

ESTUDIO NUMÉRICO DEL MOVIMIENTO DE PARTÍCULAS EN FLUIDOS MEDIANTE EL MÉTODO DE ELEMENTO FINITO^a

NUMERICAL STUDY OF THE MOVEMENT OF PARTICLES IN FLUIDS BY FINITE ELEMENT METHOD

JEISON VARGAS^b, CARLOS JACOME^c, CARLOS GIRALDO^d

Recibido 26-10-2016, aceptado 17-02-2017, versión final 24-02-2017.

Artículo Investigación

RESUMEN: En este trabajo se aborda el problema de un flujo bifásico, el cual consiste de la interacción de un fluido con partículas sólidas inmersas en él, debido a la dificultad teórica que aparece al calcular todos los esfuerzos provenientes de la interacción entre fluido-sólido o sólido-sólido, así como las condiciones de contorno; se propone un enfoque numérico en el que se simula el movimiento fundamentado en las ecuaciones macroscópicas tanto para el fluido como para las partículas sólidas. Se creó un compendio de programas en ROOT (ROOT, 2014)- Root es un entorno orientado a objetos para análisis de datos a gran escala desarrollado en el marco del experimento NA49 del CERN , <https://root.cern.ch/drupal->, que solucionan las ecuaciones de Navier-Stokes que describen la fase líquida usando el método de elemento finito, y para las partículas se usa un método explícito que soluciona las ecuaciones de movimiento de Newton, en donde conforme se realiza un paso en el tiempo, las posiciones de los sólidos y el campo de velocidades son calculadas iterativamente. La simulación numérica permite investigar la dinámica del sistema, y calcular tanto el movimiento de las partículas como el del fluido en cuestión, obteniendo de esta manera importantes características en el estudio de los flujos bifásicos, las cuales son contrastadas con resultados experimentales.

PALABRAS CLAVE: ecuación de movimiento de Newton; ecuación de Navier-Stokes; flujo bifásico; método del elemento finito; simulación.

ABSTRACT: In this paper we study a two-phase flow, which consists of the interaction between fluid with immersed solid particles to it, due to the theoretical difficulty that appears to calculate all the stress from the interaction of both solid-solid and fluid-solid, and the boundary conditions, we propose a numerical approach in which the movement is simulated, based on the macroscopic equations for both the fluid and the solid particles. We developed a compendium of programs in ROOT that solve the Navier-Stokes equations

^aVargas, J., Jacome, C. & Giraldo, C. (2016). Estudio numérico del movimiento de partículas en fluidos mediante el método de elemento finito. *Revista de la Facultad de Ciencias*, 6 (1), 39–56. DOI: 10.15446/rev.fac.cienc.v6n1.60740

^bUniversidad Distrital Francisco José de Caldas, Grupo de Física Teórica y Desarrollo de Software, Bogotá.
jeavargasf@correo.udistrital.edu.co

^cUniversidad Distrital Francisco José de Caldas, Grupo de Física Teórica y Desarrollo de Software, Bogotá.

^dUniversidad Distrital Francisco José de Caldas, Grupo de Física Teórica y Desarrollo de Software, Bogotá.

which describe the liquid phase using the finite element method, and an explicit method that solves the equations of motion of Newton for the solid particles; thus, at the step at the time increases the positions of the particles and the velocity field are calculated iteratively. The numerical simulation allows to understand the system dynamics, and calculate both the movement of the solid particles and the movement of the fluid. We got important features in the study of two-phase flows which are contrasted with experimental results.

KEYWORDS: finite element method; Navier-Stokes's equation; Newton's equations of motion; two-phase flow.

1. INTRODUCCIÓN

En el estudio de los flujos bifásicos se ha evidenciado que a pesar de que existan diversas teorías que indagan en las interacciones entre líquidos y sólidos (Hilton *et al.*, 2010; Hoomans, 2000; Deen *et al.*, 2007), no se conoce la naturaleza de las interacciones detalladas entre éstos, y su descripción total no ha sido aún recopilada en una teoría específica. De ahí que este trabajo procure proporcionar un enfoque más general en donde se puedan incluir todas las fuerzas de interacción entre las partículas y el fluido, por medio de los resultados numéricos para el campo de velocidades que resulta de la solución de la ecuación de Navier-Stokes. Una de las ecuaciones más completas que describe el movimiento de partículas sólidas en fluidos es la ecuación BBO (*Basset-Boussinesq-Oseen*) (Crowe *et al.*, 2012), la cual incluye términos de fuerza como el de la historia de Basset o el de masa añadida que generalmente son despreciados dado que complican bastante los cálculos. Sin embargo, aquí esas fuerzas aparecerán incluidas en la segunda ley de Newton, lo cual se verá evidenciado en conocer para cada partícula sólida su trayectoria $X(t)$. Existen trabajos experimentales sobre este fenómeno, tal como los estudiados en Werther (1999), Fortes *et al.* (1987), Huang *et al.* (2017), estos consisten básicamente en el estudio experimental de partículas en lechos fluidizados de dos o tres dimensiones, y sirven de sustento para contrastar los resultados acá obtenidos. El montaje experimental (Fortes *et al.*, 1987), consta de una cama o lecho de dos dimensiones presentado en la Figura 1. El fluido de trabajo que se suministra es *agua* de un tanque a presión a través de una válvula de aguja. Esta válvula permite un control fino de la velocidad de flujo de modo que hay una presión de trabajo bastante estable en la entrada del lecho fluidizado.

