



# Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería

Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica

## Dinámica de Fluidos Computacional

Sem II - 2023

### Puntos importantes:

- El informe final *deberá tener la calidad de una publicación científica corta*
- El informe final *deberá ser elaborado en  $\LaTeX$ .*
- Según su propio criterio, el informe deberá incluir algunos de los elementos básicos de un artículo de investigación como:
  1. Introducción,
  2. Presentación de modelo(s) matemáticas
  3. Presentación del desarrollo de los esquemas computacionales,
  4. Resultados y Conclusiones,
  5. Anexos (si fuera necesario)

### Condiciones de entrega de taller:

**Fecha de entrega:** Lunes 04 de Diciembre de 2023

1. Haber cumplido con las entregas de avances preliminares (*Obligatorio*)
2. Proceso de entrega del taller (informe en PDF y códigos): Carga de UN SOLO archivo ZIP, con toda la información relevante, antes de las 23:59 del Lunes 04 de Diciembre de 2023.
3. Todos los archivos deberán enviarse en UN SOLO ARCHIVO COMPRIMIDO. El archivo deberá nombrarse con el siguiente formato: <Apellido>\_Taller02CFD-2023-S02.zip, donde <Apellido> hace referencia al primer apellido del autor del informe.

## Caso 1. Revisión de tópicos complementarios (15 %)

**Fecha entrega de avance preliminar:** Martes 21 de Noviembre de 2023

Lleve a cabo una revisión bibliográfica de los siguientes tópicos:

- (1) Técnicas de acople Presión-Velocidad para flujos incompresibles: PISO
- (2) Técnicas de acople Presión-Velocidad para flujos incompresibles: Fractional Step Method

### Objetivos y actividades

Para este punto usted debe:

- (a) Presentar revisión bibliográfica adecuada
- (b) Construir curvas indicando progreso de las simulaciones en el tiempo, p.ej: Reynolds vs año, Tamaño de malla vs año, etc
- (c) Presentar algún ejemplo de datos obtenidos con las técnicas discutidas

## Caso 2. Transporte de reactivo químico en dominio 2D (35 %)

**Fecha entrega de avance preliminar:** Martes 07 de Noviembre de 2023

La ecuación de transporte de un escalar pasivo considerando transporte convectivo, transporte difusivo y generación/consumo (o reacción) es una de las primeras aproximaciones al sistema de ecuaciones de Navier-Stokes, y con la cuál se puede modelar el transporte de una variable transportada por un campo de flujo. Esta es una de las PDEs más simples que combina tanto propagación lineal como efectos de difusión y generación (o consumo) interno (ver (Anderson et al. 2013; J.H. Ferziger 2001)). La ecuación de transporte de un escalar pasivo es una simplificación de modelos de flujo más sofisticados y complejos, por lo que generalmente es considerada como un “caso modelo”.

Considere la siguiente ecuación para modelar la distribución de concentración de un reactivo que es transportado por una corriente de flujo en un dominio bidimensional:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} = D \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + G(x, y, t) \quad (1)$$

donde

- |   |   |
|---|---|
| ■ $\phi$ : Concentración de reactivo ( $kg/m^3$ ) | ■ $G$ : Término reactivo ( $kg/(m^3 - s)$ ) |
| ■ $u$ : Velocidad del flujo en $x$ ( $m/s$ )      | ■ $x$ : Coordenada horizontal ( $m$ )       |
| ■ $v$ : Velocidad del flujo en $y$ ( $m/s$ )      | ■ $y$ : Coordenada vertical ( $m$ )         |
| ■ $D$ : Coeficiente de difusión ( $m^2/s$ )       | ■ $t$ : Coordenada temporal ( $s$ )         |

Se desea modelar, mediante la ecuación (1) la distribución de un reactivo dado, que es transportado por un flujo en un dominio 2D ( $\Omega$ ) como el indicado en Figura 1.

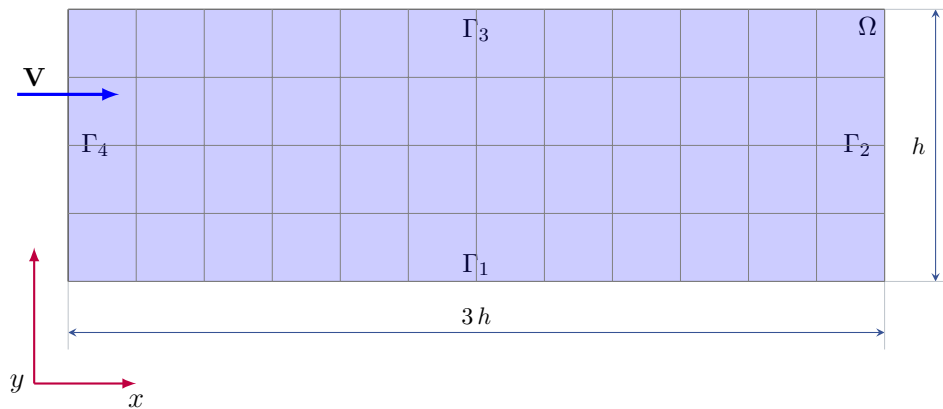


Figura 1: Configuración del caso de estudio de transporte pasivo de un reactivo ( $\phi$ )

