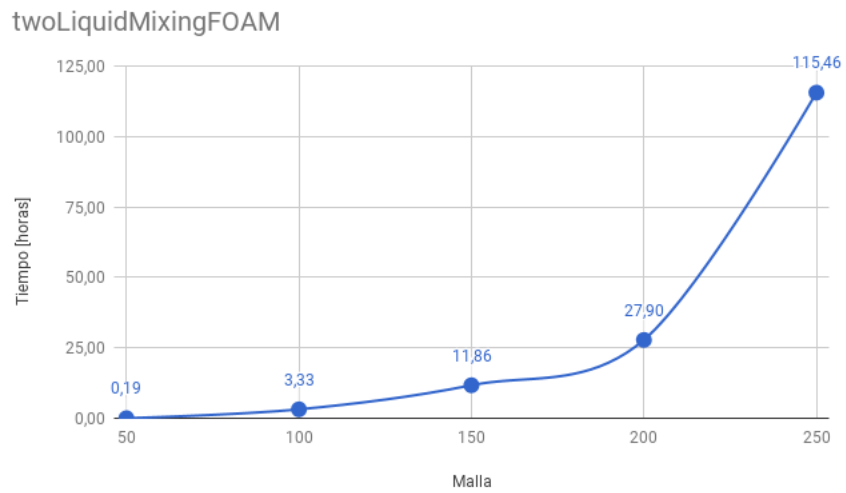
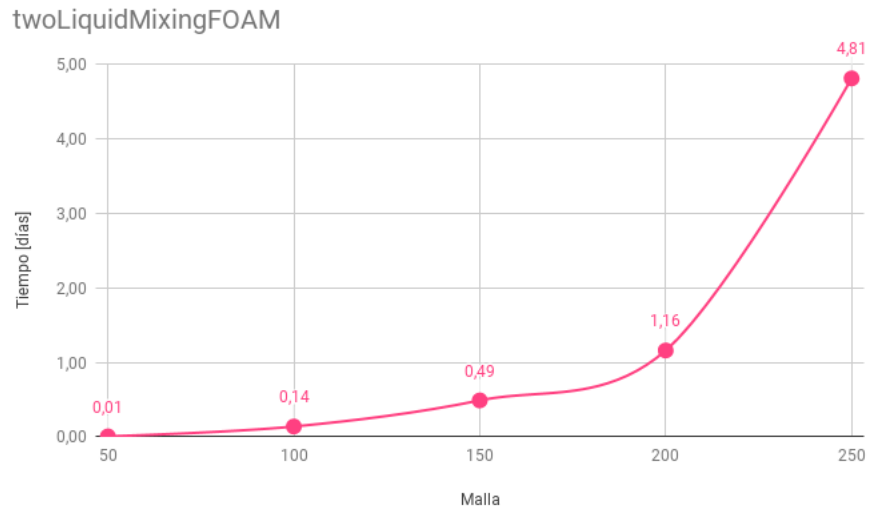
**Figura 14.** Forma típica de dividir el problema en paralelo.

Para determinar la independencia de malla se tomaron capturas de las diferentes mallas como se aprecia en la Figura 15, como se observa la malla menos gruesa (malla 100) posee menos detalle que la malla fina (malla 250), la diferencia radica en el nivel de detalle de la malla 150 y malla 200, allí la diferencia del fenómeno disminuye, sin embargo deben tenerse en cuenta otros aspectos que se muestran a continuación.

El tiempo de procesamiento del **solver** es un punto crítico, dado que aquí se realiza la solución de las ecuaciones. Basándonos en la Figura 16, se contempla un aumento exponencial del tiempo, al punto de demorar varios días la solución de un caso.

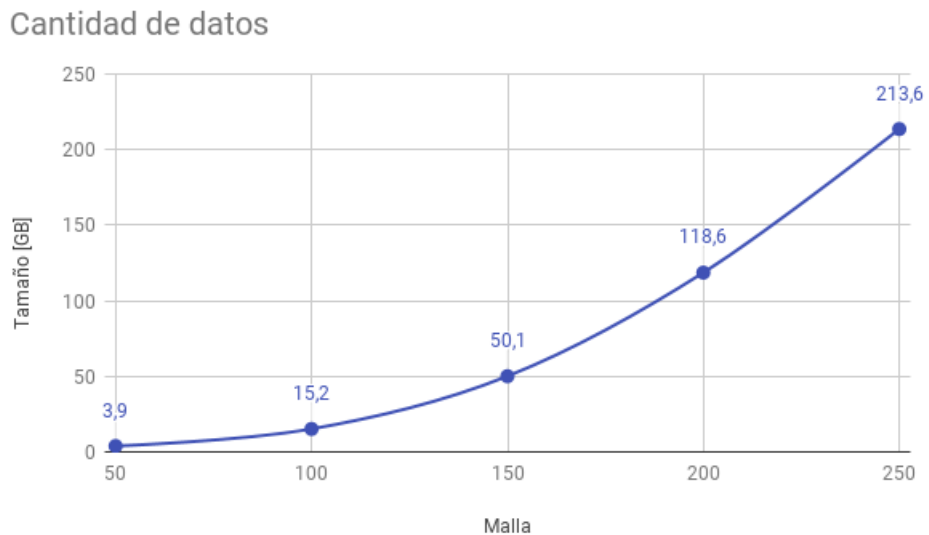


**Figura 15.** A. malla 100, B. malla 150, C. malla 200, D. malla 250.



**Figura 16.** Gráfico comparación tiempo de procesamiento y malla; arriba tiempo en días, abajo en horas.

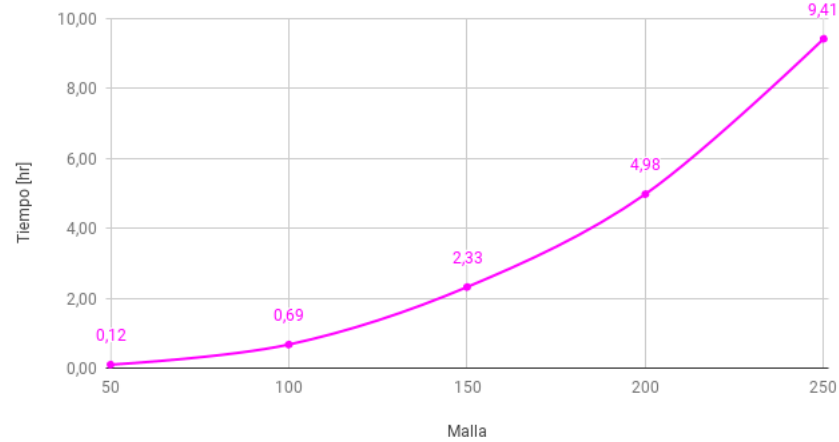
Otro factor importante a considerar es el tamaño del caso simulado, como se aprecia en la Figura 17, el espacio necesario para almacenar la simulación del caso, crece considerablemente, al utilizar la malla 200; el computador utilizado para el post-procesamiento requirió de toda la memoria RAM disponible para ello (16 Gb), en la malla 250 no fue posible utilizar *paraFoam* por que desbordaba la capacidad de memoria RAM disponible requirió utilizar la herramienta *foamToVTK* para convertir el caso a un formato más moderno; sin embargo esto provocó un aumento del tamaño del caso (500 GB), que volvió insostenible disponer de memoria de almacenamiento suficiente para las simulaciones siguientes.



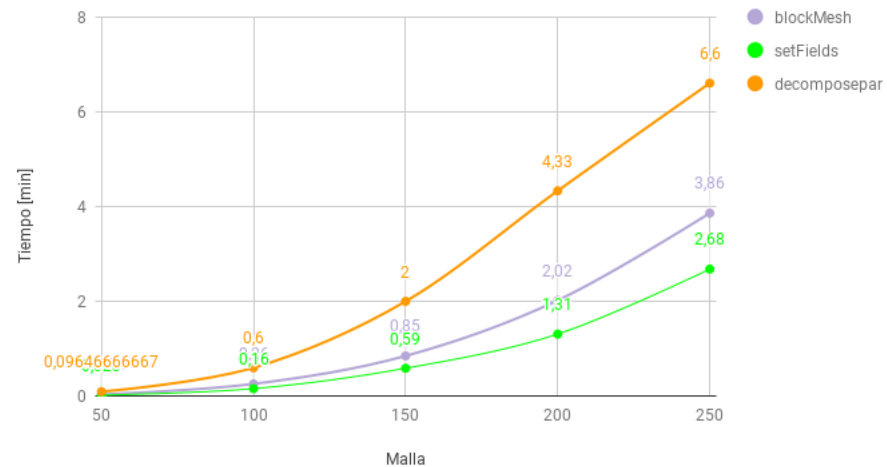
**Figura 17.** Gráfica tamaño de las simulaciones frente a la malla.

Un tiempo a considerar es el utilizado por *reconstructpar*, la herramienta que ayuda a reconstruir el caso después del cálculo en paralelo en la Figura 18, se puede ver como el tiempo crece exponencialmente hasta el punto de alcanzar más de 9 horas (malla 250) para reconstruir el caso, sin duda un tiempo a tener en consideración, así mismo en la figura se muestra el tiempo utilizado en aplicaciones complementarias que no tienen mayor relevancia para este caso.

reconstructPar



Aplicaciones



**Figura 18.** Arriba gráfica entre tiempo de reconstructPar y malla, abajo gráfica entre tiempo de las aplicaciones complementarias y malla.

Teniendo en consideración las opciones antes planteadas se decide tomar la malla 150, como la más conveniente para la simulación, debido a que esta muestra una buena representación de los fenómenos, bajo tiempo de computo, un tamaño de datos con el cual se puede trabajar fluidamente.

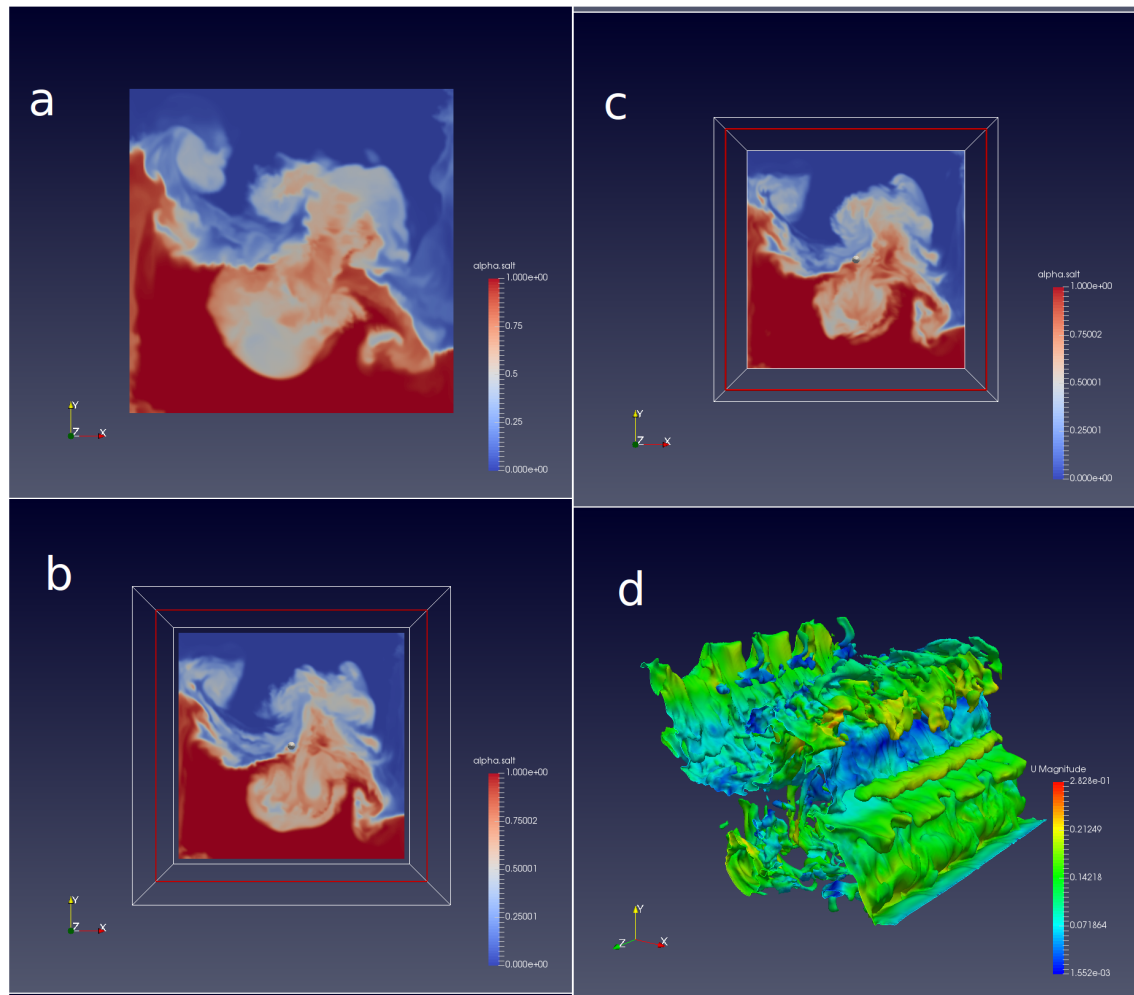
## 5.5. Simulación en 3D

OpenFOAM construye por defecto los casos geoméricamente en 3D, pero su solución puede acotarse en 2D utilizando 2 caras en *empty()* o utilizando todas las caras para simularlo en 3D. Como se observa en la Figura 19, hay 6 tipos de caras, pero la cara frontal y detrás (*frontBack*) están representadas por una sola, esto con el fin de poder simular en 2D de manera más fácil, para ello se utilizó *empty* o la condición de frontera que se desee para la simulación en 3D, ejemplo *zeroGradient* para *alpha.sludge*, *fixedFluxPressure* para *p-rgh* o *slip* para *U*.

```
boundaryField
{
    left
    {
        type            slip;
    }
    right
    {
        type            slip;
    }
    bottom
    {
        type            slip;
    }
    top
    {
        type            slip;
    }
    frontBack
    {
        type            slip;
    }
}
```

**Figura 19.** Fronteras en las condiciones iniciales del campo de velocidad.

Se realizó una simulación con malla 200x200x200, con un total de 8 millones de celdas, en ella se pudo observar que el fenómeno descrito no tiene una variación significativa en el eje Z, tal como se aprecia en la Figura 20.

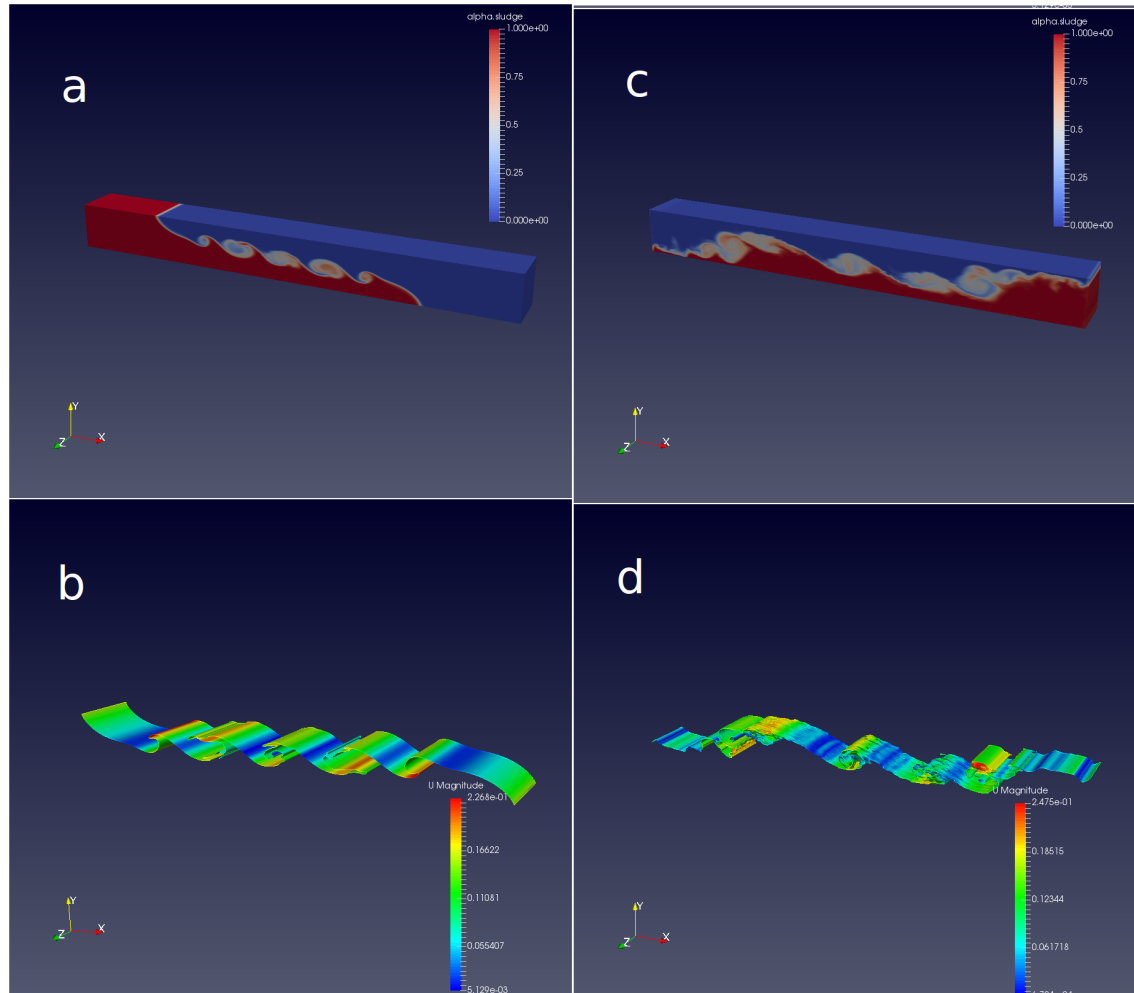


**Figura 20.** Simulación con  $At = 5 \times 10^{-3}$  a un tiempo de 20 segundos. a) Imagen sin recortar normal a z, b) Imagen recortada a 0.5 en z, c) Imagen recortada a 0.75 en z, d) isocontornos 0.5, con color para representar el campo de velocidad.