Con el fin de resolver el problema de las interacciones entre el sólido y el líquido, se toman como punto de partida las ecuaciones más generales y confiables que describen el comportamiento de los sólidos y de los fluidos. Estas son las ecuaciones de Navier-Stokes (1) para el líquido y las ecuaciones de Newton (2) para las partículas sólidas. Dada la complejidad connatural que aparece al pretender solucionar estas dos ecuaciones, que ciertamente están acopladas, es necesario abordar una solución numérica, permitiendo así obtener una descripción más exacta del problema, como lo es calcular el campo de velocidades, las trayectorias de las partículas sólidas, los esfuerzos que el fluido realiza sobre los sólidos y el movimiento inducido por parte de los sólidos en el fluido. De esta

manera, el dominio de flujo es discretizado para la implementación del método del elemento finito y se usa un esquema explícito para las ecuaciones de movimiento de Newton. Hay muy pocos trabajos en simulaciones tales como Patankar *et al.* (2000), Hu *et al.* (2001), además un desarrolló llamado *DSD / ST* (Deforming-Spatial-Domain/Space-Time), que es un procedimiento para los cálculos de elementos finitos que involucran fronteras móviles e interfaces (Tezduyar *et al.*, 1992; Tezduyar *et al.*, 1992b), los cuales son un importante precedente, porque uno de los más grandes retos de este trabajo consiste en manejar las fronteras conforme avanza el tiempo, dado que el número de partículas sólidas es muy grande, y realizar un enmallado dinámico que también cambie con el tiempo, que sea estable y que proporcione la solución para el campo de velocidades. De tal manera también se implementa un criterio de convergencia para dar validez a los resultados numéricos. Existen otros tipo de simulaciones que toman variantes del método de elemento finito (Rutger *et al.*, 2007; Chen *et al.*, 2017; Lee *et al.*, 2008; Zhao *et al.*, 2014), con el fin de calcular las fuerzas de interacción cuando las fronteras de las partículas sólidas se encuentran, aunque, en algunas no se toma en cuenta el cambio de el campo de velocidades por la presencia de las partículas sólidas tal como se hace en el presente artículo.

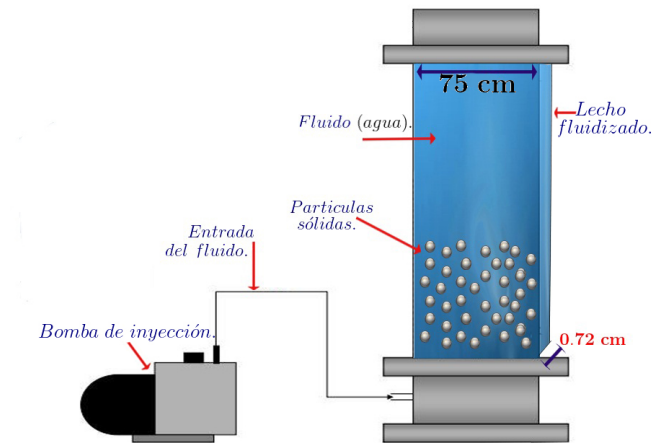


Figura 1: Aparato para crear lechos fluidizados bidimensionales. Fuente: Elaboración propia.

2. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

En este problema se considera un flujo bidimensional en un canal infinito de anchura W . El fluido en el canal se toma como *Newtoniano* e *incompresible*, se denotará su densidad como ρ_f y su viscosidad dinámica como μ_f . La coordenada x se toma en la dirección axial, es decir en la dirección del campo gravitacional e y está en la dirección del ancho del canal (perpendicular), como se muestra en la Figura 2. Hay N cilindros rígidos de diámetro d y densidad ρ_s , los cuales estarán en movimiento

dentro del canal, t es el tiempo, Ω_t es la región ocupada por el fluido para un tiempo (t) y Γ_t es la frontera de esta región, el segundo subíndice para la frontera Γ_{1i} , mostrado en la Figura 2, permite reconocer la frontera entre el cilindro i -ésimo y el fluido. Supongase que el centro del cilindro i -ésimo, donde $i = 1, 2, \dots, N$ se encuentra en la posición (X_i, Y_i) , su ángulo de rotación con respecto al ángulo inicial es Θ_i , sus componentes de la velocidad en la dirección x e y son (U_i, V_i) y su velocidad angular es Ω_i . En la Figura 2 se muestra la situación para $N = 2$ en el canal.

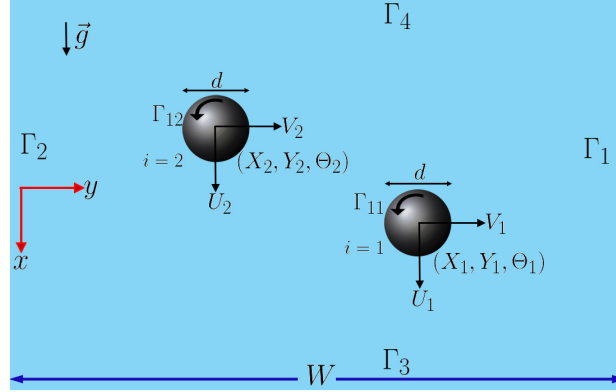


Figura 2: Esquema para dos partículas sólidas. Fuente: Elaboración propia.

Para este caso el movimiento del fluido y de los cilindros está acoplado, ya que el fluido ejerce fuerzas y torques sobre los cilindros, cambiando así el movimiento de estos, y a su vez, el movimiento de los cilindros induce el flujo en el fluido por el cambio de la posición de la frontera y las velocidades. Entonces, se hace necesario utilizar la ecuación de *Navier - Stokes* (Kundu *et al.*, 2016; Donea & Huerta, 2003), ya que la velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ y la presión $p(\mathbf{x}, t)$ en el líquido se rigen por estas ecuaciones:

$$\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \rho_f \mathbf{g} - \nabla p + \mu_f \nabla^2 \mathbf{u} \quad \text{en } \Omega_t, \quad \forall t \in (0, T) \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

\mathbf{g} es la gravedad, $(0, T)$ es un intervalo de tiempo de cómputo y $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ es la condición de incompresibilidad.

Por otra parte, el movimiento de los cilindros satisface la segunda ley de Newton, la cual se puede escribir de una forma más generalizada comprometiéndolos los torques y las fuerzas simultáneamente,

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{U}_i(t)}{dt} = \mathbf{F}_i \quad (2)$$

y la velocidad de la partícula i -ésima,

$$\frac{d\mathbf{X}_i(t)}{dt} = \mathbf{U}_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad \forall t \in (0, T) \quad (3)$$

En donde $\mathbf{M} = \text{diag}\{m, m, I\}$ es la matriz diagonal de masa, I el momento de inercia de los cilindros y m es su masa, $\mathbf{U}_i(t) = (U_i, V_i, \Omega_i)$ es el vector velocidad, $\mathbf{X}_i(t) = (X_i, Y_i, \Theta_i)$ es el vector de posición, $\mathbf{F}_i(t) = (F_{ix}, F_{iy}, F_{im})$ es el vector de fuerza que actúa sobre el cilindro i -ésimo. Es de resaltar la importancia que el vector de fuerza contiene la fuerza total que actúa sobre cada partícula, incluyendo un término de cuerpo como consecuencia de la gravedad y un término de superficie resultante de los esfuerzos del fluido sobre el sólido.