Para una cavidad más extensa los efectos son aún menos visibles, la Figura 21 representa una simulación de una cavidad con dimensiones 10x1x1 [m] y una malla de 300x150x150, allí se puede ver que en tiempos pequeños el isocontorno presenta pocas variaciones. Debido a esto se realizarán las simulaciones en 2D, ya que el gasto computacional es menor a las simulaciones en 3D, que tienen en cuenta el eje z. Los efectos en este eje (**Z**) no son significativos para el estudio, como lo menciona Hallez<sup>2</sup> llego a una conclusión similar al estudiar los efectos

<sup>2</sup>HALLEZ, Yannick y MAGNAUDET, Jacques. "Effects of channel geometry on buoyancy-driven

producidos por la geometría de la cavidad en mezcla de corrientes generadas por gravedad.



**Figura 21.** Simulación con  $\gamma = 0,99$  a) Imagen con tiempo de simulación de 20 segundos, b) isocontorno a 0.5 a 20 segundos, el ajuste de colores simboliza el campo de velocidad, c) Imagen de simulación a 50 segundos, d) isocontorno a 0.5 a 50 segundos, el ajuste de colores representa el campo de velocidad.

mixing". En: *Physics of Fluids* 20.5 (2008), págs. 1-10. ISSN: 10706631. DOI: 10.1063/1.2918379.

## 6. Comprobación Respecto a la Literatura

En el presente capítulo se comparan los resultados obtenidos de OpenFOAM y la literatura recopilada, esto con el fin de verificar las discretizaciones y esquemas presentados por OpenFOAM. Las simulaciones fueron realizadas como se describe en el capítulo de metodología.

Para la realización de las comprobaciones se asumieron ciertos fenómenos (descritos más adelante) teniendo en consideración varios artículos<sup>1</sup>, con el objetivo de poder acotar mejor el problema y complementar los datos necesarios para la simulación en OpenFOAM, dado que los artículos no poseen la totalidad de los datos.

Se toma el número de Schmidt<sup>2</sup>  $Sc = 1$ , para resolver solo los problemas relacionados con la mezcla de fluidos multicomponente a igual temperatura y diferentes densidades. En este caso las viscosidades dinámicas resultan ser iguales<sup>3</sup>. Otra asunción importante es desprestigiar los efectos causados por la diferencias de viscosidades en los fluidos. Finalmente, se desprestigiaron los efectos causados por posibles reacciones químicas entre los fluidos.

---

<sup>1</sup>BIRMAN, MARTIN y MEIBURG, “The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 2. High-resolution simulations”; HÄRTEL, MEIBURG y NECKER, “Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. Part 1. Flow topology and front speed for slip and no-slip boundaries”; BIRMAN, V. K. y col. “Lock-exchange flows in sloping channels”. En: *Journal of Fluid Mechanics* 577 (2007), pág. 53. ISSN: 0022-1120. DOI: 10.1017/S002211200600437X.

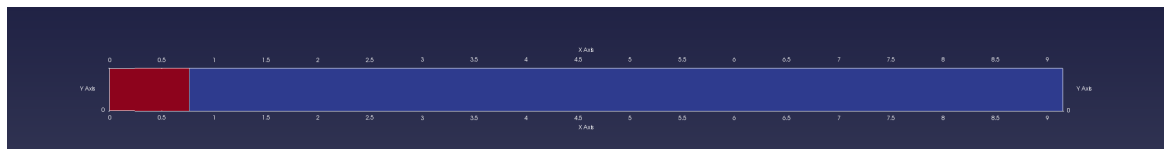
<sup>2</sup>HÄRTEL, MEIBURG y NECKER, “Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. Part 1. Flow topology and front speed for slip and no-slip boundaries”.

<sup>3</sup>BIRMAN, MARTIN y MEIBURG, “The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 2. High-resolution simulations”; SÉON, T. y col. “Buoyancy driven miscible front dynamics in tilted tubes”. En: *Physics of Fluids* 17.3 (2005), págs. 1-5. ISSN: 10706631. DOI: 10.1063/1.1863332.

## 6.1. Orientación Horizontal

Para contrastar este caso se utilizó el artículo escrito por Hatcher<sup>4</sup>, quien planteó una comparación entre los datos obtenidos de un experimento real realizado y una simulación mediante volúmenes finitos.

La simulación se realizó en dos dimensiones en una cavidad con una longitud de  $L = 9,14[m]$  y altura de  $h = 0,406[m]$ , que se aprecia en la Figura 22, tal como se describe en el artículo, con mediciones de velocidad para alturas  $h_{ADV}^* = 0.063$ ,  $0.125$ , y  $0.188$ , siendo  $h_{adv}^* = h_{ADV}/h_0$ , donde  $h_0$  representa la altura inicial del líquido y  $h_{ADV}$  la altura del instrumento (Micro ADV) utilizado por el autor para las mediciones de velocidad en estos puntos.



**Figura 22.** Imagen en el instante inicial de la simulación, en rojo el fluido pesado, en azul el liviano.

A partir de los parámetros presentados en el artículo y mostrados en la Tabla 2, se construyen los parámetros como lo son el coeficiente de difusión, viscosidades y densidades de los líquidos, requeridos para la simulación en OpenFOAM, usando las ecuaciones 1 a 6.

$x_0$	$h_0$	$\rho_1(kg/m^{-3})$	$g'(m.s^{-3})$	$u_m(m.s^{-1})$	$R_m$	$F_h$	$\phi$
0.762	0.406	1010	0.107	0.098	19952	0.468	0.01

**Tabla 2.** Datos dados en el artículo

<sup>4</sup>HATCHER y VASCONCELOS, “Finite-Volume and Shock-Capturing Shallow Water Equation Model to Simulate Boussinesq-Type Lock-Exchange Flows”.

$$\epsilon = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1} \quad (1)$$

$$\phi = \frac{h_o}{H} = 1 \quad (2)$$

$$R_m = \frac{u_m h_0}{2\nu} \quad (3)$$

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (4)$$

$$u_1^* = \frac{u_1}{\sqrt{g'h_0}} \quad (5)$$

$$t^* = 60$$

$$t^* = \frac{t}{\frac{x_0}{\sqrt{g'h_0}}} \quad (6)$$

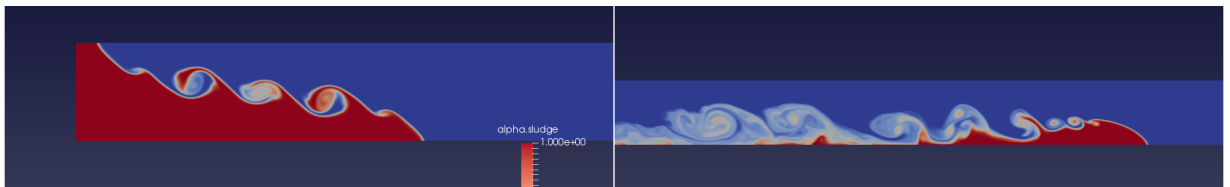
La ecuación (6) ayuda a determinar el tiempo total de simulación, debido a que las gráficas mostradas por el autor están en función de velocidad adimensional ( $u^*$  ecuación (5)) y el tiempo adimensional ( $t^*$  ecuación (6)). La solución de las ecuaciones entregó como resultado, los siguientes datos, mostrados en la **Tabla 3** requeridos para la simulación:

$D(m^2/s)$	$\nu_1$ y $\nu_2(m^2/s)$	$\rho_1(kg/m^{-3})$	$\rho_2(kg/m^{-3})$	$t(s)$
9.97e-07	9.97e-07	1010	1000	220

**Tabla 3.** Datos utilizados en la simulación del caso de comprobación Hatcher

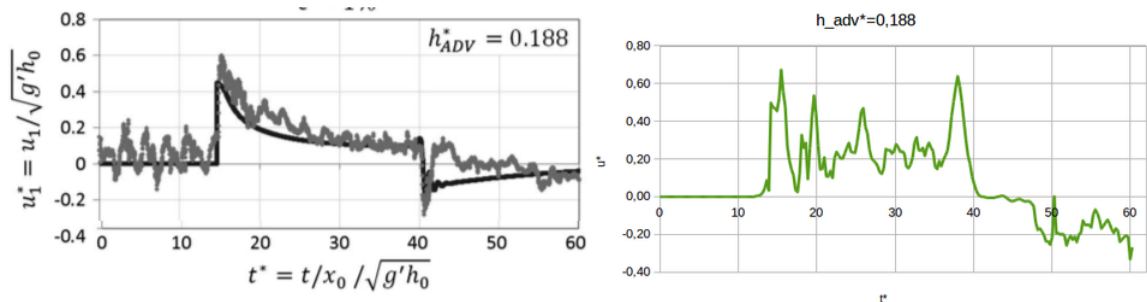
Como primera instancia se visualizan las inestabilidades de Kelvin-Helmholtz, como se observa en la **Figura 23**, esta inestabilidad se manifiesta en forma de olas en primera instancia y luego en remolinos, en esta misma figura se visualiza un frente de velocidad que se desplaza sobre toda la cavidad, este frente solo se detiene

cuando choca con la pared, la cual disminuye su velocidad y difumina el fluido rojo en el azul, esta disminución de velocidad es sumamente importante dado que esto podría utilizarse como una analogía de una avalancha de lodo o nieve, la cual solo disminuirá su velocidad y eventualmente se detendrá al momento de chocar contra una pared, la cual deberá de ser de una altura mayor a la altura del frente de velocidad.



**Figura 23.** Imágenes de la simulación, a la izquierda en un tiempo de 8 segundos, a la derecha en un tiempo 50 segundos.

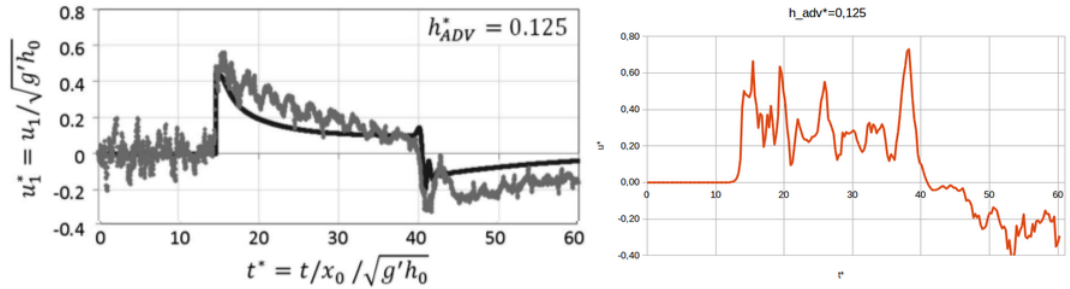
Después de un proceso de simulación y post-procesamiento, se capturaron los datos a través del tiempo de los puntos  $h_{ADV}^*$  mencionados anteriormente, sus respectivas gráficas se muestran a continuación.



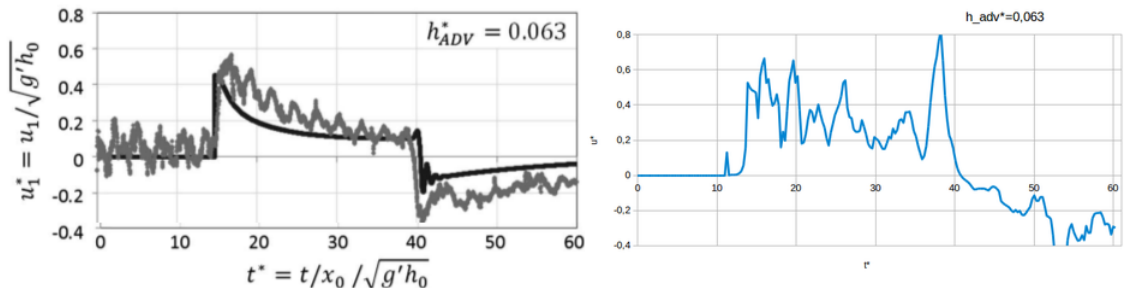
**Figura 24.** A la izquierda, imagen del artículo línea negra simulación y línea gris datos obtenidos experimentalmente; a la derecha, gráfica obtenida en la simulación.

Como se observa en la Figura 24, los puntos de inflexión velocidad máxima y caída de velocidad cero, se dan en un tiempo muy similar de 13 segundos y 40 segundos respectivamente; se interpreta como el esquema aquí propuesto

alcanzó velocidades más grandes, con un pico en  $t^* = 15,5$  y una velocidad  $u^* = 0,67$ , respecto a  $u^* = 0,6$  del artículo en un tiempo similar, aquí el error presentado fue de 11,67%.



**Figura 25.** A la izquierda, imagen del artículo línea negra simulación y línea gris datos obtenidos experimentalmente; a la derecha, gráfica obtenida en la simulación.



**Figura 26.** A la izquierda, imagen del artículo línea negra simulación y línea gris datos obtenidos experimentalmente; a la derecha, gráfica obtenida en la simulación.

Comparando las alturas para  $h_{adv}^* = 0,125$  Figura 25, y  $h_{adv}^* = 0,063$  Figura 26, se observa que siguen un patrón similar a las gráficas en el artículo, mas no el mismo, por el contrario los puntos de la simulación son un poco más altos a los registrados en el artículo, además en la Figura 26 se observa que la tendencia en la gráfica es más parecida a los registros experimentales que a la simulación hecha por el autor del artículo.

Los tiempos adimensionales de desarrollo de los fenómenos son similares entre el

artículo y la simulación realizada, como también los signos de los valores en los intervalos de las gráficas y los rangos de valores son similares a los presentados en el artículo.

Las comparaciones indican que si bien las gráficas no son idénticas, muestran una buena aproximación, a esto debe agregarse que las aproximaciones también generan cierto error y por ello hay discrepancia entre las gráficas. A continuación se presenta un ejemplo.

$t^*=15$ - pico de velocidad			
$h_{ADV}$	Hatcher	propio	error (%)
0,188	0,58	0,67	15,5
0,125	0,58	0,66	13,8
0,063	0,6	0,67	11,7

**Tabla 4.** Error en el pico inicial.

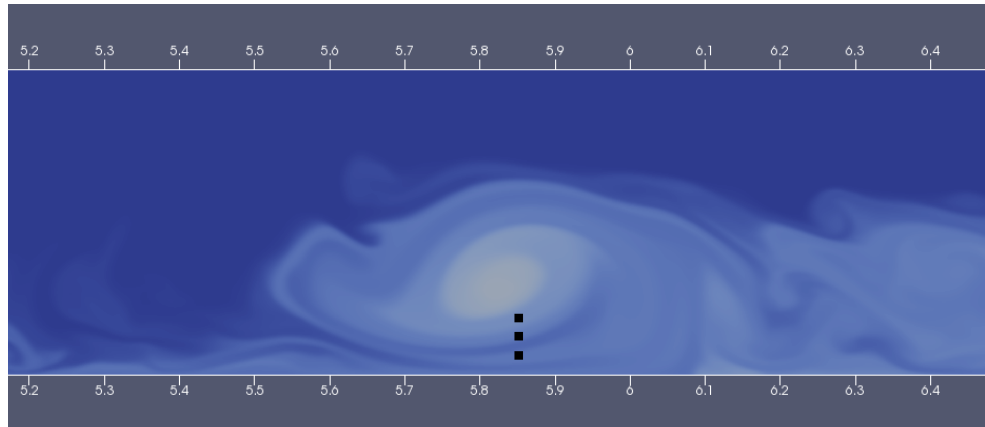
Al principio se muestra que las gráficas de las simulaciones realizadas son cero aproximándose al modelo realizado por Hatcher, Tabla 4, pero al pasar el tiempo se hace evidente que el las velocidades varían notablemente. Se observa que en tiempos cercanos al inicio, los errores fueron relativamente bajos a comparación del tiempo al final de la gráfica cuyos errores son mayores, esto debido a los remolinos presentados como se aprecia en la Figura 28, los cuales aumentaban dramáticamente la velocidad, elevando con ella el error; es clave decir que estos remolinos no se enuncian en el artículo de Hatcher y quizás son generados por las discretizaciones utilizadas por OpenFOAM.

Los picos de velocidad alrededor del tiempo  $t^* = 40$ , se dan debido a que en ese tiempo, por los puntos  $h_{ADV}$ , pasa un remolino como se observa en la Figura 27, ocasionado por el fenómeno de Kelvin-Helmholtz, estos remolinos presentan una

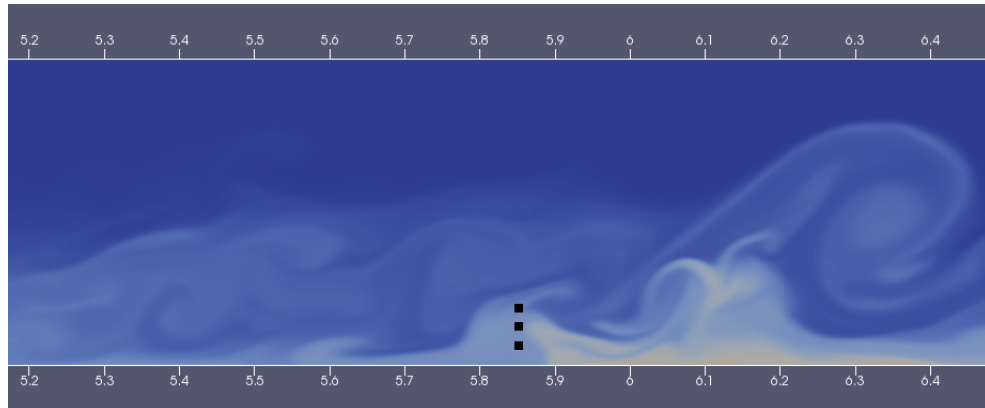
diferencia de velocidades bastante alta, como se registran en las gráficas, esta observación difiere de la descrita por Hatcher en su artículo, en la cual se enuncia que estos picos son derivados de la onda reflejada, más la onda no alcanza a los puntos enunciados hasta después de un tiempo  $t^* = 59$  (Figura **28**) y esta provoca un aumento de velocidad en estos puntos. La Figura **27** recuerda a un huracán visto desde arriba, sin embargo el fenómeno de generación de estos no es la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz pero si un homologo dado que los huracanes se producen por diferencias de temperatura que repercuten en diferencias de densidades.