Las ecuaciones diferenciales (1) y (2) que describen el movimiento de las partículas y del fluido deben satisfacer condiciones de frontera Γ_t , en general Γ_t se puede dividir en dos partes $(\Gamma_t)_g$ y $(\Gamma_t)_h$ conocidas como condiciones de frontera de Dirichlet y Neumann respectivamente (Chung, 2010), que consisten en el conocimiento del campo de velocidades en la frontera y del esfuerzo básicamente.

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_g \text{ en } (\Gamma_t)_g \quad \forall \quad t \in (0, T) \quad (4)$$

y

$$\boldsymbol{\tau} \mathbf{n} = \mathbf{h} \text{ en } (\Gamma_t)_h \quad \forall \quad t \in (0, T) \quad (5)$$

Aquí \mathbf{u}_g es un valor prescrito de la velocidad y \mathbf{h} el esfuerzo, sobre los cuales se discutirá su valor ulteriormente, $\boldsymbol{\tau} = -p\mathbf{I} + \mu_f(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$ es el tensor de esfuerzos y \mathbf{n} es el vector normal en $(\Gamma_t)_g$.

Los cilindros que se estudian son más densos que el fluido $\{\rho_s > \rho_f\}$, y parten de un fluido inicialmente en reposo. Haciendo referencia a la Figura 1, se denota como Γ_{1i} la frontera en la superficie del cilindro i -ésimo. También hay que hacer uso de la condición de no deslizamiento, la cual enuncia que la velocidad del fluido en un punto (x, y) en Γ_{1i} es igual a la velocidad del cilindro en el mismo punto, lo que se puede escribir de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= [U_i - \Omega_i(y - Y_i)]\hat{e}_x + [V_i + \Omega_i(x - X_i)]\hat{e}_y \\ \forall (x, y) \text{ que satisfaga } (x - X_i)^2 + (y - Y_i)^2 &= d^2/4 \end{aligned} \quad (6)$$

En las dos fronteras de los canales estacionarios Γ_1 y Γ_2 , la condición de no deslizamiento exige que la velocidad del fluido sea cero. Teóricamente el canal es infinitamente largo, aunque el dominio computacional se toma lejos de los cilindros con el fin de disminuir el enmallado. Por lo tanto, en el límite Γ_3 , el cual se encuentra lo bastante alejado de los cilindros se supone que la perturbación causada por el movimiento de los cilindros es muy pequeña hasta el punto de hacerse cero, de esta manera,

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_1, \Gamma_2 \text{ y } \Gamma_3 \quad (7)$$

Y muy por detrás del último cilindro, en la frontera Γ_4 , se aplica la condición de tracción libre, lo que implica que la fuerza debida al esfuerzo es nula.

$$\boldsymbol{\tau} \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_4 \quad (8)$$

Además, si se supone que el líquido está inicialmente en reposo, se tienen las siguientes condiciones iniciales: Su velocidad es cero y la presión es hidrostática, y los cilindros tienen una posición inicial bien definida, lo que se reduce a:

$$\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{0} \quad \text{en } \Omega_0, \quad (9)$$

$$\mathbf{X}_i(0) = \mathbf{X}_{i0} \quad \text{y} \quad \mathbf{U}_i(0) = \mathbf{0} \quad \text{Para } i = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (10)$$

En el caso donde el número de partículas es muy grande, se hizo necesario recurrir a generar números aleatorios dentro del dominio, para así establecer las componentes de los vectores de posición inicial $\mathbf{X}_i(0)$, siempre y cuando se garantice que dos partículas no se encuentren en el mismo lugar en $t = 0$ y que se encuentren dentro del canal.

Entonces, para un tiempo mayor que cero, se dejan los cilindros libres para que se desplacen dentro del fluido, y lo que se busca es conocer el movimiento de estos cilindros $\mathbf{X}_i(t)$ y el campo de velocidades para el fluido $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, con el fin de calcular la velocidad de cada uno de los cilindros mediante la condición de no deslizamiento (6) para así determinar $\mathbf{U}_i(t)$.

3. METODOLOGÍA

El desarrollo de esta simulación compromete aplicar el Método del elemento finito para las ecuaciones de Navier-Stokes descrito (Chung, 2010; Rannacher, 2000), de igual manera solucionar la ecuación de Newton de manera explícita, en busca de ilustrar a manera general el procedimiento se diseñó el diagrama de flujo mostrado en la Figura 3.

3.1. Esquema Explícito

El siguiente esquema corresponde al esquema explícito para la solución de las ecuaciones de movimiento de Newton.

1. **Inicio:** Se establecen las condiciones iniciales para el campo de velocidad y la presión del fluido

$$t_0 = 0, \quad n = 0 \quad (\text{donde } n \text{ es el índice para el paso de tiempo.})$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}(t_0), 0) = 0, \quad p(\mathbf{x}(t_0), 0) = \rho_f g x(t_0) \quad (11)$$

y se definen los vectores iniciales de posición y velocidad para cada una de las partículas.

$$\mathbf{X}_i(t_0) = \mathbf{X}_{i0}, \quad \mathbf{U}_i(t_0) = 0, \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, N \quad (12)$$

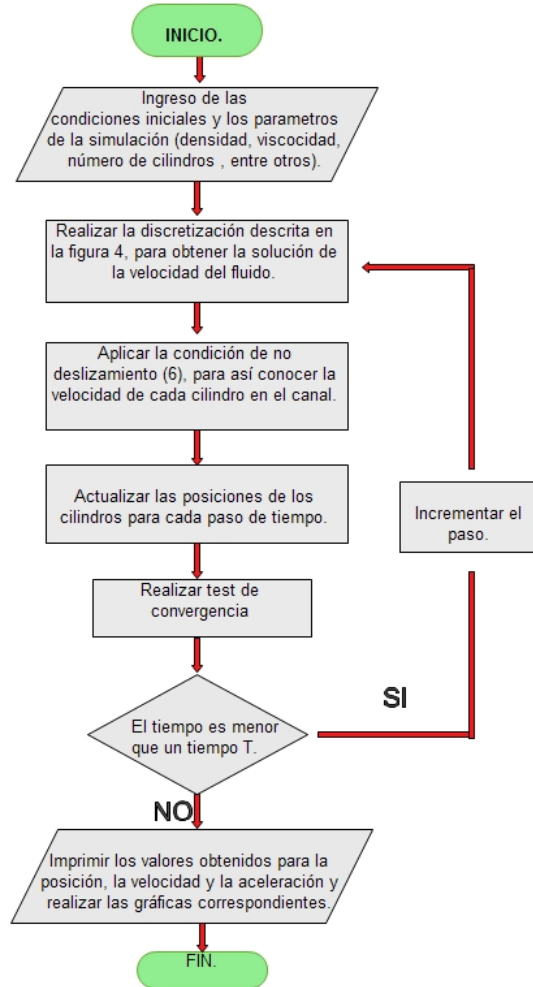
ALGORITMO DE LA MODELACIÓN NUMÉRICA.

Figura 3: Diagrama de flujo para el esquema numérico. Fuente: Elaboración propia.

2. **Actualización:** Escogiendo un paso de tiempo apropiado Δt_{n+1} .

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t_{n+1}$$

$$\mathbf{X}_i(t_{n+1}) = \Delta t_{n+1} \mathbf{U}_i(t_n) \quad (13)$$

y

$$\mathbf{U}_i(t_{n+1}) = \mathbf{U}_i(t_n) + \mathbf{a}_i(t_n) \Delta t_{n+1} \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, N \quad (14)$$

Donde, $\mathbf{a}_i(t_n)$ representa la aceleración del cilindro i -ésimo, que puede ser obtenida a partir de la ecuación (2) multiplicando por la inversa de la matriz diagonal de masa a ambos lados.

$$\mathbf{a}_i = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{F}_i \quad (15)$$

En donde $\mathbf{M}^{-1} = \text{diag} \left\{ \frac{1}{m}, \frac{1}{m}, \frac{1}{I} \right\}$ representa la inversa de la matriz diagonal de masa.

3. **Remallado y proyección:** Al obtener las posiciones $\mathbf{X}_i(t_{n+1})$ de los cilindros, se genera una nueva malla $\mathbf{x}(t_{n+1})$ y el campo de velocidades $\mathbf{u}(\mathbf{x}(t_n), t_n)$ tiene que ser proyectado en el nuevo enmallado $\mathbf{u}(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_n)$.
4. En la nueva malla $\mathbf{x}(t_{n+1})$, con $\mathbf{u}(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_n)$ como valores iniciales y $\mathbf{U}_i(t_0)$ prescrito en la superficie de los cilindros, se realiza la discretización explicada en la sección 3.2 con el fin de obtener la solución para la velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_{n+1})$, y para que calcule las fuerzas en los cilindros $\mathbf{F}_i(t_{n+1})$.
5. **Convergencia:** Para esta condición, se comparan dos valores de la velocidad para un tiempo fijo, esto es

$$\lambda = \| \mathbf{U}_i^{(k)}(t_{n+1}) - \mathbf{U}_i^{(k-1)}(t_{n+1}) \| \quad (16)$$

Donde $\mathbf{U}_i^{(k)}(t_{n+1})$ es el valor de la velocidad de la partícula a un valor fijo t calculado a partir de un número k de iteraciones, si λ es un valor muy grande comparado con un valor anterior entonces los valores no están presentando convergencia, de tal manera que el programa en este punto se romperá, de lo contrario,

$$\mathbf{U}_i^{(k)}(t_{n+1}) = \mathbf{U}_i(t_{n+1}) \quad (17)$$

el criterio anterior se tiene que realizar para cada una de las partículas y además para el campo de velocidades. En las iteraciones del esquema para las ecuaciones de Newton, las fuerzas que actúan en los cilindros y los residuos de la iteración son monitoreados para así garantizar la convergencia del campo de velocidades en cada paso de tiempo.

La escogencia del paso en el tiempo depende de algunos factores, en particular un criterio para escoger el paso es limitar la distancia que el cilindro pueda desplazarse conforme avanza el tiempo, así como restringir el aumento máximo de las velocidades en los cilindros y evitar las colisiones entre los sólidos y entre ellos con las paredes del canal. Además de eso hay que dar una estimación inicial para la velocidad de los cilindros. Dicha estimación usualmente causa variaciones en la iteración, de modo que se requieren más iteraciones para alcanzar la convergencia, e incluso así en algunos casos los programas se rompen.

6. Si el tiempo es menor que un tiempo T correspondiente a la longitud del intervalo de interés, entonces incrementar n y empezar en el paso dos de nuevo, de lo contrario detener el programa.

Dificultades La simulación numérica conlleva con sigo algunas dificultades, entre ellas se encuentra programar la simulación de tal manera que genere un remallado automático, ya que este se debe

realizar a cada paso de tiempo, y debe corresponder con las posiciones de las partículas en ese instante. Además, aparece la dificultad de proyectar el campo de velocidades en la malla que aparezca de incrementar el paso de tiempo, y por supuesto lograr que los programas creados para discretizar las ecuaciones acopladas de Navier-Stokes y de Newton sean tanto eficientes como estables.

Por otra parte, el programa ROOT, aunque fue creado por físicos, es generalmente usado en física de altas energías en el CERN, y no se cuentan con muchos trabajos en el campo de la dinámica de fluidos, pero dado que está diseñado para ofrecer una gran eficiencia computacional y cuenta con herramientas matemáticas, del álgebra matricial, visualización y análisis de gráficas, es muy útil para este tipo de trabajos que requieren de simulaciones numéricas y del análisis de los datos que se obtengan. De modo que se está usando una herramienta computacional de gran significación creada en uno de los experimentos más importantes de la ciencia e incursionando en un campo en el cual no existen trabajos a la fecha.