Con esto no se quiere concluir que el procedimiento o el artículo realizado por Hatcher estén erróneos, tampoco que la simulación realizada esté equivocada, sino los métodos de discretización de las ecuaciones difieren entre los dos, además se encuentra un error intrínseco en las asunciones realizadas, que podría representar un cambio importante en el movimiento de los fluidos. Además de lo mencionado, no se tiene el detalle suficiente del artículo para poder establecer una línea de verificación de las diferencias.

Es clave anotar que la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz ocasiona los remolinos como se aprecia en la Figura **23**, este deja una estela conforme avanza ocasionando velocidades importantes y ayudan a la difusión de los líquidos, tal como se observa en la Figura **28**, donde la estela crece y se va diluyendo en el fluido azul, siendo el fluido rojo (más denso) el que contamina el primero, esto se da gracias a que el fluido rojo alcanza una velocidad mayor que el azul, el cual permanece casi estático. El fluido rojo gira sobre la interfaz de los dos fluidos y arrastra una porción del azul en consecuencia generando un remolino de mezcla que contaminará finalmente al fluido azul.



**Figura 27.** Captura de imagen en un tiempo  $t^* = 40$ , los tres puntos negros representan las alturas  $h_{ADV}^*$  0.063, 0.125, 0.188, desde la parte del fondo hacia arriba respectivamente.



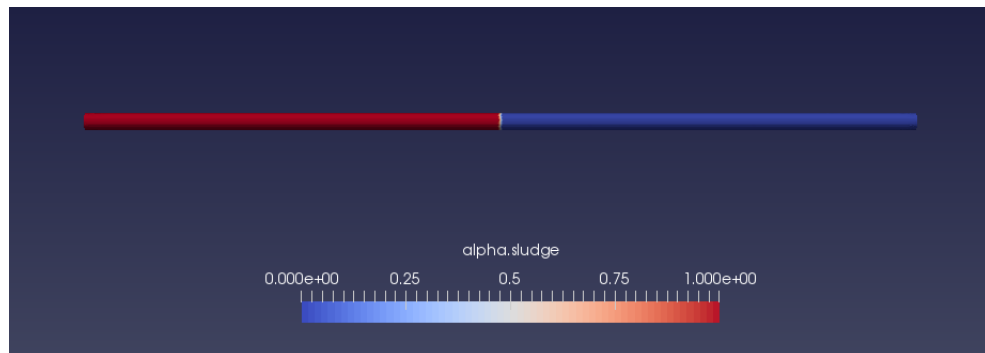
**Figura 28.** Captura de imagen en un tiempo  $t^* = 59$ , los tres puntos negros representan las alturas  $h_{ADV}^*$  0.063, 0.125, 0.188, desde la parte del fondo hacia arriba respectivamente.

## 6.2. Orientaciones inclinadas

Con el fin de comprobar los resultados arrojados por OpenFOAM, se utilizó el artículo presentado por Séon *et al*<sup>5</sup>, quién realizó medidas de velocidades experimentales variando el número de Atwood ( $At$ ) y la viscosidad dinámica ( $\mu$ ) en

<sup>5</sup>SÉON y col., “Buoyancy driven miscible front dynamics in tilted tubes”.

un tubo de longitud  $4[m]$  y de diámetro  $0,02[m]$  similar al que se muestra en la Figura 29, a partir de ello, elaboró gráficas mostrando los resultados obtenidos. En el presente trabajo se desarrolló una cantidad menor de ángulos y de configuraciones a las utilizadas por Séon, sin perjudicar la caracterización del fenómeno, la orientación del tubo viene dado por el ángulo  $\theta$  respecto a la vertical. En la Tabla 5, se puede ver en detalle los datos utilizados para las simulaciones; Así mismo se utilizaron las asunciones antes mencionadas al inicio del capítulo 6.



**Figura 29.** Geometría utilizada para las simulaciones

Simulación	$\theta[^\circ]$	$At$	$\mu[Pa.s]$	$\rho_1[kg/m^3]$	$\rho_2[kg/m^3]$	$\nu[m^2/s]$	$D[m^2/s]$	$g'[m/s^2]$
1	10	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	1,703
2	10	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	1,703
3	60	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	8,496
4	60	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	8,496
5	10	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	4,00E-06	1,703
6	10	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	1,703
7	60	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	4,00E-06	8,496
8	60	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	8,496
9	70	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,218
10	80	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,661
11	70	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,218
12	80	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,661
13	70	0,01	0,002	1000	1020	2,00E-06	2,00E-06	9,218
14	80	0,01	0,002	1000	1020	2,00E-06	2,00E-06	9,661
15	70	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	4,00E-06	9,218
16	80	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	0,000004	9,661
17	85	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,773
18	87	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,797
19	85	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,773
20	87	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,797
21	85	0,01	0,002	1000	1020	2,00E-06	2,00E-06	9,773
22	87	0,01	0,002	1000	1020	2,00E-06	2,00E-06	9,797
23	85	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	4,00E-06	9,773
24	87	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	4,00E-06	9,797

**Tabla 5.** Datos utilizados en las simulaciones.

A continuación se presentan las ecuaciones utilizadas para determinar los datos de la Tabla 5:

$$At = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1} \quad (7)$$

$$\nu = \frac{\mu}{\rho_1} \quad (8)$$

$$g' = g * \sin(\theta) \quad (9)$$

$$Sc = \frac{\nu}{D} = 1 \quad (10)$$

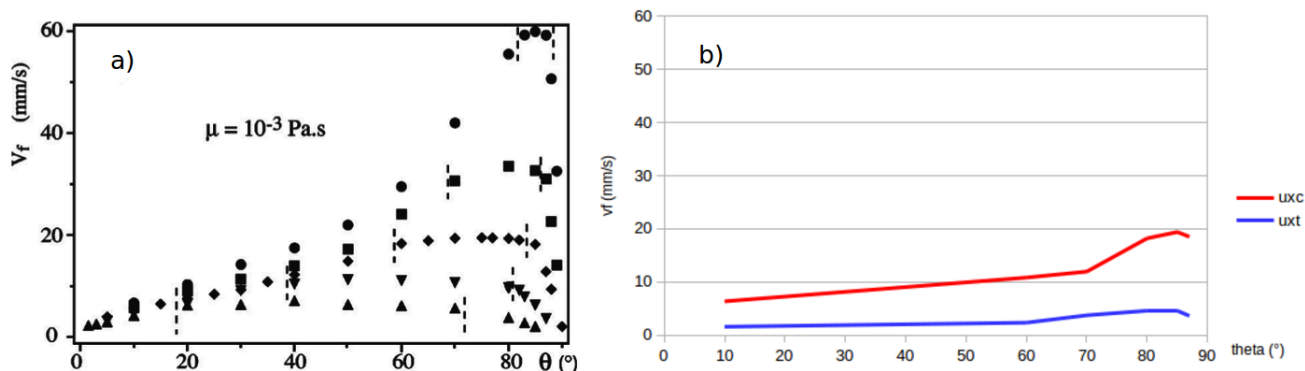
Se utilizó como fluido liviano el agua  $\rho_1 = 1000$ , con gravedad  $g = 9,81$ , dado que el tubo presenta una inclinación, se multiplicó la gravedad por  $\sin(\theta)$ , para obtener la componente en y (eje vertical) la cual es la que fuerza el fluido pesado a moverse, además se tiene en cuenta a  $D$  que representa el coeficiente de difusión entre los líquidos. Siguiendo la consideración presentada por el autor, se toman tres dominios: dominio 1 desde  $\theta = 0^\circ$  hasta  $\theta = 60^\circ$ , dominio 2 desde  $\theta = 60^\circ$  hasta  $\theta = 82^\circ$  y dominio 3 desde  $\theta = 82^\circ$  hasta  $\theta = 90^\circ$ .

Los datos presentados en la Tabla 5, corresponden a los datos utilizados en las simulaciones en las cuales se varió el número de Atwood, la viscosidad cinemática y la orientación de cavidad respecto a la vertical ( $\theta$ ). El número de Atwood se varió entre dos opciones, una con diferencia de densidad baja ( $At = 4 \times 10^{-4}$ ) y la otra con diferencia de densidad alta ( $At = 1 \times 10^{-2}$ ), esto para estudiar el comportamiento de la velocidad en función del número de Atwood, por otra parte se tomaron diferentes viscosidades cinemáticas  $\mu = 1 \times 10^{-3}$ ,  $\mu = 1 \times 10^{-3}$  y  $\mu = 2 \times 10^{-3}$ , para determinar la función que cumple esta propiedad en el desarrollo de la mezcla, además se estudio la influencia del ángulo de inclinación de la cavidad, tomando dos ángulos por dominio, esta inclinación a su vez modifica la influencia de la

gravedad en la coordenada  $y$  de forma tal que reduce la gravedad, por lo que se determinó el termino gravedad reducida  $g'$  y se consignó en la Tabla 5.

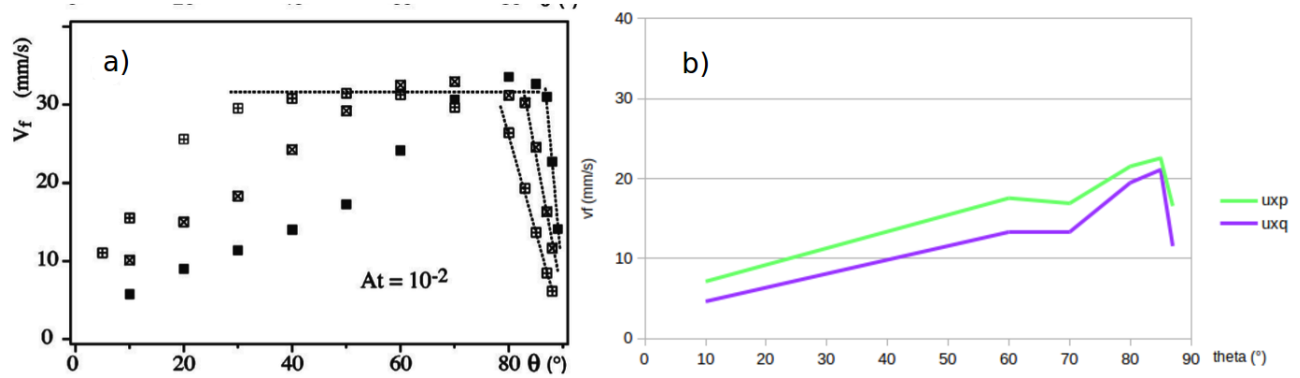
De las simulaciones 1 a 4, 9, 10 a 12 y 17 a 20 se elaboró la gráfica mostrada en la Figura 30.b, en ella se ve el efecto de diferentes números de Atwood (diferencia de densidades), cuando se varía la orientación ( $\theta$ ) y se mantiene constante la viscosidad cinemática, así mismo utilizando las simulaciones 5 a 8, 13 a 16 y 21 a 24 se elaboró la gráfica mostrada en la Figura 31.b, en ella se mantuvo constante el número de Atwood, mientras se varía la viscosidad cinemática y la orientación de la cavidad ( $\theta$ ).

En la Figura 30, se observa la comparación entre los resultados del artículo y los resultados obtenidos en las simulaciones, en las cuales se dejó constante la viscosidad cinemática ( $\mu = 1 \times 10^{-3} Pa.s$ ) y se varió el número de Atwood. La línea azul en la Figura 30.b simboliza  $At = 1 \times 10^{-2}$  que representa el símbolo de triángulos hacia arriba en la imagen del artículo Figura 30.a; la línea roja simboliza  $At = 4 \times 10^{-4}$  en la Figura 30.b que representa el símbolo de cuadrados en la Figura 30.a.



**Figura 30.** A la izquierda, imagen del artículo; a la derecha, gráfica obtenida en las simulaciones.

En la Figura 31, se observa la comparación entre los resultados del artículo y los resultados obtenidos en las simulaciones, en las cuales se varió la viscosidad cinemática y se mantuvo constante el número de Atwood ( $At = 1 \times 10^{-2}$ ). La línea morada de la Figura 31.b simboliza una viscosidad de  $\mu = 4 \times 10^{-3}$  la cual representa el símbolo de cuadro con una cruz (+) dentro en la Figura 31.a, mientras que la línea verde simboliza una viscosidad de  $\mu = 2 \times 10^{-3}$  en la Figura 31.b la cual representa el símbolo de cuadro con una equis (x) dentro en la Figura 31.a.



**Figura 31.** A la izquierda, imagen del artículo; a la derecha, gráfica obtenida en las simulaciones.

En la Figura 30.b se observa un aumento de la velocidad conforme aumenta el ángulo de orientación  $\theta$ , hasta llegar a un máximo en  $\theta = 85^\circ$  y luego decrece un poco. Comparativamente, en la Figura 31.b, se observa que las velocidades aumentan conforme aumenta  $\theta$  y disminuye de forma más pronunciada después de  $\theta = 85^\circ$ . Se debe mencionar que en el dominio 3, es el que mayores cambios de velocidad se observan.

En las Figura 30 se observan la diferencias de velocidades que se obtienen cuando se mantiene la viscosidad constante y se varía el número de Atwood, siendo el Atwood más grande el que desarrolla mayores valores de velocidad, por otra parte en la Figura 31 se aprecian los distintos valores de velocidad cuando el Atwood

es constante y se varía la viscosidad, siendo la viscosidad más pequeña la que mayores velocidades desarrolla.

Siguiendo la tesis planteada por el autor, se observan los tres dominios por separado. En el dominio 1 se observa que la velocidad en ambas Figuras **30** y **31**, crece rápidamente conforme se inclina, esto hace pensar en una semejanza al efecto Boycott. La marcada diferencia de velocidades de la línea roja, respecto a la azul en la Figura **30.b**, es debido a que la velocidad de desplazamiento del fluido va ligada a la diferencia de densidades, esto quiere decir que al haber una diferencia de densidades mayor en los dos fluidos, la velocidad va a aumentar rápidamente. Analizando la Figura **31.b**, se observa que la velocidad del fluido se desarrolla más rápidamente en fluidos menos viscosos que en uno más viscoso. Entonces es correcto afirmar que en un proceso donde involucre la mezcla de fluidos, este se moverá más rápidamente con una diferencia de densidad alta y una viscosidad dinámica baja.

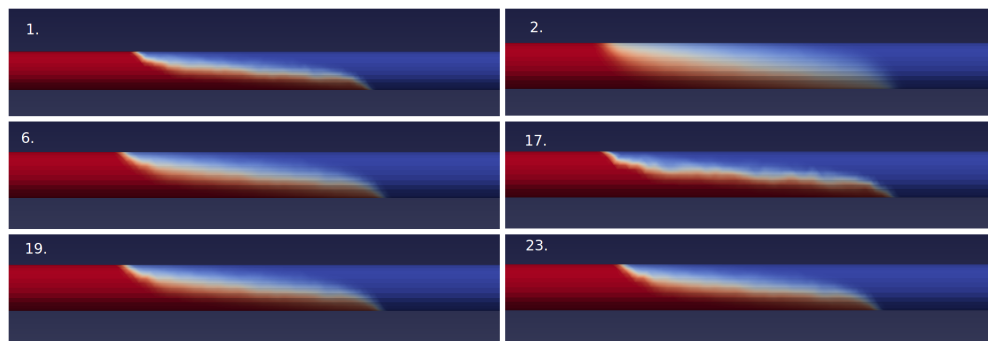
Respecto al dominio 2, en este caso los frentes de mezclado de cada uno de los casos alcanzan su mayor diferencia, en la Figura **30**, la gráfica de las simulaciones realizadas es similar a la imagen del artículo, pero no alcanza a llegar a un punto tan alto como en el artículo; cabe resaltar que el rango de velocidades y la rapidez con la que crece son similares. En este dominio también se observan cambios drásticos de velocidad con diferencias de velocidades entre las dos líneas alrededor de 4 y 5 veces más.

En el dominio 3, en ambas gráficas se observa que la velocidad es máxima para un ángulo crítico de  $85^\circ$  y que a otros ángulos las velocidades serán menores.

Como se ha escrito anteriormente, estos resultados confirman la tesis planteada

por Boycott<sup>6</sup>, demostrando que una cavidad inclinada la velocidad es mayor que en una cavidad orientada verticalmente, sin embargo a diferencia del autor del artículo, se observa que la velocidad es mayor en ambas gráficas para un ángulo crítico de  $85^\circ$  y en ángulos mayores a este las velocidades serán menores. Este conocimiento podrá ser de gran utilidad en transporte de fluidos como los oleoductos que deben adaptar la geometría de la tubería a la topología del terreno.

Es importante resaltar que a diferencia de Séon, en las simulaciones correspondientes a la Figura **31.b**, no se cruzan las líneas como se aprecia en la imagen del artículo **31.a**. Así mismo otro rasgo a resaltar es la interfaz que se forma al pasar el frente de mezcla, el cual se aprecia en la Figura **32**, en la simulación 2 se observa un proceso en el cual prevalece un proceso difusivo; en contraste en la simulación 17 prevalece un proceso convectivo ya que se aprecia una interfaz más evidente que en la anterior.



**Figura 32.** Simulaciones realizadas, el número es correspondiente a la Tabla 5.

Al comparar las simulaciones 1 y 2 donde se presenta igual viscosidad y diferente Atwood, en 2 se observa una mayor difusión, debido a que la velocidad es muy baja en comparación a la 1 donde prevalece el fenómeno convectivo. Al cotejar las simulaciones 17 y 23 estas presentan igual Atwood y diferente viscosidad, aquí la

<sup>6</sup>BOYCOTT, *Sedimentation of Blood Corpuscles*.

simulación 23 presenta una mayor difusión en el frente de mezclado que la 17, dado que la 23 tiene una mayor viscosidad dificultando el movimiento de los fluidos.

Por otra lado al contrastar las simulaciones 1 y 17, las cuales presentan igual Atwood, igual viscosidad y diferente ángulo de orientación, aquí las velocidades son altas y prevalece el fenómeno convectivo a diferencia de las simulaciones 2 y 19 las cuales presentan una alta difusividad, siendo la simulación 2 la que mayor difusión presenta dado a la baja velocidad provocada por el ángulo de inclinación; sin embargo, la 19 no se aprecia tanta difusividad debido a que el ángulo de inclinación  $\theta = 85^\circ$  presenta alta velocidad lo cual disminuye la difusividad de la mezcla y aumenta su convectividad, por otra parte al parangonar las simulaciones 1 y 6, con igual Atwood, con igual ángulo de orientación y diferente viscosidad, se observa que la simulación 6 presenta mayor difusión que la 1, debido a que la 6 presenta una mayor viscosidad.

Por las razones anteriormente descritas y lo observado en las Figuras **30** y **31**, se puede indicar que la velocidad del frente de mezclado está demarcada más por la diferencia de densidad que por la diferencia de viscosidades dinámicas, recordando que una viscosidad menor, permite una mayor movilidad del flujo de fluidos, sin olvidar que a un mayor ángulo de inclinación hasta  $85^\circ$  la velocidad del frente de mezclado va a crecer rápidamente y después de este decrecerá rápidamente.

Para las orientaciones inclinadas se visualizaron diferentes ángulos, se observó que dependiendo de ellas la velocidad va a variar, siendo un ángulo el que tuviera la mayor velocidad. Birman *et al.*<sup>7</sup> menciona que su ángulo crítico es  $40^\circ$ , mas en este estudio se encontró un ángulo crítico de  $85^\circ$  donde la velocidad es máxima; Este estudio estuvo basado en el artículo<sup>8</sup>, el cual midió velocidades en experimentos

---

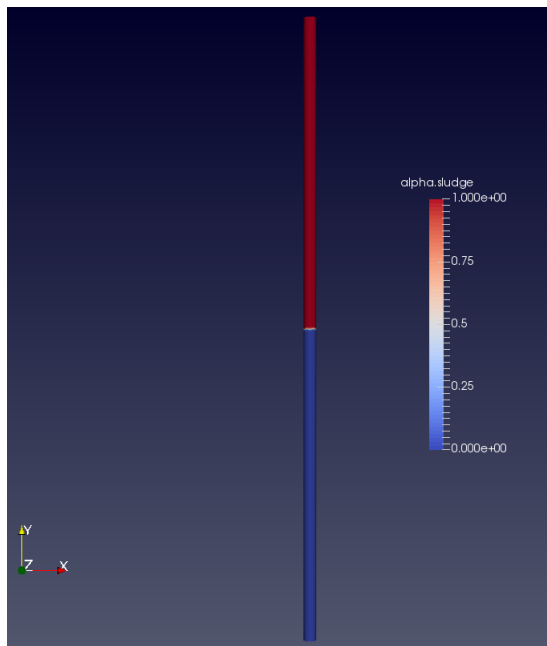
<sup>7</sup>BIRMAN y col., "Lock-exchange flows in sloping channels".

<sup>8</sup>SÉON y col., "Buoyancy driven miscible front dynamics in tilted tubes".

reales y llegó a un ángulo crítico similar.

### 6.3. Orientación Vertical

Para verificar los resultados en un cavidad con orientación vertical se utilizó el artículo publicado por Debacq<sup>9</sup> *et al* , quienes realizaron una serie de medidas del frente de velocidad ( $V_f$ ). En el presente trabajo se realizó un análisis de los fenómenos presentados así como de los resultados obtenidos. Para la simulación se utilizó una geometría de tubo con diámetro 0,02[m] y longitud 1[m], como se observa en la Figura 33. Al igual que los casos anteriores se tomaron las mismas asunciones mencionadas al inicio del capítulo 6.



**Figura 33.** Geometría utilizada en la simulación, en rojo fluido con mayor densidad; en azul fluido con menor densidad.

<sup>9</sup>DEBACQ, M. y col. "Self-similar concentration profiles in buoyant mixing of miscible fluids in a vertical tube". En: *Physics of Fluids* 13.11 (2001), págs. 3097-3100. ISSN: 10706631. DOI: 10.1063/1.1405442.

Las simulaciones para este caso son necesarias realizarlas en 3D para observar mejor el fenómeno de Rayleigh-Taylor, los datos utilizados para realizar las simulaciones se presentan en la Tabla 6.

Simulación	$At$	$\rho_1[kg/m^{-3}]$	$\rho_2[kg/m^{-3}]$	$\nu[m^2/s]$	$D[m^2/s]$
1	4e-3	1001	1000	1e-6	1e-6
2	4e-3	1001	1000	2.75e-4	2.75e-4
3	1.5e-3	1030	1000	2.75e-4	2.75e-4
4	1.5e-3	1030	1000	1e-6	1e-6

**Tabla 6.** Simulaciones en la orientación vertical

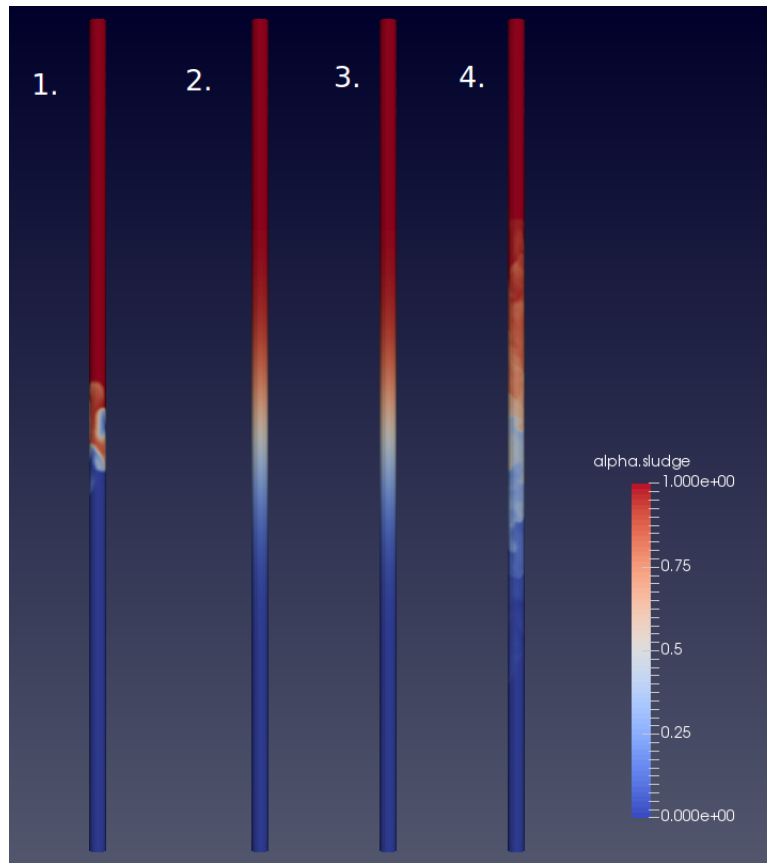
Los datos presentados en la Tabla 6, corresponden a las simulaciones, variando el número de Atwood y la viscosidad cinemática; se estudiaron las simulaciones 1 y 2 las cuales presentan un Atwood bajo e igual, variando la viscosidad, luego se compararon las simulaciones 3 y 4 que presentan un Atwood igualmente alto y diferente viscosidad, después se estudiaron las simulaciones 2 y 3, las cuales presentan una misma viscosidad baja y diferente Atwood, por último se comparó las simulaciones 1 y 4 con una viscosidad igualmente alta y diferente Atwood.

El resultado de las velocidades en el frente de mezclado se muestran en la Tabla 7 donde  $V_{art}(m/s)$  representa la velocidad obtenida por el artículo y se compararon con las velocidades obtenidas en la simulación ( $V_{sim}(m/s)$ ), estos datos se presentan en la Tabla 7.

Simulación	$v_{art}[m/s]$	$v_{sim}[m/s]$
1	4.1e-3	2.3e-3
2	4.1e-3	3.4e-3
3	4.3e-3	2.4e-3
4	4.3e-3	4.5e-3

**Tabla 7.** Comparación de los resultados obtenidos en el artículo respecto a las simulaciones.

Tal como se observa en la Tabla 7, en los resultados obtenidos por la simulación se observa que hay una mayor velocidad cuando la viscosidad es menor y el número de Atwood es el mismo; al variar el número de Atwood se observa que la velocidad crece aún más rápido.



**Figura 34.** De izquierda a derecha, simulaciones del 1 al 4, en un tiempo de simulación de 15 segundos.

Como se observa en la Figura 34, en las simulaciones 2 y 3 (misma viscosidad y diferente número de Atwood), es el efecto difusivo el que domina la mezcla a diferencia de las simulaciones 1 y 4 (misma viscosidad y diferente número de Atwood), en las cuales el efecto convectivo domina el mezclado, esto gracias a que en las simulaciones 2 y 3 las viscosidades son mayores a las simulaciones 1 y 4. Al comparar las simulaciones 1 y 4 se aprecia que existe mayor contaminación de mezcla en 4 que en 1, debido a que en 4, los fluidos alcanzan mayores velocidades debido a la diferencia de densidades. Después al comparar las simulaciones 2 y 3, estas presentaron un desarrollo igual de mezcla inclusive al tener diferentes números de Atwood, debido a que las dos presentaban la misma viscosidad. Además al comparar las simulaciones 1 y 2 las cuales presentan mismo Atwood

y diferente viscosidad, se observa que es la viscosidad la que presenta un papel importante, ya que esta define si el fenómeno va a ser mayoritariamente difusivo como en la simulación 2 o mayormente convectivo como en la simulación 1, así mismo sucede al comparar las simulaciones 3 y 4, donde la simulación 3 es mayormente difusiva y la 4 es mayormente convectiva.

Como describe Debacq en la literatura<sup>10</sup>, el efecto intrínseco para esta orientación es la inestabilidad Rayleigh-Taylor, la cual se caracteriza por una alta difusividad, como se observa en las simulaciones 2 y 3 de la Figura 34. Además como se mencionó en el efecto de Boycott, la velocidad en la orientación vertical es menor que en la orientación inclinada. Así mismo es clave decir que la viscosidad en esta cavidad es la que define si el frente de mezclado se desarrollará en forma difusiva (viscosidad altas) o en forma convectiva (viscosidad bajas), inclusive a diferentes números de Atwood.

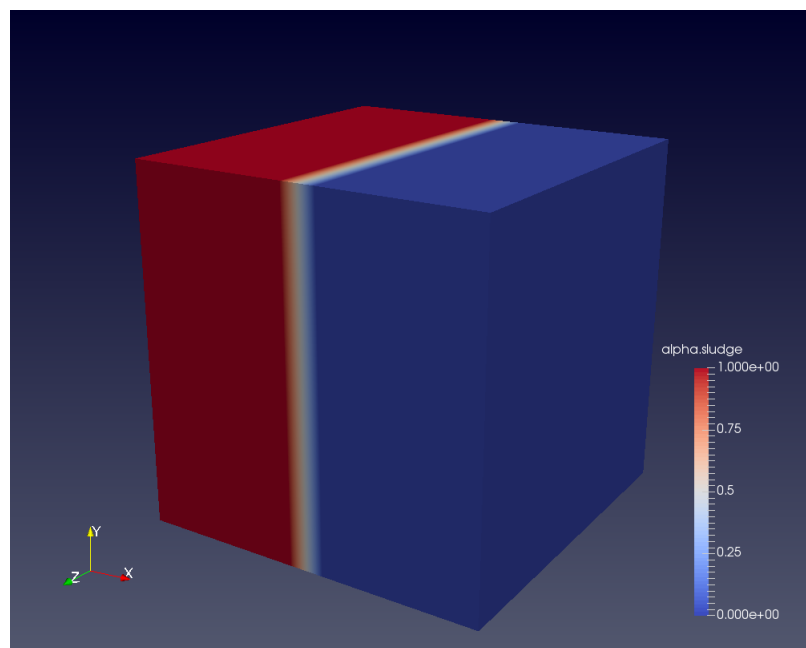
La inestabilidad Rayleigh-Taylor, también ayuda a describir de una forma análoga el resultado de los gases en erupciones volcánicas, las cuales se dan por fluidos de diferentes densidades que ascienden y se diluyen uno en el otro; esto es útil para entender el proceso de mezclado de gases tóxicos en ambientes cerrados, dado que es un mezclado vertical.

---

<sup>10</sup>DEBACQ y col., "Self-similar concentration profiles in buoyant mixing of miscible fluids in a vertical tube"; DEBACQ, M. y col. "Buoyant mixing of miscible fluids of varying viscosities in vertical tubes". En: *Physics of Fluids* 15.12 (2003), págs. 3846-3855. ISSN: 10706631. DOI: 10.1063/1.1624838.

## 7. Caso de estudio

Como se mencionó en el capítulo de metodología, en una cavidad rectangular como se observa en la Figura 35, los efectos en el eje Z son mínimos, por lo cual se decidió simular los casos en 2D con una cavidad 1x1[m] para las orientaciones horizontales e inclinadas y en 3D con una cavidad 1x1x1 [m] para la orientación vertical, con el fin de describir los fenómenos que allí ocurren.



**Figura 35.** Geometría utilizada para la realización de las simulaciones.

### 7.1. Orientación horizontal

Para esta orientación se realizaron seis simulaciones como se muestra en la Tabla 8, cada una de ellas se efectuó con la geometría antes descrita en 2D se utilizaron las asunciones propuestas en el capítulo 6.

Simulación	$At$	$\mu$	$\rho_1$	$\rho_2$	$\nu$	$D$	$g$
1	0,01	1,00E-03	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,81
2	0,01	1,00E-02	1000	1020	1,00E-05	1,00E-05	9,81
3	0,0004	1,00E-03	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,81
4	0,0004	1,00E-02	1000	1001	1,00E-05	1,00E-05	9,81
5	0,01	2,50E-02	1000	1020	2,50E-05	2,50E-05	9,81
6	0,0004	2,50E-02	1000	1001	2,50E-05	2,50E-05	9,81

**Tabla 8.** Datos utilizados en las simulaciones.

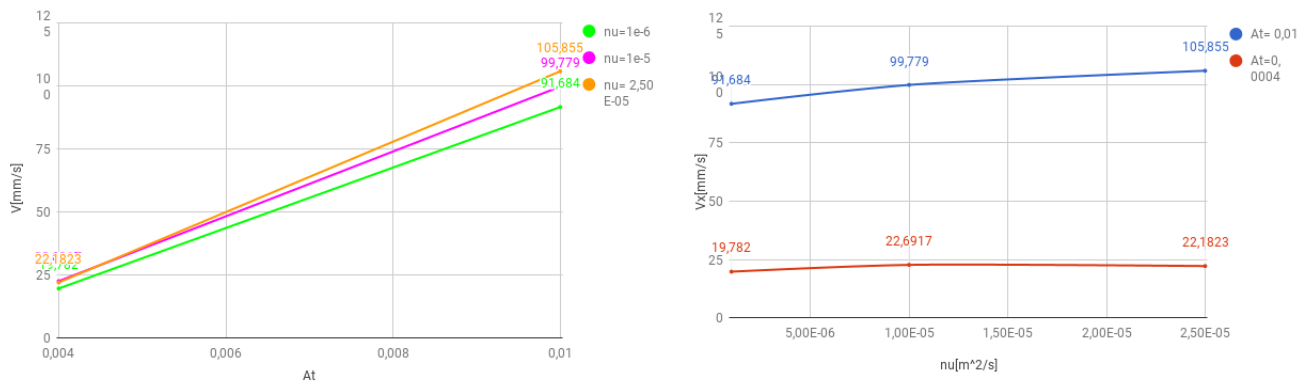
Los casos se dispusieron de forma que se pudieran comparar las simulaciones 1 y 2, 3 y 4 donde se varía la viscosidad mientras que el número de Atwood es el mismo, en las simulaciones 5 y 6 se tomó una viscosidad baja y se varió el número de Atwood, luego se cotejaron las simulaciones 1 y 3, 2 y 4, que presentan la misma viscosidad y diferente Atwood; por último se contrastaron las simulaciones 1 y 5, 2 y 6 con igual número de Atwood y diferente viscosidad para examinar lo que sucedería con una diferencia de viscosidad alta de razón (25), la misma razón utilizada en los números de Atwood.