3.2. Discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes

Se realiza una aproximación unidimensional al problema, implementando el elemento finito, a través de una interpolación de Lagrange (Chung, 2010), asumiendo la simetría de la distribución de los cilindros en el canal, se realiza un mallado que responde a la localización de los cilindros. El canal creado que se muestra en la Figura 4, es uno de los resultados obtenidos apartir de los programas desarrollados en *Root*; éstos permiten crear N partículas dentro del canal y observar su evolución en el tiempo mediante el uso del esquema explicado en la sección 3.1, de igual manera, los cálculos para la ecuación de Navier-Stokes se hicieron en este programa y las gráficas a partir de los datos obtenidos.

Se encontró que para que la simulación fuese más estable, es conveniente aumentar la densidad de los elementos y nodos cerca de las partículas sólidas como se muestra en Figura 4, ya que la mayor interacción entre el fluido y los cilindros se da justamente en su frontera y contorno más cercano; de esta manera también se contribuye a disminuir el error de discretización, ya que la malla está siendo refinada conforme avanza el tiempo.

3.2.1. Método de Galerkin

La idea general de esta formulación de elemento finito es aproximar la variable de la ecuación diferencial como una combinación lineal de funciones de prueba ϕ_i ,

$$\bar{u}(x, y) = \sum_{i=1}^n C_i \phi_i \quad (18)$$

Donde C_i son constantes y las funciones de prueba que se han escogido deben satisfacer todas las condiciones globales de contorno para este problema en cuestión.

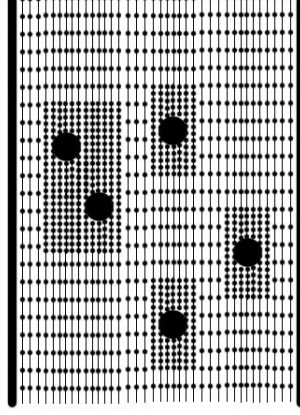


Figura 4: Discretización unidimensional del canal para $N = 5$, resultado de la simulación en Root. Fuente: Elaboración propia.

En este caso particular, la aproximación se realiza sobre la velocidad resultante de la ecuación diferencial de Navier-Stokes, por lo cual aparece un residuo (ε) proveniente de aproximar la solución, la idea básica es entonces construir un proceso matemático en el cual dicho error que aparece se minimice, de tal manera que se haga nulo en el sentido ponderado. Esto se logra mediante una proyección ortogonal o producto interno entre las funciones de prueba ϕ_i y el residuo en el dominio ε , de modo que:

$$\int_{\Omega} \varepsilon \phi_i d\Omega = (\varepsilon, \phi_i) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (19)$$

Uno de los pasos mas cruciales en el análisis del método es la escogencia de las funciones de interpolación, ya que pueden o no converger a la solución de la ecuación diferencial en cuestión; en general, las funciones de interpolación son polinomios de cierto grado o productos de éstos; para este caso se hizo la escogencia de la función de interpolación de Lagrange L_N , la cual se define como:

$$L_N = \prod_{M=1, M \neq N}^n \frac{x - x_M}{x_N - x_M} \quad (20)$$

Aquí el elemento es dividido en segmentos de la misma longitud en n nodos, como se muestra en la figura 5.

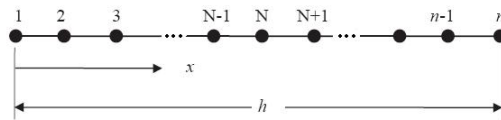


Figura 5: Discretización unidimensional mediante polinomios de Lagrange. Fuente: Elaboración propia.

Los polinomios de Lagrange se eligieron ya que satisfacen las condiciones de contorno, y su grado es de primer orden, debido a que es menester conocer los esfuerzos que aparecen de la interacción entre el fluido y las partículas sólidas, para lo cual basta con conocer la primera derivada de la velocidad, aunque dada esta escogencia se debe aumentar el mallado para que disminuya el error, también es necesario incrementar la densidad de la malla alrededor de los cilindros, porque de otra manera la iteración podría no converger.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para el primer cómputo se eligió que el fluido fuese agua, $\rho_f = 1000Kg/m^3$, y por tanto $\mu_f = 1 \times 10^{-2} Poise = 1 \times 10^{-3} N \cdot s/m^2$, además la densidad de los sólidos se escogió tan solo un poco mayor que la del agua $\rho_s = 1100Kg/m^3$. Por otra parte, este cómputo se realizó con tan solo un partícula sólida en el canal ($N = 1$), y los resultados que se obtuvieron tanto para la posición como para la velocidad se muestran gráficamente en las Figuras 6 y 7 respectivamente.

Como se mencionó, para la discretización se usa el mallado descrito en la Figura 5, el diámetro del cilindro es $d = 2cm$ y el ancho del canal es $W = 2m$. En este cómputo el cilindro se dejó caer desde el centro del canal y se obtuvo su posición como función del tiempo, la cual se muestra en la Figura 6, allí se evidencia un movimiento que tiende a mantener una velocidad constante, lo que se sustenta en la Figura 7, la cual muestra que la velocidad aumenta hasta su máximo en unos dos segundos y después de esto propende a mantener un valor constante en el transcurso del tiempo.

Esta tendencia que muestra la velocidad a permanecer constante da buen indicio de los resultados obtenidos para este caso, ya que este comportamiento es justamente el que la Ley de Stokes explica (Kundu *et al.*, 2016), físicamente las fuerzas de arrastre y gravitatoria que actúan sobre el sólido se equiparan, lo que conlleva a que la aceleración del sólido se haga nula, por lo cual la velocidad tiende a ser constante, alcanzando así un valor crítico o máximo al moverse dentro de un fluido, tal como ocurrió en este caso, más aún haciendo uso de dicha ley la velocidad crítica es de $1.9m/s$, obteniendo un error de menos del 1 % respecto a la media de los valores obtenidos numéricamente. Otro de los resultados importantes que se obtuvieron mediante las simulaciones realizadas, corresponden al caso de dos partículas sólidas en el canal ($N = 2$), en donde los parámetros que se escogieron fueron; de nuevo agua y la densidad de los sólidos ligeramente mayor a la del agua $\rho_s = 1100Kg/m^3$. El diámetro de los dos cilindros es igual $d_1 = d_2 = 0.5cm$, y el ancho del canal es $W = 20cm$. En este cómputo se ubicó el primer sólido en una posición con un mayor valor de la coordenada x respecto al segundo, es decir, $X_1 > X_2$, análogo a la Figura 2, y a partir de dicha configuración, se estudió el comportamiento de los dos sólidos después que empiezan a moverse dentro del fluido.

Cuando se estudia la interacción de dos cilindros dentro del canal la solución numérica ofrece como

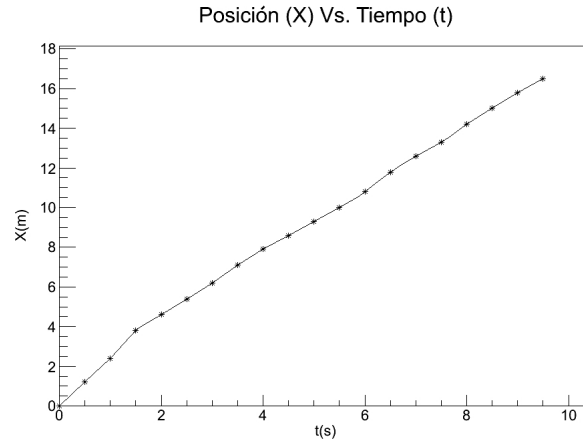


Figura 6: Posición $X(t)$ para un solo cilindro en el canal. Fuente: Elaboración propia.

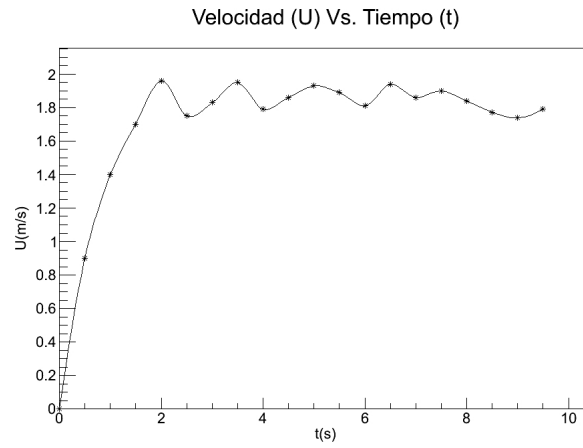


Figura 7: Velocidad $U(t)$, con un solo cilindro en el canal. Fuente: Elaboración propia.

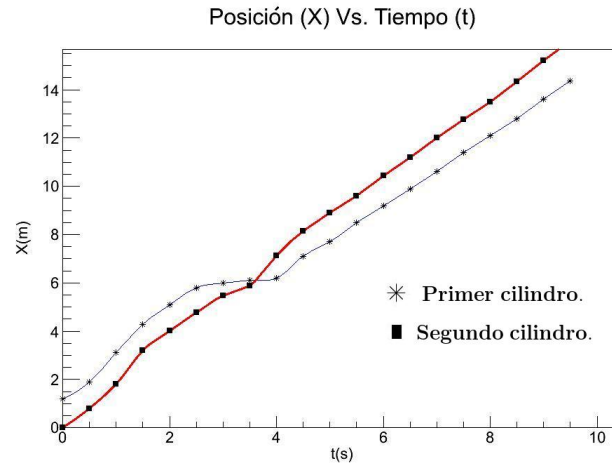


Figura 8: Posición $X(t)$, para dos cilindros dentro del canal. Fuente: Elaboración propia.

resultados las gráficas que se muestran en las Figuras 8 y 9, en donde se presentan los resultados obtenidos para las posiciones y velocidades de cada una de las partículas a medida que se desplazan dentro del lecho fluidizado conforme avanza el tiempo.

El resultado de la velocidad $U(t)$, adquirido mediante la solución numérica se encuentra expuesto en la Figura 9, allí se muestran dos velocidades que corresponden a cada uno de los cilindros por separado. Al indagar en la velocidad del primer cilindro se puede notar que ésta aumenta hasta un máximo en unos dos segundos, y luego de esto decrece hasta hacerse prácticamente cero; esto a simple vista parece ilógico o erróneo porque si dos cilindros se dejan caer en el canal de agua, en este caso no habría de existir algún motivo para que una de estas disminuyera su velocidad.

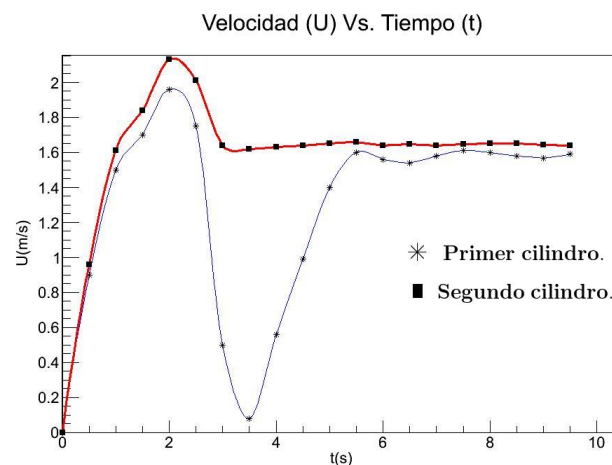


Figura 9: Velocidad $U(t)$, para dos cilindros en el canal. Fuente: Elaboración propia.

Este comportamiento se debe a que cuando se colocan los dos cilindros uno detrás del otro, y se

dejan caer bajo esa configuración, el segundo cilindro es arrastrado en la estela que deja el primero a su paso, y puede decirse que éste le abre paso al de atrás (*tal como los ciclistas en un velódromo*), de tal forma que esta partícula alcanza a la primera y ahí interactúan de modo que el cilindro de atrás pasa al primero, lo cual se evidencia en la gráfica del resultado de la simulación; además esto está acorde con lo que se conoce como *Drafting, Kissing y Tumbling*, los cuales son efectos importantes en la fluidización de camas de partículas con *agua*, así que estos resultados numéricos dan cuenta de los fenómenos descritos en los trabajos experimentales (Fortes *et al.*, 1987).