Simulación	$V_x$	Tiempo
1	0,092	3
2	0,099	3
3	0,019	13
4	0,022	13
5	0,105	3
6	0,022	13

**Tabla 9.** Resultados de velocidad obtenidos en las simulaciones del caso de estudio en orientación horizontal.

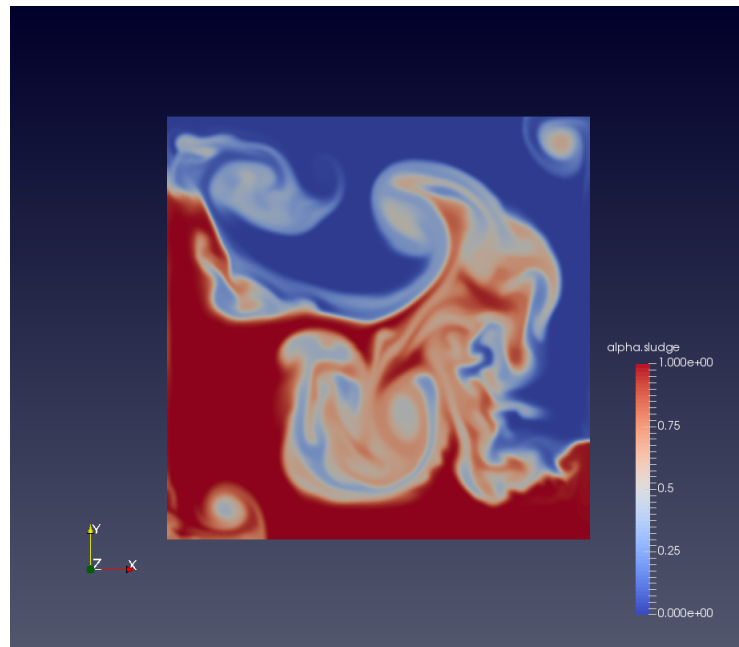
De la Tabla 9 se elaboraron las gráficas de la Figura 36, en donde se aprecia

que la diferencia de velocidades es marcada por el número de Atwood más que por la diferencia de viscosidades cinemáticas, esto incluso cuando la relación de Atwood es 25 (0.01/0.0004) y relación de viscosidades es de 25 ( $2.5E-6/1E-6$ ). Al analizar los resultados se encontró que la proporción de velocidades (Velocidad  $At=0,0004$ /Velocidad  $At=0,01$ ) es en promedio 4.6, en contraste con la proporción de viscosidades (Velocidad  $\nu = 1e - 6$ /Velocidad  $\nu = 2,5e - 5$ ) que es en promedio 1.14. Esto remonta a las conclusiones en el capítulo 6, que define la dependencia de la velocidad en función del número de Atwood principalmente y en una menor medida por la viscosidad cinemática.



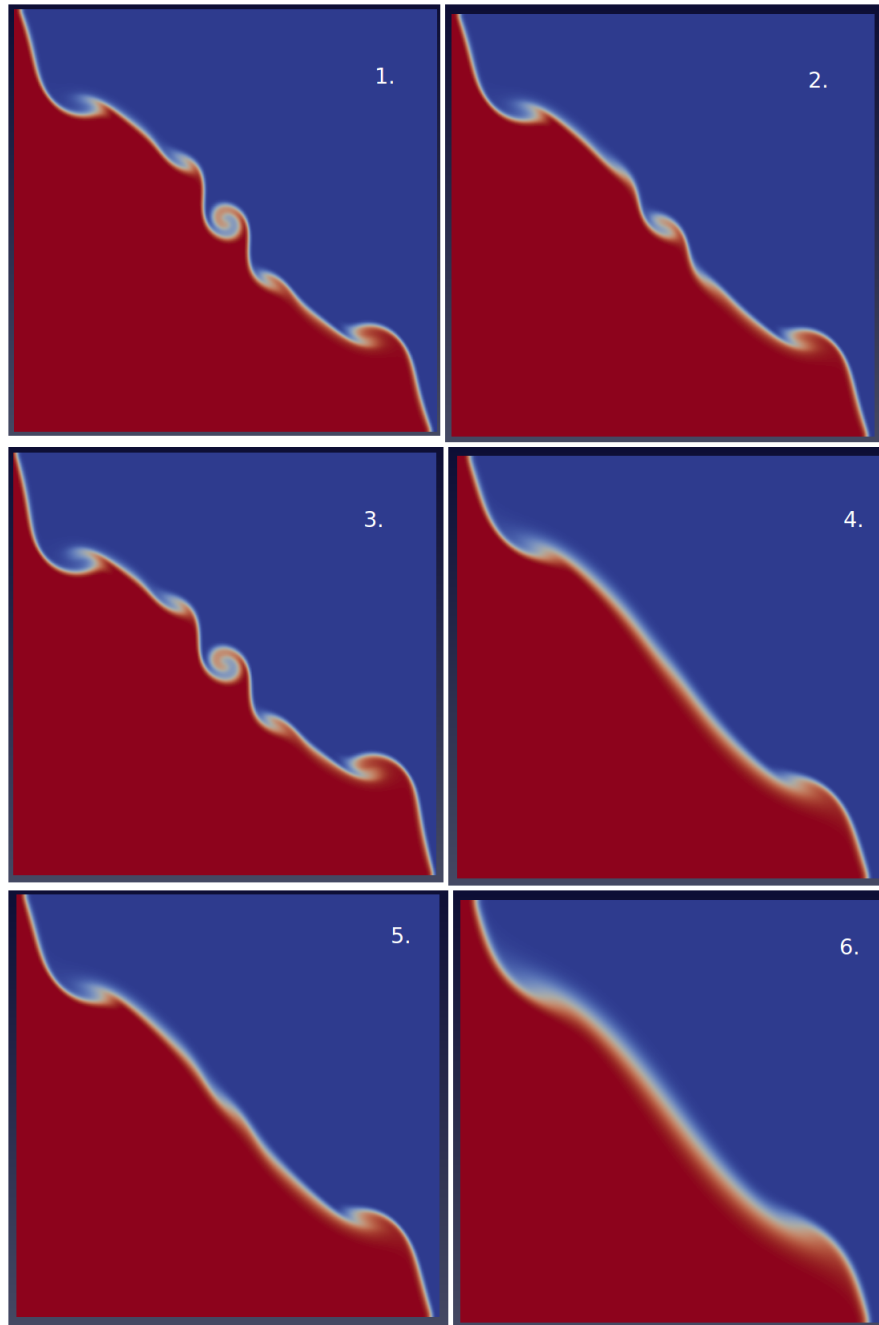
**Figura 36.** Gráfica de resultados obtenidos, a la izquierda velocidad frente a Atwood, a la derecha velocidad frente viscosidad cinemática.

Los fenómenos presentados atañen a las inestabilidades de Kelvin-Helmholtz, dado que las paredes están muy cerca y las ondas reflejadas aumentan la difusividad. Este fenómeno también provoca pequeños remolinos conocidos como salpicaduras en esquinas opuestas de la cavidad como se aprecia en la Figura 37, dichos remolinos están compuestos de una mezcla diferente a la que los rodea, es decir, en el fluido rojo (fluido más denso), el remolino está compuesto de una mezcla más ligera que se desvanecerá en la mezcla de los fluidos con el paso del tiempo.



**Figura 37.** Remolinos generados en las esquinas de la simulación 1.

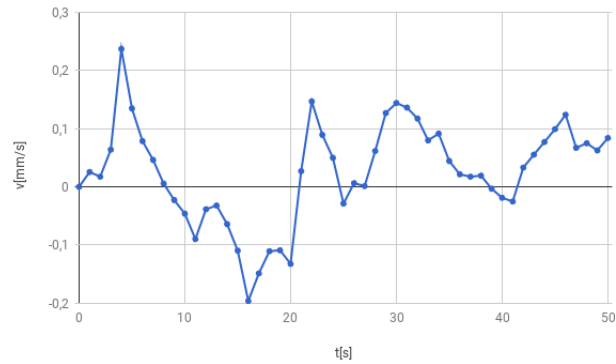
Al igual que lo mencionado en el capítulo anterior, los frentes de mezclado en las simulaciones que tienen una baja velocidad (simulaciones 3, 4 y 6) presentan una mayor difusión que las simulaciones con una mayor velocidad (simulaciones 1, 2 y 5); así mismo el desarrollo de la inestabilidad Kelvin-Helmholtz se da más rápido en las simulaciones con menor viscosidad cinemática (simulaciones 1 y 3), como se aprecia en la Figura 38.



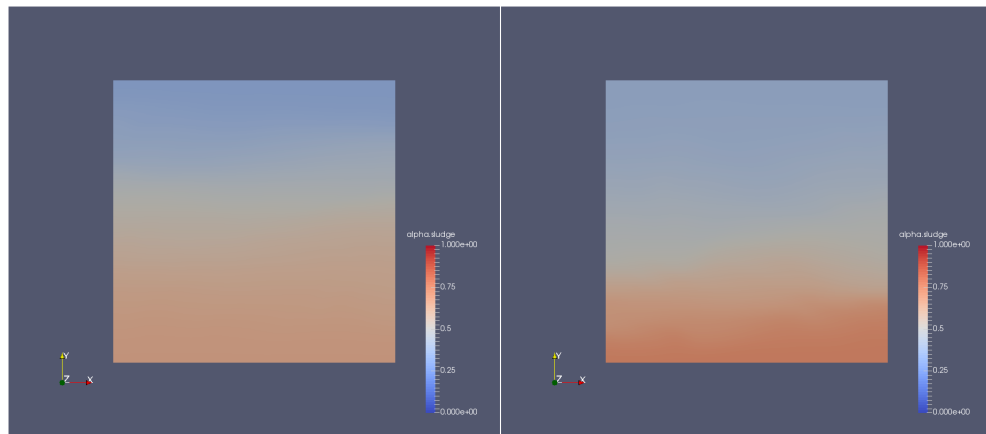
**Figura 38.** Imágenes del frente de mezcla de las simulaciones 1 a 6.

La velocidad en el eje x de la Figura 39 varía su valor conforme atraviesa la interfaz de los dos fluidos, teniendo su punto máximo ( $v_x = 0,23655$ ) en 4 segundos, instante donde el punto de muestra está en el fluido más denso en el instante donde choca

con la pared de la derecha por primera vez. El resultado de constantes choques con las paredes es la estabilización de la mezcla, el momento de estabilización viene descrito por la velocidad en  $x$  cuando esta sea igual o cercana a cero, los fluidos van a presentar una mezcla más uniforme, como se observa en la Figura 40.



**Figura 39.** Gráfica de velocidad frente al tiempo en la simulación 1.



**Figura 40.** Imagen de la simulación en el instante 3600 segundos, a la izquierda simulación 1 ( $At = 0,01$ ), a la derecha simulación 3 ( $At = 0,0004$ ).

La Figura 40, donde se muestra el momento de estabilización sirve de representación en un caso en el que se liberen gases peligrosos al ambiente, donde los más densos bajan y los menos densos suben incluso, si se mezclan horizontalmente. Esto mismo pasa cuando hay una liberación lenta de monóxido de

carbono (CO) en la casa en donde el CO sube y el aire descienden con un mezcla de CO.

## 7.2. Orientaciones inclinadas

Para estudiar los efectos generados por las distintas inclinaciones, se tomó un modelo similar al descrito en el capítulo 6.2. En la Tabla **10** se muestra un resumen de los datos empleados en las simulaciones.

Los datos presentados en la Tabla **10**, corresponden a las simulaciones variando el número de Atwood, la viscosidad cinemática y la orientación de cavidad respecto a la vertical ( $\theta$ ). El número de Atwood se varía entre dos, uno con diferencia de densidad baja ( $At = 4 \times 10^{-4}$ ) y el otro con diferencia de densidad alta ( $At = 1 \times 10^{-2}$ ), esto para estudiar el comportamiento de la velocidad en función del número de Atwood; por otra parte se tomaron diferentes viscosidades cinemáticas  $\mu = 1 \times 10^{-3}$ ,  $\mu = 1 \times 10^{-3}$  y  $\mu = 2 \times 10^{-3}$ , para determinar la función que cumple esta propiedad en el desarrollo de la mezcla, además, se estudió la influencia de la inclinación de la cavidad cuando se varía el ángulo lo que a su vez modifica la influencia de la gravedad en la coordenada  $y$  de forma tal que reduce la gravedad, por lo cual se determinó la gravedad reducida  $g'$  que se plasmó en la Tabla **10**. Dos ángulos por dominio fueron tomados para delimitar su influencia.

Simulación	$\theta$	At	$\mu$	$\rho_1$	$\rho_2$	$\nu$	D	$g'$
1	10	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	1,703
2	10	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	1,703
3	60	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	8,496
4	60	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	8,496
5	10	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	4,00E-06	1,703
6	10	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	1,703
7	60	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	4,00E-06	8,496
8	60	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	8,496
9	70	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,218
10	80	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,661
11	70	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,218
12	80	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,661
13	70	0,01	0,002	1000	1020	0,000002	0,000002	9,218
14	80	0,01	0,002	1000	1020	2,00E-06	2,00E-06	9,661
15	70	0,01	0,004	1000	1020	4,00E-06	4,00E-06	9,218
16	80	0,01	0,004	1000	1020	0,000004	0,000004	9,661
17	85	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,773
18	87	0,01	0,001	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,797
19	85	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,773
20	87	0,0004	0,001	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,797
21	85	0,01	0,002	1000	1020	0,000002	0,000002	9,773
22	87	0,01	0,002	1000	1020	0,000002	0,000002	9,797
23	85	0,01	0,004	1000	1020	0,000004	0,000004	9,773
24	87	0,01	0,004	1000	1020	0,000004	0,000004	9,797

**Tabla 10.** Datos utilizados en las simulaciones.

De las simulaciones 1 a 4, 9, 10 a 12 y 17 a 20 se elaboró la gráfica mostrada

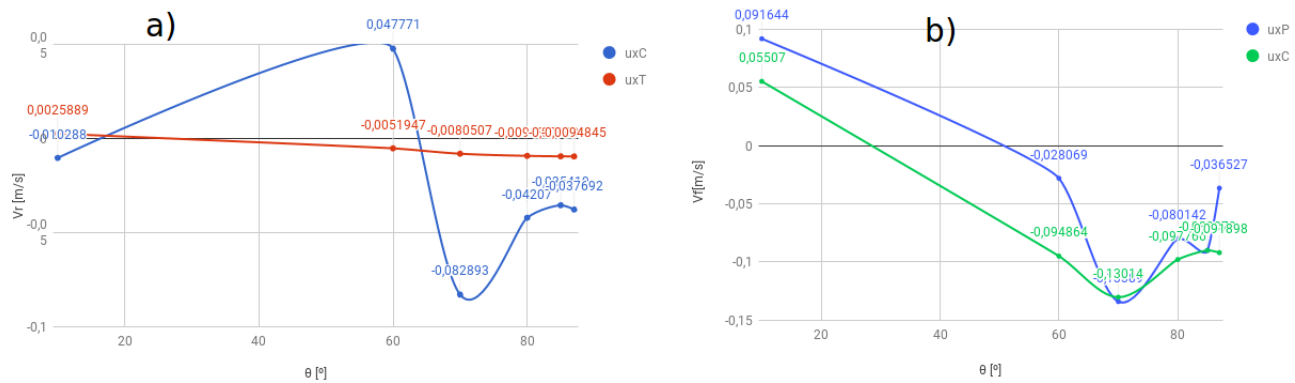
en la Figura **41.a** y **43.a**, en ella se ve el efecto de diferentes números de Atwood (diferencia de densidades) cuando se varía la orientación ( $\theta$ ) y se mantiene constante la viscosidad cinemática, así mismo utilizando las simulaciones 5 a 8, 13 a 16 y 21 a 24 se elaboró la gráfica mostrada en la Figura **41.b** y **43.a**; en ella se mantuvo constante el número de Atwood mientras se variaba la viscosidad cinemática y la orientación de la cavidad ( $\theta$ ).

Después de realizadas las simulaciones se hizo un análisis de los datos obtenidos y se tomó como referencia un punto con coordenadas  $x = 0,75$  y una altura  $y = 0,25$ , en el cual se capturaron los valores de velocidad de frente ( $V_x$ ) en diferentes tiempos. La gráfica 1 (**.a**) representa las simulaciones, en las que se dejó constante la viscosidad cinemática ( $\nu = 1e - 6$ ) y se varió el número de Atwood ( $At = 1e - 2 - UxC$  y  $At = 4e - 3 - UxT$ ). el gráfico 2 (**.b**) representa las simulaciones donde se dejó constante el número de Atwood ( $At = 1e - 2$ ) y se varió la viscosidad cinemática ( $\nu = 2e - 6 - UxP$  y  $\nu = 4e - 6 - UxC$ ).

Se extrajeron los datos de las simulaciones en 2 tiempos 10 y 49 segundos, con el fin de comparar las imágenes del inicio del proceso de mezclado y un tiempo después cuando ya ha chocado y desacelerado la mezcla.

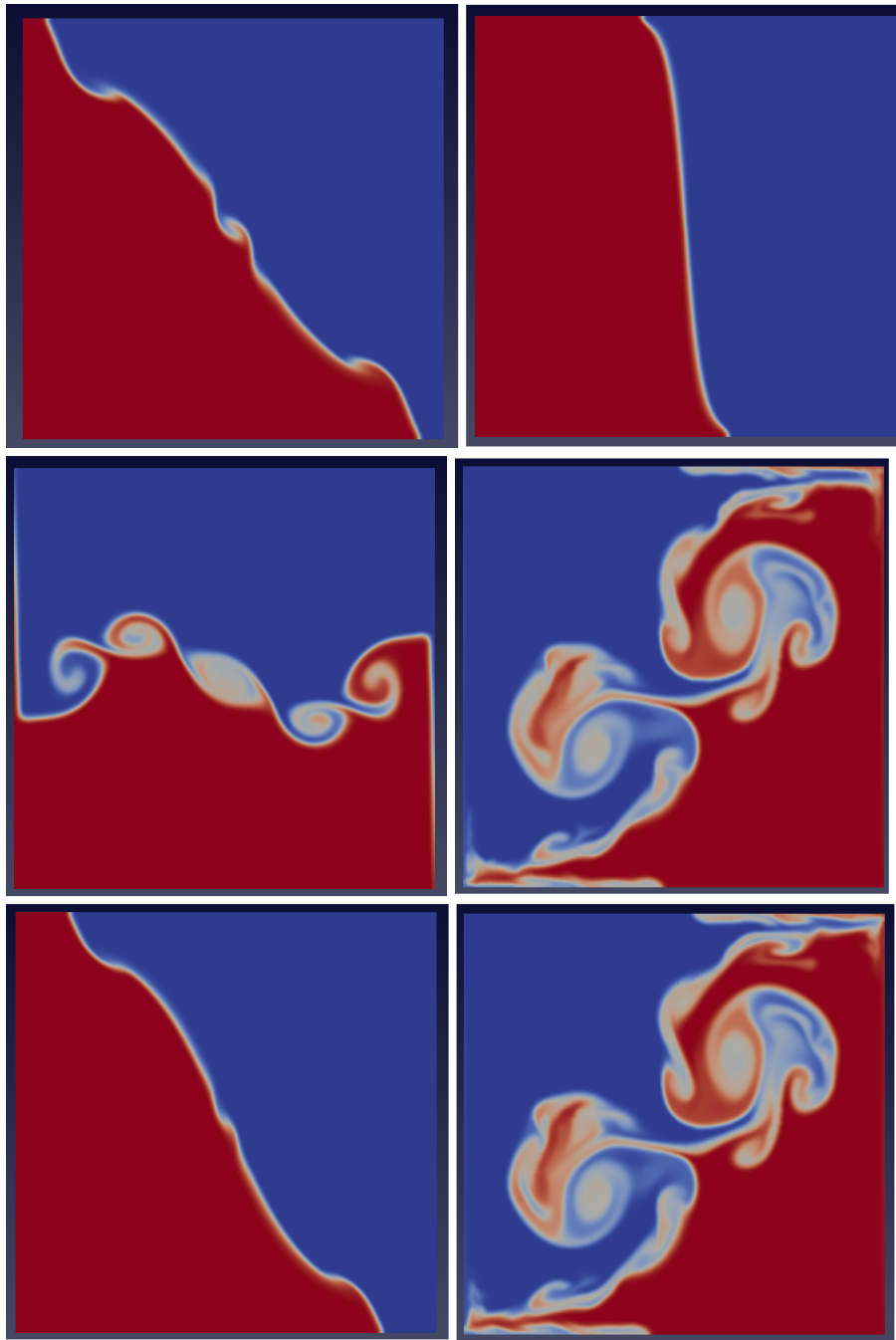
### **Tiempo 10 segundos**

Se elaboraron las gráficas plasmadas en la Figura **41**, en donde se aprecia el cambio drástico de velocidad; esta variación es debido al cambio de dirección de los dos fluidos en el punto de muestra, cuando el fluido más ligero pasa por allí se da una velocidad negativa puesto que va en dirección contraria al eje de referencia.



**Figura 41.** a) Gráfica con viscosidad Constante y variando el número de Atwood, para las diferentes orientaciones, b) gráfica 2 con número de Atwood constante y variando la viscosidad, para las diferentes orientaciones.

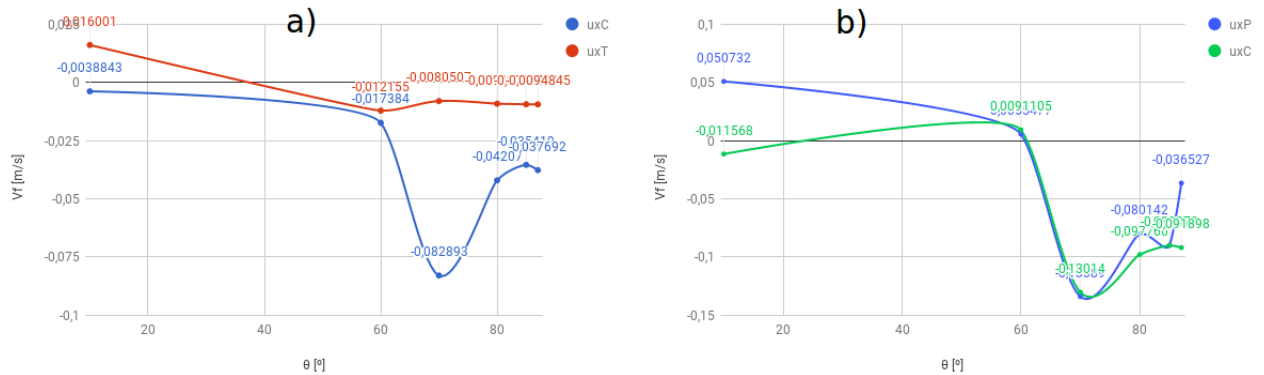
Como se aprecia en la Figura 42, la velocidad de los fluidos viene determinada por el número de Atwood y en el caso de esta orientación también por el ángulo de inclinación ( $\theta$ ), puesto que en las simulaciones 17 y 19 donde el ángulo de inclinación ( $\theta$ ) es simulado, se presentó mayor velocidad en el fluido rojo (pesado), el cual ha chocado con la pared al contrario del resto de simulaciones donde el fluido rojo aún no han alcanzado a llegar a la pared derecha.



**Figura 42.** Imagen de las simulaciones en un tiempo de 10 segundos.

## Tiempo 49 segundos

A diferencia del Tiempo 10 segundos, aquí las velocidades muestran menos variaciones debido a que el fluido ha chocado muchas veces con la pared haciendo que se establezca el fluido más denso en la parte inferior, además esta fase es más difusiva que la anterior, como se observa en la Figura 43.

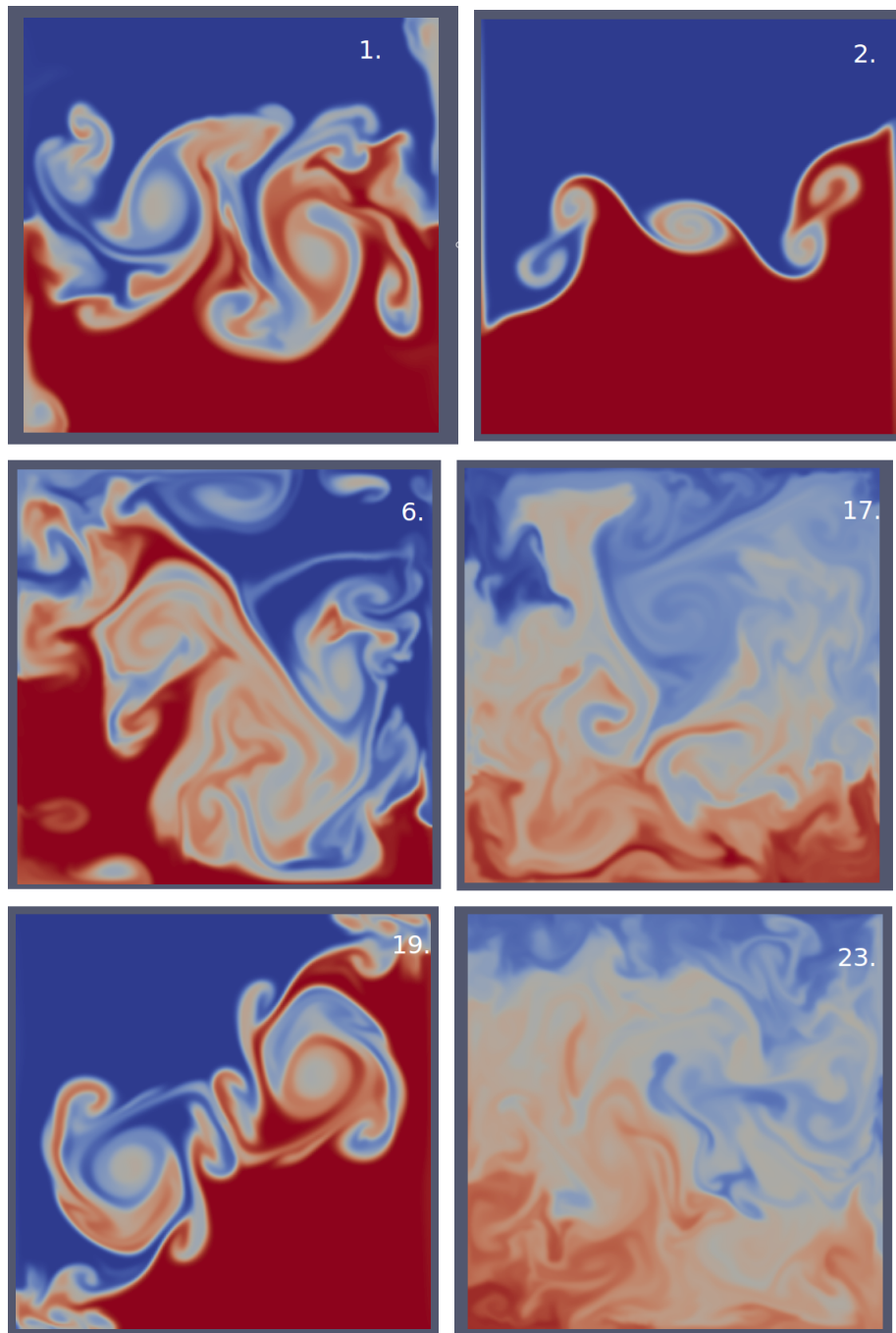


**Figura 43.** a) Gráfica con viscosidad Constante y variando el número de Atwood, para las diferentes orientaciones, b) gráfica 2 con número de Atwood constante y variando la viscosidad, para las diferentes orientaciones

A pesar de que en un tiempo de 49 segundos ya se cuenta con un desarrollo importante del flujo, los valores de las velocidades no tienen la misma dirección puesto que en el punto de toma de valores la velocidad de los diferentes fluidos varía en función de la gravedad junto con su dirección, además de su signo positivo cuando está en dirección a la derecha y negativo cuando está en dirección a la izquierda. Es por ello que en un determinado tiempo en el punto de muestra de las diferentes simulaciones va a capturarse valores positivos y negativos de velocidad. El sentido de velocidad cambia dado que los fluidos chocan contra la pared y se reflejan, puesto que la geometría es corta.

En la Figura 44, se observan los diferentes desarrollos de algunas orientaciones, por ejemplo: allí se aprecia como en un mismo tiempo el desarrollo de la mezcla

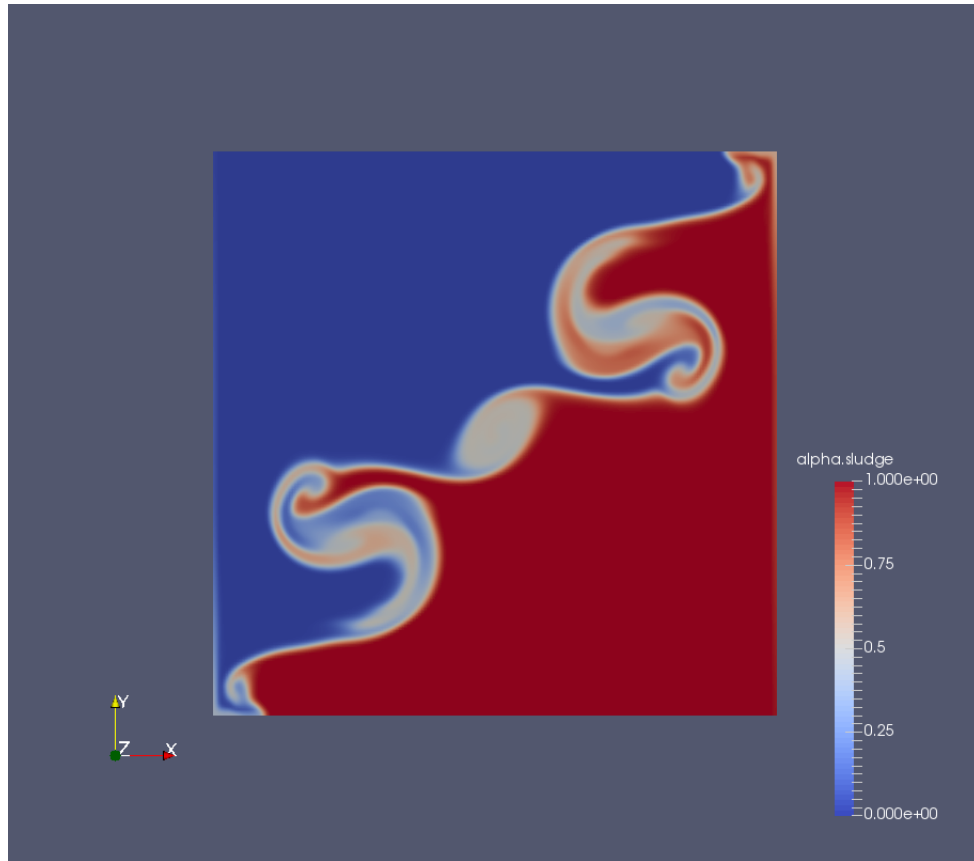
es más caótico que en la simulación 23 donde la velocidad del frente del mezclado es mayor, además se encuentra en el cuadro una buena difusión del fluido rojo (pesado) en el fluido azul (ligero). Luego se contempla un desarrollo más lento en la simulación 2 provocado por un número de Atwood bajo.



**Figura 44.** Imagen de las simulaciones en un tiempo de 49 segundos.

Comparando las Figuras **41** y **43**, se observa que aunque hay diferencias considerables en los valores netos de la velocidad, la tendencia de las gráficas es la

misma después de la orientación  $60^\circ$  la velocidad tiende a ser negativa, esto indica una tendencia de este flujo en esta cavidad en particular.



**Figura 45.** Gráficas de velocidad frente a tiempo, a la derecha gráfica 1, a la izquierda gráfica 2.

El desarrollo en estas inclinaciones trae a colación el estudio de difusividad de un fluido en otro, como se ha observado en las distintas figuras a lo largo de la sección, estas muestran efectos interesantes de difusión, por ejemplo la Figura 45, donde se observa una figura similar a una ola cuando choca con una pared rocosa en la playa, así mismo la figura es similar a lo que ocurriría en un oleoducto cuando el bombeo es detenido y los fluidos bombeados chocan con las paredes de las válvulas provocando efectos de mezclado entre los fluidos, lo cual no es conveniente para la industria. En contraste a esto, se observa que en una cavidad

como la presentada en la sección 6.2, no es fácil apreciar el choque de los fluidos y sus repercusiones.

Comparando las Figuras 42 y 44, se observa que las simulaciones 17 y 23 obtuvieron al final de tiempo de mezclado una fase muy difusa debido a los cuantiosos golpes de la mezcla con la cavidad; a diferencia de la simulación 2 que aún no se ha mezclado lo suficiente debido a la alta viscosidad que presenta, las otras simulaciones (1, 6 y 19) presentan un desarrollo avanzado pero menor a las simulaciones 17 y 23.

### 7.3. Orientación Vertical

En la orientación vertical es necesario desarrollar las simulaciones en 3D, dado que hay efectos internos que deben considerarse al momento del análisis a diferencia de las orientaciones inclinadas y horizontales. Los datos de las simulaciones realizadas se muestran en la Tabla 11.

Simulación	$At$	$\mu$	$\rho_1$	$\rho_2$	$\nu$	$D$	$g$
1	0,01	1,00E-03	1000	1020	1,00E-06	1,00E-06	9,81
2	0,01	1,00E-02	1000	1020	1,00E-05	1,00E-05	9,81
3	0,0004	1,00E-03	1000	1001	1,00E-06	1,00E-06	9,81
4	0,0004	1,00E-02	1000	1001	1,00E-05	1,00E-05	9,81
5	0,01	2,50E-02	1000	1020	2,50E-05	2,50E-05	9,81
6	0,0004	2,50E-02	1000	1001	2,50E-05	2,50E-05	9,81

**Tabla 11.** Datos utilizados en las simulaciones.

Las simulaciones se dispusieron de forma que se pudieran comparar las simulaciones 1 y 2, 3 y 4, donde se varían las viscosidades, mientras que el

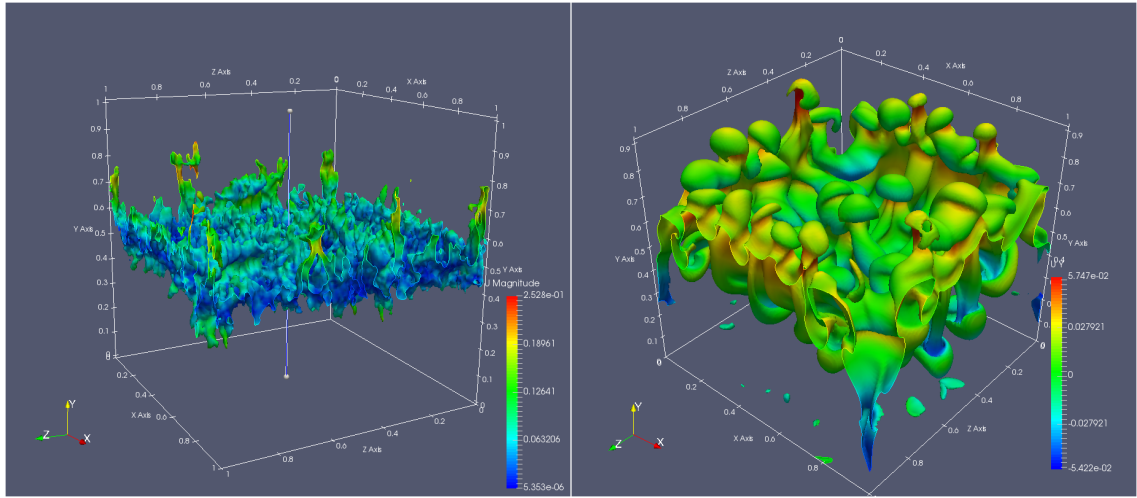
número de Atwood permanece constante. Para las simulaciones 5 y 6 se tomó una viscosidad baja y se varió el número de Atwood, luego se cotejaron las simulaciones 1 y 3, 2 y 4, que presentan la misma viscosidad y diferente número de Atwood; después, se contrastan las simulaciones 1, 2 y 5, con igual número de Atwood, diferente viscosidad y diferente enfoque al primer caso, para verificar qué pasará al poner una relación de número de Atwood de 25 y una relación de viscosidades de 25 y determinar para saber qué sucede con grandes relaciones de viscosidad.