Lo descrito anteriormente se puede constatar en la gráfica presentada en la Figura 8, ya que justamente en el tiempo en que la velocidad de la primera partícula sólida tiende a hacerse nula es donde las trayectorias mostradas para la posición de las dos partículas se cruzan, lo que indica que fue en ese instante en donde una esfera alcanzó a la otra dando lugar al *kissing*, y después de ese momento la esfera que se encontraba detrás ahora toma la delantera, que es lo que se conoce como *tumbling*, que puede entenderse como un giro o rotación que da un sólido alrededor del otro. En realidad la simulación aún no incluye el caso en el que los cilindros realmente colisionen, físicamente el movimiento relativo entre ellos crea una fuerza de lubricación que los mantiene ligeramente separados, aunque para el caso de números de Reynolds bajos ($Re = \rho_f U d / \mu_f$), donde U es la velocidad del sólido, el número de Reynolds es un número adimensional que resulta de la comparación entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas, si se disminuye el diámetro de los cilindros, se encontró que la simulación se rompe, dado que la iteración entre el esquema de Newton y las ecuaciones de Navier-Stokes no converge. Cuando los cilindros están muy cercanos uno del otro, aparentemente para bajos números de Reynolds las partículas realmente colisionan y por un instante permanecen pegadas una con la otra para luego realizar el *tumbling*. Dado esto, hay una restricción en la elección del diámetro de los cilindros, por ejemplo si $d = 0.1\text{cm}$ el número de Reynolds es del orden de $Re = 0.8$ y para este caso no se presenta convergencia según lo explicado, al realizar comparación de muchas simulaciones para diferentes diámetros, se estableció que estos han de ser mayores que 0.4cm , para que haya convergencia.

También se corrieron algunos otros programas con diferentes combinaciones en el diámetro de los cilindros, las densidades y el ancho del canal, y en los resultados arrojados aparecía de nuevo un instante en que ocurría el encuentro entre las partículas sólidas debido al arrastre (*drafting*), y en algunas ocasiones el *kissing*, es decir, el encuentro de dos partículas sólidas dentro del fluido, ocurría más de dos veces, lo que indica que un cilindro alcanzaba al otro y lo pasaba, luego de estar a la delantera canal abajo era alcanzado de nuevo por el otro cilindro y volvía a ocurrir de nuevo el fenómeno de *kissing y tumbling*.

Al colocar gran cantidad de partículas dentro del fluido, se obtienen resultados similares para la velocidad y la posición de cada uno de ellos, aunque el mecanismo de interacción suele presentarse

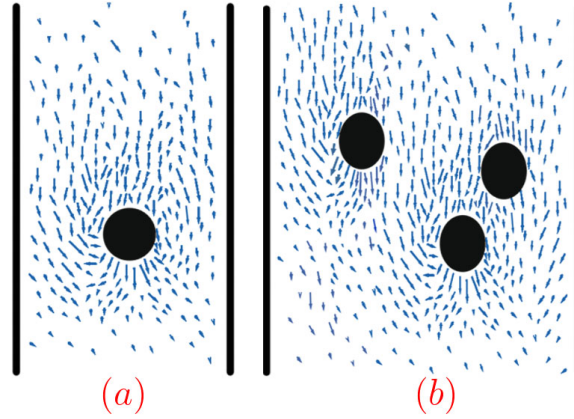


Figura 10: Resultado para el campo de velocidades $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, (a) para un cilindro, (b) para 3 sólidos. Fuente: Elaboración propia.

de una manera más compleja; allí se siguen presentando intersecciones entre las trayectorias y los resultados para la velocidad se comportan similares a una función que oscila en el tiempo similar a la de la Figura 9, lo que evidencia que las mismas partículas provocan aceleraciones y desaceleraciones entre ellas mismas a lo largo del canal, en la Figura 10 se muestran dos gráficos para el campo de velocidad hallado numéricamente. El resultado mostrado en la Figura 10, manifiesta para un tiempo fijo la forma del campo de velocidades debido a la presencia del movimiento de las partículas en el fluido, y esta alteración del campo de velocidades, a su vez, establece qué trayectorias han de seguir las partículas una vez aumente el paso de tiempo (recuérdese la condición de no deslizamiento (6)). En las Tablas 1 y 2 se muestra el valor de λ , correspondiente al criterio de convergencia (16), ambas tablas muestran la convergencia de la simulación numérica, pero se puede notar que la convergencia es mucho mayor cuando se incrementa el número de elementos (n_{elem}), que para el caso en el que se aumenta el número k de iteraciones. La Tabla 1 presenta la convergencia para un número de iteraciones fija $k = 1000$, mientras se aumenta el número de elementos.

Tabla 1: Convergencia para un número de iteraciones fijo, $k = 1000$.

n_{elem}	λ
100	7.7361×10^{-3}
200	2.8054×10^{-3}
500	6.0128×10^{-4}
1000	1.4475×10^{-4}
1500	3.9318×10^{-5}
2000	4.6352×10^{-6}

En la Tabla 2 se muestra la convergencia para un número de elementos fijo $n_{elem} = 1000$, y se

incrementa el número de iteraciones en la misma taza que se hizo con el número de elementos en la tabla 1, como resultado se obtiene que la convergencia es más lenta que en el caso anterior.

Tabla 2: Convergencia para un número de elementos fijo, $n_{elem} = 1000$.

k	λ
100	$1.3897x10^{-2}$
200	$1.2516x10^{-2}$
500	$1.1034x10^{-2}$
1000	$6.6021x10^{-3}$
1500	$3.5156x10^{-3}$
2000	$7.8229x10^{-4}$

Aún queda por resolver el problema: ¿qué ocurre cuando los cilindros se tocan?, ya que en ese instante las fronteras se encuentran en el mismo lugar del dominio y el programa automáticamente se rompe, igual sucede si algún cilindro toca la pared del canal; también se pretende realizar la simulación para otro tipo de geometrías y estudiar el movimiento de partículas inmersas en vórtices (flujos vorticiales).