De acuerdo con Boycott, el desarrollo del frente de mezcla se da más lento que para las otras orientaciones, reafirmando la hipótesis de Boycott. Por otra parte la máxima velocidad del frente de mezcla estuvo condicionada por el fluido menos denso (azul en la simulación). Los resultados de la velocidad máxima del frente de mezcla y el tiempo de desarrollo se muestran en la Tabla 12.

Simulación	Tiempo	V[m/s]
1	11	0,105
2	11	0,111
3	70	0,0111
4	70	0,0136
5	12	0,118
6	88	0,032

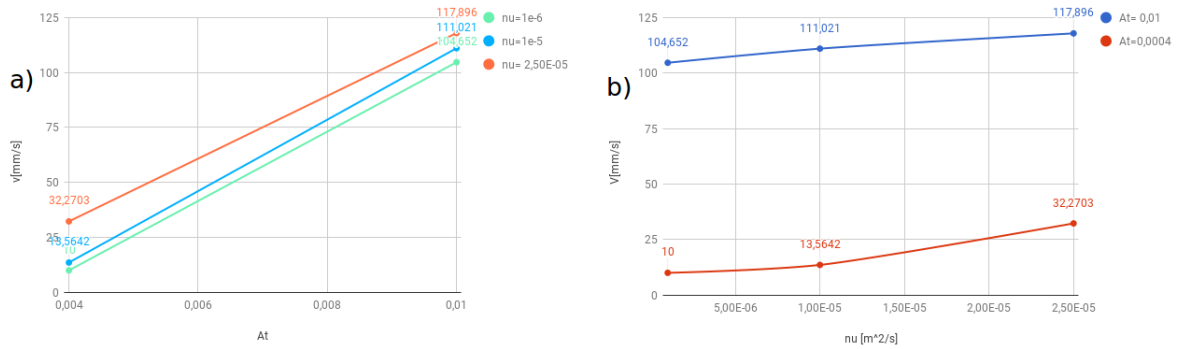
**Tabla 12.** Resultados obtenidos en la simulación.

Como se muestran en la Figura 46, las inestabilidades de Rayleigh-Taylor generan perfiles de frente de mezcla diferentes, entonces se hace necesario determinar la velocidad del frente de mezcla en un punto cercano al centro de la cavidad, en el cual la velocidad es máxima. Los datos registrados en la Tabla 12, están determinados por la consideración anterior.



**Figura 46.** Desarrollo de inestabilidades Rayleigh-Taylor, a la izquierda para una mezcla de  $At = 0,01$  a 11 segundos, a la derecha mezcla de  $At = 0,004$  en un tiempo 70 segundos.

Como se mencionó anteriormente, la viscosidad para esta orientación es de gran importancia, esta modela la inestabilidad Rayleigh-Taylor, además, delimita la rapidez del movimiento del fluido. En los datos de la Tabla 12, se muestra que la velocidad en las simulaciones 2, 4 y 6, tuvieron tiempos de desarrollo más altos que se pueden interpretar como que se desplazaron a menor velocidad. Las simulaciones 1, 2 y 5, registraron velocidades superiores. Lo anterior permitiría concluir que para el caso de orientación vertical además de la influencia del número de Atwood es importante considerar la influencia de la viscosidad.

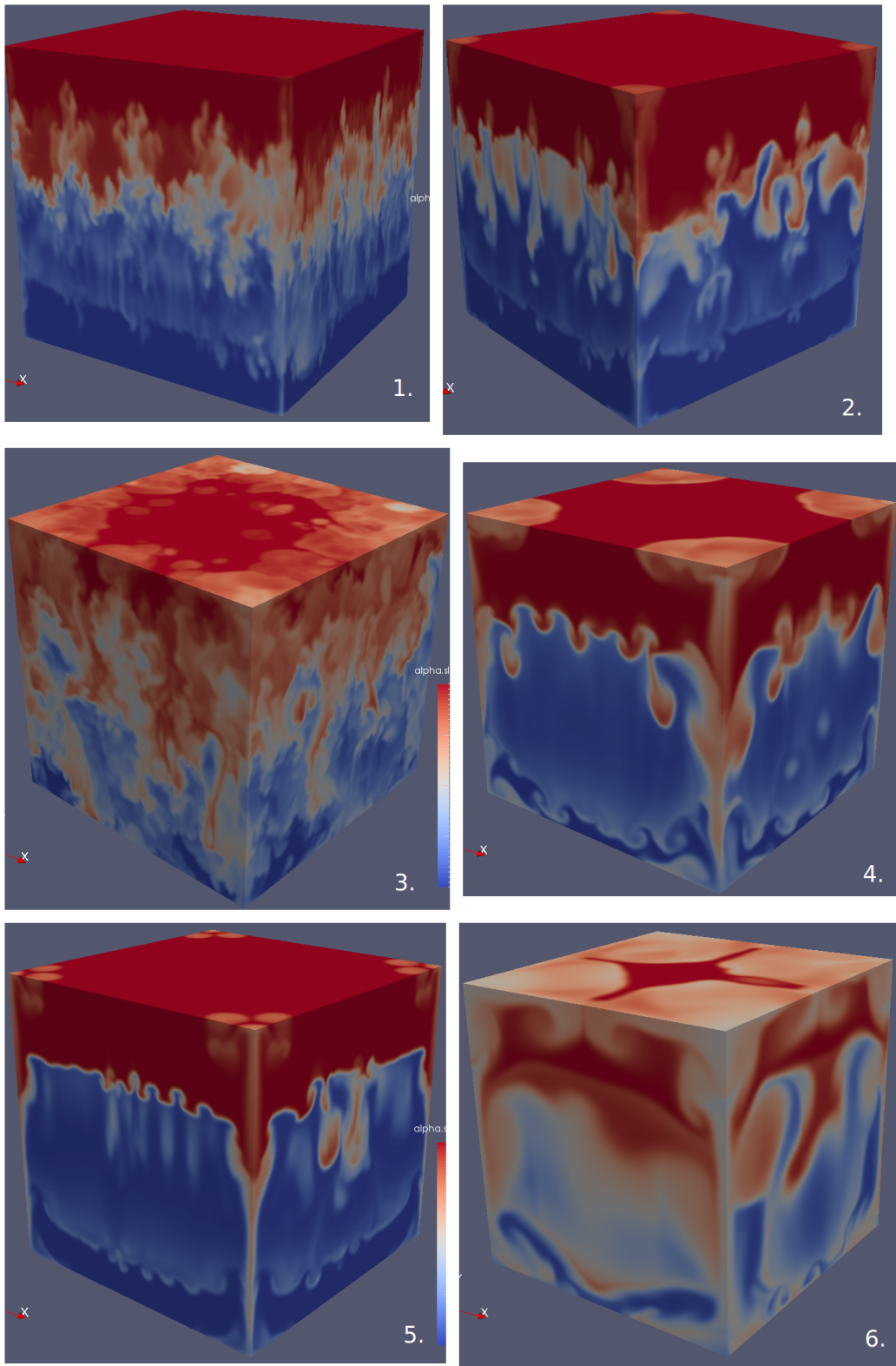


**Figura 47.** Desarrollo de inestabilidades Rayleigh-Taylor, a la izquierda para una mezcla de  $At = 0,01$  a 11 segundos, a la derecha mezcla de  $At = 0,004$  en un tiempo 70 segundos.

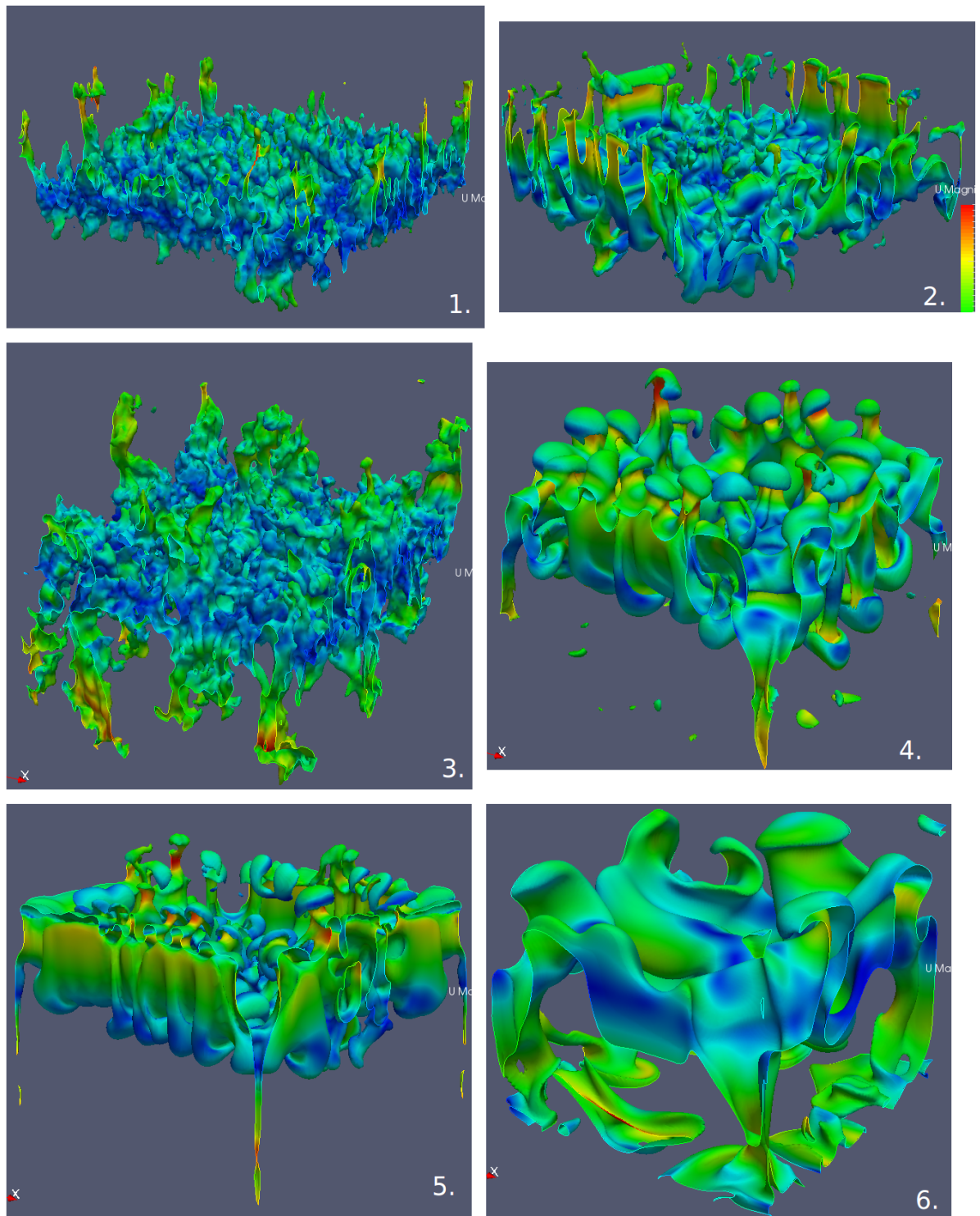
Con el objetivo de reafirmar las observaciones anteriores, en la Figura 47 se observa la variación de la velocidad del frente de mezcla respecto el número de Atwood (a) y la viscosidad (b). Como se observa el número de Atwood determina una gran variación en los valores de velocidad; para Bajos números de Atwood la influencia de la viscosidad es mayor que en el caso de números de Atwood mayores.

Al analizar las imágenes de la Figura 48, se observa un desarrollo del frente de mezcla diferente para cada caso simulado, de igual forma se puede apreciar cómo en los vértices de los cubos el frente de mezcla avanza más rápidamente.

En cuanto al frente de mezcla, al hacer un isocontorno concentración igual a 0.5, se observa que en la Figura 49 ocurren fundamentalmente dos tipos de perfiles: uno en forma de digitación (1, 2 y 3) y otro en forma de hongo (4, 5 y 6), ambas formas descritas en la literatura recopilada.



**Figura 48.** Imágenes de las simulaciones en el tiempo de muestra, simulaciones del 1 al 6.



**Figura 49.** Imágenes de las simulaciones en el tiempo de muestra a isocontorno a concentración igual 0.5, simulaciones del 1 al 6.

Esta orientación hace alusión a los fenómenos que ocurren de la interacción de flujos piroclásticos con el ambiente, por ejemplo, cuando en un primer momento de la erupción se arrojan verticalmente los gases concentrados a la atmósfera, esta interacción provoca que los gases se mezclen con el aire y con las corrientes de aire y se dispersen al área circundante; otro ejemplo son los hongos generados en la Figura 46, donde su similitud es análoga al hongo observado después de la explosión de una bomba. Estos, entre otros casos, hacen del estudio de esta orientación, un área de conocimientos de gran envergadura que ayudarán a describir mejor los fenómenos tanto naturales como causados por el hombre.

## 8. Conclusiones

El número de Atwood es el que determina el frente de mezcla, tanto en su velocidad como en su forma, (delimitada o difusa). Sin embargo a mayores viscosidades los perfiles del frente de mezcla son menos evidentes; en el caso de la orientación vertical, un mayor número de Atwood tiende a formar digitación, en caso contrario es proclive a formar estructuras similares a hongos.

Independiente de la geometría del canal, el frente de mezcla en las corrientes de gravedad se desarrolla principalmente en 2D, debido a que los efectos en la variación de la velocidad en el eje **Z** son prácticamente inexistentes. En las orientación horizontal e inclinada, esta simplificación reduce el tiempo de simulación; por otra parte en la orientación vertical, las simulaciones son necesarias realizarlas en 3D para observar el fenómeno de Rayleigh-Taylor.

Los fenómenos Kelvin-Helmholtz y Rayleigh-Taylor descritos en la literatura, fueron observados en las orientaciones horizontales e inclinadas y en la orientación vertical respectivamente. Desde un punto de vista cualitativo se pudieron replicar estos fenómenos, pero de un punto de vista cuantitativo los valores no fueron los mismos que los reportados en la literatura, dado que en los artículos no se encontraron la totalidad de los datos necesarios para la simulación; esto conllevó a realizar asunciones que derivaron en variaciones de los resultados obtenidos entre las simulaciones y la literatura recopilada.

Aunque OpenFOAM es una herramienta potente y con gran documentación, se presentaron interfaces en forma de cuadrícula debido a la división de la simulación en varios procesadores, esto cuando se realizaba el cálculo en paralelo de las simulaciones de la orientación vertical, no obstante, se pudo obtener resultados aceptables, pero es necesario tener en cuenta éste evento para la realización de

problemas futuros.

En los estudios paramétricos realizados para las diferentes orientaciones, variando tanto el número de Atwood como la viscosidad, se constató que el número de Atwood es el que domina el movimiento; en la orientación horizontal se visualizó el desarrollo del fenómeno de Kelvin-Helmholtz al moverse el frente de mezcla en una cavidad cúbica. Después, se observó que al chocar el frente de mezcla con la pared de la cavidad, se generaron salpicaduras en forma de pequeños remolinos. Así mismo en las orientaciones inclinadas se observa una velocidad máxima para una inclinación de  $85^\circ$  respecto a la vertical. Por otra parte en las inclinaciones verticales, se contempla el fenómeno de Rayleigh-Taylor, igualmente se evidenció una mayor influencia de la viscosidad, que la mostrada en otras orientaciones.

## 9. Recomendaciones

En este proyecto se trabajó con la configuración óptima presentada por OpenFOAM, en un futuro sería conveniente desarrollar un estudio, que contraste las diferentes formas de discretizar las ecuaciones que el software ofrece y cómo esto afecta los resultados obtenidos en los casos aquí estudiados.

Aunque los fenómenos mencionados se observan en la naturaleza y son de gran importancia para el estudio de la misma, se encontró poca literatura en Colombia referida a este tema; por esta razón se debe incentivar el estudio de estos fenómenos y sus posibles usos, en eventos como: las avalanchas de lodo que ocurren en la temporada de lluvia a lo largo del país, el movimiento de las corrientes de aire en las poblaciones, afectación de fauna debido al encuentro de ríos con diferentes niveles de contaminación, la afectación en las playas de Cartagena<sup>1</sup> por la contaminación procedente del río Magdalena, entre otros acontecimientos naturales.

El estudio de las corrientes generadas por gravedad también es de ayuda en procesos industriales, y su estudio podría resultar de ayuda en la optimización de procesos como: el flujo de combustibles en un oleoducto, mezclado de bebidas en plantas de embotellado, mezclado de compuestos químicos para las diversas industrias, entre otros.

Para finalizar se recomienda utilizar este proyecto y los fenómenos aquí descritos, como base para estudios posteriores que busquen generar un mejor entendimiento de las catástrofes naturales en Colombia y también para mejorar el entendimiento de procesos en la industria.

---

<sup>1</sup>TIEMPO, El. *Las aguas de la bahía de Cartagena: antes y durante el fenómeno del Niño*. 2017. URL: <http://www.eltiempo.com/multimedia/fotos/colombia10/aguas-cristalinas-de-la-bahia-de-cartagena/16498083>.