5. CONCLUSIONES

Se creó un compendio de programas en *ROOT* que es un entorno orientado a objetos, el cual realiza una discretización unidimensional del dominio conforme avanza el tiempo y además permite variar el ancho del canal, las densidades de los sólidos y del líquido, la viscosidad cinemática, el diámetro de las partículas, su posición inicial y el número N de ellas, con el fin de solucionar las ecuaciones planteadas conforme evoluciona el sistema.

Para dos cilindros ($N = 2$), se obtuvo un resultado que concuerda con los datos experimentales de Fortes *et al.* (1987) conocidos como *drafting*, *tumbling* y *kissing*, los cuales desempeñan un papel fundamental en el estudio de los lechos fluidizados bidimensionales, se encontró que aunque los cilindros realmente no se tocan para grandes números de Reynolds, el esquema falla para pequeños números de Reynolds, dado que para esos números las partículas realmente colisionan, haciendo que el programa diverja, queda por tanto incluir en el programa el hecho de que las partículas colisionen. Para el caso $N = 1$ se evidenció un comportamiento que está sustentado en la Ley de Stokes para la velocidad límite hallando un error menor al 1% entre el resultado numérico y el predicho por la teoría.

Mediante la formulación de Galerkin se han discretizado las ecuaciones de Navier-Stokes en una dimensión con los elementos unidimensionales del polinomio de Lagrange, obteniendo así, como resultado las velocidades $U_i(t)$, con la que se mueven cada uno de los cilindros dentro del canal y

ESTUDIO NUMÉRICO DEL MOVIMIENTO DE PARTÍCULAS EN FLUIDOS MEDIANTE EL MÉTODO DE ELEMENTO FINITO
sus posiciones $X_i(t)$, para cualquier N arbitrario.

Se identificaron puntos críticos donde el programa falla, es decir, para diámetros de partículas menores a 0.4cm inmersas en agua, se cree que para estos valores, la fuerza que mantiene a los cilindros alejados unos de otros (fuerza de lubricación) es tan pequeña que estos alcanzan a colisionar, si se cambia la densidad del fluido, es necesario que $Re > 10$, lo cual implica que dependiendo del fluido el diámetro crítico tendrá que cambiar para que ocurran los fenómenos de *drafting*, *kissing* y *tumbling*.

Se crearon programas computacionales que conforme aumenta el paso del tiempo genera una nueva malla que se estructura de acuerdo con el cambio en las fronteras debido al movimiento de las partículas dentro del fluido, y presenta más densidad en el contorno de ellas con el fin de proporcionar mayor estabilidad en la simulación, además que con este esquema se computan todas las fuerzas que actúan sobre las partículas mediante la segunda ley de Newton y que generalmente son despreciadas.

Referencias

- Chen, L. & Huang, M. (2017). A DFFD simulation method combined with the spectral element method for solid-fluid-interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 330, 749–769.
- Chung, T. (2010). Finite Element Analysis in Fluid Dynamics. New York: Cambridge
- Crowe, T., Schwarzkopf, D., Sommerfeld, M. & Tsuji, Y. (2012). Multiphase Flows with Droplets and Particles. London: CRC Press.
- Deen, N., Annaland, M., Van der Hoef, M. & Kuipers, J. (2007). Review of discrete particle modeling of fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 62 (1), 28–44.
- Donea, J. & Huerta, A. (2003). Finite Element Methods for Flow Problems. England: Wiley.
- Fortes, A., Joseph, D. & Lundgen, T. (1987). Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 177, 467–483.
- Hilton, J., Mason, L. & Clearly, P. (2010). Dynamics of gas–solid fluidised beds with non-spherical particle geometry. *Chemical Engineering Science*, 65, 1584–1596.
- Hoomans, B. (2000). *Granular dynamics of gas-solid two-phase flows*. Universiteit Twente.
- Hu, H., Patankar, N. & Zhu, M. (2001). Direct numerical simulations of fluid–solid systems using the arbitrary Lagrangian–Eulerian technique. *Journal of Computational Physics*, 26 (9), 1509–1524.

- Huang, R. F., Hsu, C. M., & Chen, Y. T. (2017). Modulating flow and aerodynamic characteristics of a square cylinder in crossflow using a rear jet injection. *Phys. Fluids*, 29 (1), 015103.
- Kundu, P., Cohen, A. & Dowling, D. (2016). *Fluid Mechanics*. U.S.A: Academic Press.
- Lee, T., Chang, Y., Choi, J., Kim, D, Liu, W. & Kim, Y. (2008). Immersed finite element method for rigid body motions in the incompressible Navier-Stokes flow. *Comput. Methods Appl. Math.*, 197, 2305–2316.
- Patankar, N., Singh, P., Joseph, D., Glowinski, R. & Pan, T. (2000). A new formulation of the distributed Lagrange multiplier-fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 26 (9), 1509–1524.
- Rannacher, R. (2000). *Finite element methods for the incompressible Navier-Stokes equations*. Springer.
- Rutger, H.; IJzermans, A.; Hagmeijer, R.; Pieter, J.; (2007), Accumulation of heavy particles around a helical vortex filament. *Phys. Fluids*, 19(10), 107–102.
- Tezduyar, T., Behr, M. & Liou, J. (1992). A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—the DSD-ST procedure: I. The concept and the preliminary numerical tests. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 94(3), 339–351.
- Tezduyar, T., Behr, M. & Liou, J. (1992b). A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—the deforming-spatial-domain-space-time procedure: II. Computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 94 (3), 353–371.
- The ROOT team. (2014). Suiza, Users guide 5.26, An Object-Oriented Data Analysis Framework. [Consultada en Agosto 31 de 2016]. Disponible en: <https://root.cern.ch/root/html/doc/guides/users-guide/ROOTUsersGuideA4.pdf>
- Werther, J. (1999). Measurement techniques in fluidized beds. *Powder Technology*, 102 (1), 15–36.
- Zhao, X., Glenn, C., Xiao, Z. & Zhang, S. (2014). CFD development for macro particle simulations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 28(5), 232–249.