## Bibliografía

- BIRMAN, V. K., MARTIN, J. E. y MEIBURG, E. "The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 2. High-resolution simulations". En: *Journal of Fluid Mechanics* 537.-1 (2005), pág. 125. ISSN: 0022-1120. DOI: 10.1017/S0022112005005033. URL: [http://www.journals.cambridge.org/abstract{\\\_}S0022112005005033](http://www.journals.cambridge.org/abstract{\_}S0022112005005033).
- BIRMAN, V. K. y col. "Lock-exchange flows in sloping channels". En: *Journal of Fluid Mechanics* 577 (2007), pág. 53. ISSN: 0022-1120. DOI: 10.1017/S002211200600437X.
- BOYCOTT, A. E. *Sedimentation of Blood Corpuscles*. 1920. DOI: 10.1038/104532b0. URL: <http://www.nature.com/doifinder/10.1038/104532b0>.
- DE LA LANZA, G. *Diccionario de hidrología y ciencias afines*. 1999.
- DEBACQ, M. y col. "Buoyant mixing of miscible fluids of varying viscosities in vertical tubes". En: *Physics of Fluids* 15.12 (2003), págs. 3846-3855. ISSN: 10706631. DOI: 10.1063/1.1624838.
- DEBACQ, M. y col. "Self-similar concentration profiles in buoyant mixing of miscible fluids in a vertical tube". En: *Physics of Fluids* 13.11 (2001), págs. 3097-3100. ISSN: 10706631. DOI: 10.1063/1.1405442.
- FERZIGER, J H y PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics - J*. 2002.
- FLÓREZ, C. "Determinación del campo de flujo y de concentraciones de la interfase de dos fluidos incompresibles que se desplazan a través de una tubería usando el método de volúmenes finitos". Tesis de maestría. Universidad Industrial de Santander, 2015, pág. 156.
- HALLEZ, Yannick y MAGNAUDET, Jacques. "Effects of channel geometry on buoyancy-driven mixing". En: *Physics of Fluids* 20.5 (2008), págs. 1-10. ISSN: 10706631. DOI: 10.1063/1.2918379.
- HÄRTEL, Carlos, MEIBURG, Eckart y NECKER, F. "Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. Part 1. Flow topology and front speed for slip and no-slip boundaries". En: 418 (2000), págs. 189-212.

- HATCHER, T. "A Finite Volume Implementation of the Shallow Water Equations for Boussinesq Gravity Currents". Tesis de maestría. Auburn University, 2012, pág. 114.
- HATCHER, T. y VASCONCELOS, J. "Finite-Volume and Shock-Capturing Shallow Water Equation Model to Simulate Boussinesq-Type Lock-Exchange Flows". En: *Journal of Hydraulic Engineering* 139.12 (2013), págs. 1223-1233. ISSN: 0733-9429. DOI: 10.1061/(ASCE)HY.1943-7900.0000775.
- HUPPERT, Herbert E. y SIMPSON, John E. "The slumping of gravity currents". En: *Journal of Fluid Mechanics* 99.04 (1980), pág. 785. ISSN: 0022-1120. DOI: 10.1017/S0022112080000894. URL: [http://www.journals.cambridge.org/abstract{\\\_}S0022112080000894](http://www.journals.cambridge.org/abstract{\_}S0022112080000894).
- LOWE, RYAN J., ROTTMAN, JAMES W. y LINDEN, P. F. "The non-Boussinesq lock-exchange problem. Part 1. Theory and experiments". En: *Journal of Fluid Mechanics* 537.-1 (2005), pág. 101. ISSN: 0022-1120. DOI: 10.1017/S0022112005005069. URL: [http://www.journals.cambridge.org/abstract{\\\_}S0022112005005069](http://www.journals.cambridge.org/abstract{\_}S0022112005005069).
- MOTT, R. *Mecánica de fluidos*. Vol. Sexta. 2006.
- PAL, Soureshh. *Multi phase Solvers of OpenFOAM with governing equations*. URL: <https://www.scribd.com/document/273550286/Multi-phase-Solvers-of-OpenFOAM-with-governing-equations> (visitado 23-07-2017).
- ROTTMAN, J W y SIMPSON, J E. "Gravity currents produced by instantaneous releases of a heavy fluid in a rectangular channel". En: *Journal of Fluid Mechanics* 135 (1983), págs. 95-110. ISSN: 00221120. DOI: 10.1017/S0022112083002979. URL: [http://www.journals.cambridge.org/abstract{\\\_}S0022112083002979](http://www.journals.cambridge.org/abstract{\_}S0022112083002979).
- SÉON, T. y col. "Buoyancy driven miscible front dynamics in tilted tubes". En: *Physics of Fluids* 17.3 (2005), págs. 1-5. ISSN: 10706631. DOI: 10.1063/1.1863332.
- SÉON, Thomas. "Du mélange turbulent aux courants de gravité en géométrie confinée". Tesis de doctorado. Université Pierre et Marie Curie, 2006, pág. 181.

TIEMPO, El. *Las aguas de la bahía de Cartagena: antes y durante el fenómeno del Niño*. 2017. URL: <http://www.eltiempo.com/multimedia/fotos/colombia10/aguas-cristalinas-de-la-bahia-de-cartagena/16498083>.

WIKIPEDIA. *Atwood Number*. 2017. URL: <https://en.wikipedia.org/wiki/Buoyancy>.

– *Bouyancy*. 2017. URL: <https://en.wikipedia.org/wiki/Buoyancy>.

– *Número de Schmidt*. 2017. URL: [https://es.wikipedia.org/wiki/N%C3%BAmero\\_de\\_Schmidt](https://es.wikipedia.org/wiki/N%C3%BAmero_de_Schmidt).

## Anexo: Ejecutar el programa en SLURM

SLURM (Simple Linux Utility for Resource Management), es un gestor de trabajos implementado por GUANE, para ejecutar el programa.

```
#!/bin/bash
#SBATCH --partition=all
#SBATCH -o openFoam.%j.out      #Nombre del archivo de salida
#SBATCH --job-name=OpenFOAM    #nombre que se vera en squeue
#SBATCH --nodes=4              #Utiliza 4 nodos
#SBATCH --ntasks=80            #Un total de 80 nucleos
#SBATCH --tasks-per-node=20    #20 nucleos por nodos

cd ~/scratch/irueda/paralelo    #Ubicacion donde esta el caso a simular

#Prepara el ambiente de trabajo
export I_MPI_PMI_LIBRARY=/usr/local/slurm/lib/libpmi.so #implementar librerias
ulimit -l unlimited #Uso de memoria ram ilimitaado
export OMPI_MCA_btl=^openib

# Source tutorial run functions
. $WM_PROJECT_DIR/bin/tools/RunFunctions

# Set application name
application='getApplication'

rm -rf 0
cp -r 0.orig 0

time blockMesh      #Genera la malla
time setFields      #Define las fronteras
time decomposePar   #Descompone el caso en el numero de procesadores
```

```
#Ejecuta el programa paralelo
time srun --network=Devname=mlx4_0,Devtype=IB twoLiquidMixingFoam -parallel >

time reconstructPar #Reconstruye el caso
```

## Anexo: Código implementado

A continuación se muestra el código modelo implementado para la solución, es necesario hacer las modificaciones necesarias para simular cada caso. El código mostrado a continuación esta pensado para resolverse mediante calculo en paralelo es por ello que se agrega la librería *decomposeParDict*. Al lado de cada linea de código se encuentra una breve descripción de lo que significa.

### condiciones de frontera

En esta parte se define las condiciones de fronteras iniciales *fluido pesado(alpha.salt)*, *Presión*, *velocidad*, a continuación se muestra los códigos utilizados para ello, cabe resaltar que en las simulaciones la cara *frontback* se utiliza *empty* para 2D y en 3D se coloca igual *type* que las otras caras.

Archivo correspondiente al fluido de mezcla.

```
/*-----*- C++ -*-----*/
| ===== |
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 4.1 |
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / M a n i p u l a t i o n |
|*-----*/
```

```

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       alpha.salt;
}
// * * * * *

dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];           //Adimensional

internalField   uniform 0;                 //cero

boundaryField
{
    left
    {
        type          zeroGradient;
        //zeroGradient significa el graniente normal es cero
    }
    right
    {
        type          zeroGradient;
    }
    bottom
    {
        type          zeroGradient;
    }
    top
    {
        type          zeroGradient;
    }
    frontBack

```

```

    {
        type            zeroGradient;
    }
}

// *****

```

Archivo correspondiente a la presión.

```

/*-----*-- C++ -----*\
| ===== |
| \ \ / Field | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / Operation | Version: 4.1 |
| \ \ / And | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / Manipulation |
\*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       p_rgh;
}

// *****

dimensions      [1 -1 -2 0 0 0 0];
                //[masa longitud tiempo] (pa)

internalField   uniform 0;
                //valor del campo interno uniforme

boundaryField

```

```

{
    left
    {
        type                fixedFluxPressure;
        // ajusta el gradiente de presion para que la frontera de
        //flujo concuerde con la condicion de frontera de la velocidad
    }
    right
    {
        type                fixedFluxPressure;
    }
    bottom
    {
        type                fixedFluxPressure;
    }
    top
    {
        type                fixedFluxPressure;
    }
    frontBack
    {
        type                fixedFluxPressure;
    }
}

// *****

```

Archivo correspondiente a la velocidad.

```

/*-----*-- C++ *-----*\
| ===== |
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 4.1 |

```

```

/  \ \ /  A nd          / Web:      www.OpenFOAM.org  /
/  \ \ /  M anipulation /                               /
\*-----* /
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volVectorField;
    location     "0";
    object       U;
}
// * * * * *

dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];
                // [masa longitud tiempo] (m/s)

internalField   uniform (0 0 0);
                // valor del campo interno uniforme

boundaryField
{
    left
    {
        type          slip;
        //Deslizamiento, no hay pegajosidad tao=0 y velocidad en la cara != 0
    }
    right
    {
        type          slip;
    }
    bottom
    {
        type          slip;
    }
}

```

```

top
{
    type            slip;
}
frontBack
{
    type            slip;
}
}

// ***** //

```

En la carpeta *constant* encontraremos los archivos necesarios para describir los fenómenos, así como el archivo para definir las propiedades de los fluidos a simular.

Para los casos en que el recipiente esta inclinado se multiplica el valor de gravedad por  $\cos(\theta)$ , siendo  $\theta$  el ángulo descrito entre el recipiente y la horizontal.

```

/*-----*-- C++ -*-----*\
| ===== | |
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 4.1 |
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / M a n i p u l a t i o n | |
\*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        uniformDimensionedVectorField;
    location     "constant";
    object       g;
}

```

```

}
// * * * * *

dimensions      [0 1 -2 0 0 0 0];
                //[masa longitud tiempo] (m/s^-2)
value           (0 -9.77 0);
                //Valor en SI de la gravedad en bucaramanga

// *****

```

En *transportModel*, se coloca las dos fases (*water* y *salt*) que se van a simular, con sus respectivas propiedades reológicas.

```

/*-----*-- C++ -*-----*\
| ===== |
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 4.1 |
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / M a n i p u l a t i o n |
|*-----*\
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "constant";
    object       transportProperties;
}
// * * * * *

Dab            [0 2 -1 0 0 0 0]    1e-06;
                //[masa longitud tiempo] Dab: Coeficiente de difusion (m^2/s)
alphatab       [0 0 0 0 0 0 0]    1;
                //alphatab=1/sct(Schmidt number)

```

```

phases (salt water);    //tipos de liquidos

salt    //fase pesada
{
    transportModel  Newtonian;
    nu              [0 2 -1 0 0 0 0] 1e-06;
                    //Viscosidad dinamica (m^2/s)
    rho             [1 -3 0 0 0 0 0] 1000;
                    //densidad (kg/m^3)
}

water   //fase ligera
{
    transportModel  Newtonian;
    nu              [0 2 -1 0 0 0 0] 1e-06;
                    //Viscosidad dinamica (m^2/s)
    rho             [1 -3 0 0 0 0 0] 990;
                    //densidad (kg/m^3)
}

// ***** //

```

En el archivo *turbulenceProperties*, encontramos la descripción del flujo, en este caso trabajaremos una simulación con régimen laminar.

```

/*-----*-- C++ -*-----*\
| ===== | |
| \ \ / Field | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / Operation | Version: 4.1 |
| \ \ / And | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / Manipulation | |
\*-----*/
FoamFile

```





```

    );
}
right
{
    type wall;
    faces
    (
        (1 5 6 2)
    );
}
bottom
{
    type wall;
    faces
    (
        (0 1 5 4)
    );
}
top
{
    type wall;
    faces
    (
        (3 2 6 7)
    );
}
frontBack
{
    type wall;
    faces
    (
        (0 1 2 3)
        (4 5 6 7)
    );
}

```

```

    }
);

mergePatchPairs
(
);

// ***** //

```

En *controlDict*, encontramos los parámetros que delimitan el tiempo de simulación así como los pasos de tiempos en los que se guardan los resultados.

```

/*-----*-- C++ -*-----*\
| ===== |
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 4.1 |
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / M a n i p u l a t i o n | |
\*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       controlDict;
}

// ***** //

application    twoLiquidMixingFoam;
                //solver utilizado

startFrom      startTime;
                //comieza desde

```

```

startTime      0;
                //tiempo de inicio

stopAt         endTime;
                //para en

endTime        150;
                //tiempo final de parada

deltaT         0.05;
                //paso de tiempo

writeControl   adjustableRunTime;
                //ajustar cada cuanto se escribe una carpeta de tiempo

writeInterval  1;
                //cada 1 segundo se escribe una carpeta

purgeWrite     0;
                //limite en el numero de directorios de tiempo que se
                //almacena para sobrescribir los directorios de
                //tiempo en un ciclo basico (pagina U-114)

writeFormat    ascii;
                //formato de escritura

writePrecision 6;
                //relacionado con writeformat, (6) por defecto

writeCompression uncompressed;
                //uncompressed: sin compresion

timeFormat     general;

```

```

//formato para escribir los nombres de los directorios de tiempo

timePrecision 6;
//relacionado con timeformat, (6) por defecto

runTimeModifiable yes;
//cada vez que selea controldict

adjustTimeStep on;
//ajustar el espacio de tiempo durante cada simulacion

maxCo 0.5; //maximo numero de Courant
maxAlphaCo 0.5; //maximo numero de Courant para la otra fase
maxDeltaT 1; //maximo limite del paso del tiempo

// ***** //

```

Para desarrollar la simulación en paralelo es necesario dividir el problema en partes iguales y luego unirlo, de esto se encarga *decomposeParDict*, aquí también se aluden cuantos núcleos se van a utilizar.

```

/*-----* C++ *-----*\
| ===== |
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 4.1 |
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / M a n i p u l a t i o n | |
\*-----*/

FoamFile
{
    version 2.0;
    format ascii;
    class dictionary;
    location "system";
}

```



```

distributed      no;

roots            ( );

// *****

```

El archivo *fvSchemes*, se encarga de dar indicaciones para la resolución de las ecuaciones diferenciales y el método de discretización utilizado.

```

/*-----*-- C++ -*-----*\
| ===== |
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 4.1 |
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / M a n i p u l a t i o n | |
\*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSchemes;
}

//+++++Pagina U-118 para mas info+++++
// * * * * *

ddtSchemes      //Primera derivada del tiempo
{
    default      Euler;
                //Euler:transitoria, de primer orden implicita, limitada
}

```

```

gradSchemes          //gradiente
{
    default          Gauss linear;
}

divSchemes           //divergencia
{
    default          none;

    div(rhoPhi,U)   Gauss linear;
                    //eq continuidad
    div(phi,alpha)  Gauss vanLeer;
                    //phi= campo de flujo del liquido alpha.salt
    div(phi,k)       Gauss limitedLinear 1;
                    //phi= campo de flujo del liquido water
    div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
                    //eq de momentum
}

laplacianSchemes     //laplaciano
{
    default          Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes //interpolacion de valores punto a punto
{
    default          linear;
}

snGradSchemes        //componentes del gradiente
                    //normal a la cara de la celda
{
    default          corrected;
}

```

```
// ***** //
```

Para delimitar el solver se utiliza el archivo *fvSolution*.

```
/*-----*- C++ -*-----*\
| ===== |
| \\ / Field | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \\ / Operation | Version: 4.1 |
| \\ / And | Web: www.OpenFOAM.org |
| \\ / Manipulation |
|*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSolution;
}
// ***** //

solvers
{
    "alpha.salt.*"
    {
        nAlphaSubCycles      2;
        nAlphaCorr           1;

        solver               smoothSolver;
        smoother             GaussSeidel;
        tolerance            1e-9;
        relTol               0;
        nSweeps              1;
    }
}
```

```

p_rgh
{
    solver          GAMG;
    tolerance       1e-7;
    relTol          0.01;
    smoother        GaussSeidel;
}

p_rghFinal
{
    $p_rgh;
    relTol          0;
}

U
{
    solver          smoothSolver;
    smoother        GaussSeidel;
    tolerance       1e-7;
    relTol          0.1;
    nSweeps         1;
}

UFinal
{
    $U;
    relTol          0;
}
}

PIMPLE
{
    momentumPredictor  yes;

```

```

nOuterCorrectors    1;
nCorrectors         2;
nNonOrthogonalCorrectors 0;

pRefValue           0;
pRefPoint           (0.1 0.1 1);
}

// *****

```

En cuanto a delimitar el espacio que ocupa cada liquido al inicio, de esto se encarga *setFieldsDict*

```

/*-----*- C++ -*-----*/
| ===== |
| \ \ / Field | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \ / Operation | Version: 4.1 |
| \ \ / And | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ \ / Manipulation |
|*-----*|
FoamFile
{
    version    2.0;
    format     ascii;
    class      dictionary;
    object     setFieldsDict;
}
// *****

defaultFieldValues
    //definir cual fase es cual
(
    volScalarFieldValue alpha.salt 0
    volVectorFieldValue U (0 0 0)

```

```
);  
  
regions  
(  
    boxToCell  
    {  
        box (0 0 0) (0.5 1 1);  
            //region en la cual se va a ubicar el alpha.salt  
  
        fieldValues  
        (  
            volScalarFieldValue alpha.salt 1  
                //que en esta region existe(1), una fase de alpha.salt  
        );  
    }  
);  
  
// ***** //  
***** //  
***** //
```