El dominio está delimitado por 4 fronteras:  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$ ,  $\Gamma_3$ , y  $\Gamma_4$ . En esta configuración  $\Gamma_4$  representa una entrada de flujo con concentración constante,  $\Gamma_2$  la salida de flujo, con condición Neumann nula para  $\phi$ . Las otras fronteras,  $\Gamma_1$  y  $\Gamma_3$ , representan paredes impermeables y adiabáticas. El dominio  $\Omega$  está inicialmente libre de reactivo ( $\phi(t = 0) = 0$ ). El flujo de transporte está descrito por un campo de velocidad  $\mathbf{V} = u\mathbf{i} + v\mathbf{j}$ , cuyas componentes son:

$$u(x, y) = U_0 \left[ y \exp\left(-\left(5y/H\right)^2\right) \cos\left(\frac{3\pi x}{L}\right) + \tanh\left(\frac{5}{2} \frac{(2y+H)}{\theta H}\right) - \tanh\left(\frac{5}{2} \frac{(2y-H)}{\theta H}\right) - 1 \right] \quad (2)$$

$$v(x, y) = -\frac{3\pi U_0 H^2}{50L} \exp\left(-\left(5y/H\right)^2\right) \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) \quad (3)$$

donde  $U_0$ ,  $\theta$  y  $H$  son parámetros que definen los perfiles de velocidad promedio. En particular  $U_0$  representa un valor característico de velocidad,  $\theta$  es un coeficiente que permite ajustar el espesor de capa límite y  $H$  es el ancho o altura, en coordenada  $y$ , del canal por donde fluye el reactivo. A continuación se muestran el campo vectorial de velocidad  $\mathbf{V}$  (Figura 2), y los perfiles de las componentes  $u$  y  $v$ , para un campo de flujo definido por las ecuaciones (2) y (3), y con parámetros definidos como  $\theta = 0.8$ ,  $H = 0.4 \text{ m}$  y  $U_0 = 2.5 \text{ m/s}$ .

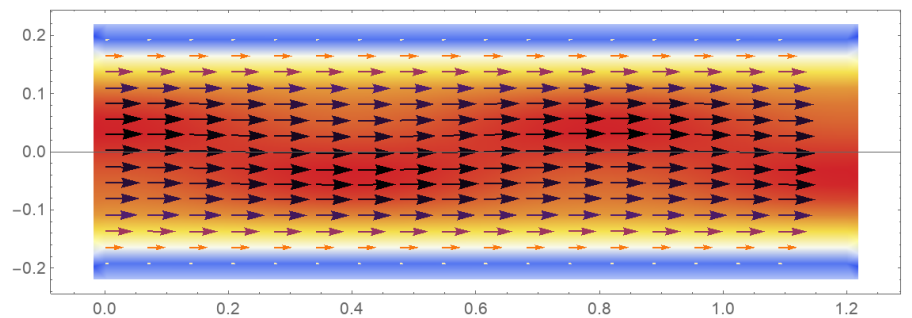


Figura 2: Campo de velocidad  $\mathbf{V}$  definido en el dominio  $0 \leq x \leq 1.2$ ,  $-0.2 \leq y \leq 0.2$ . Parámetros:  $\theta = 0.8$ ,  $H = 0.4 \text{ m}$  y  $U_0 = 2.5 \text{ m/s}$

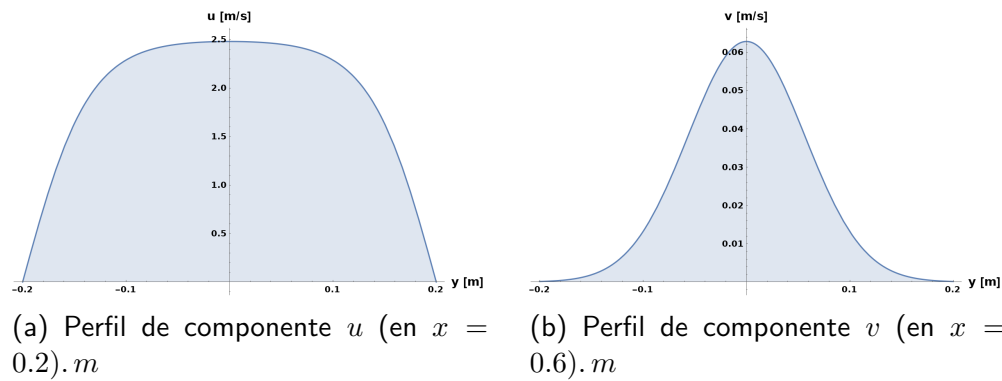


Figura 3: Perfiles de las componentes de velocidad a lo largo de la dirección  $y$ . Perfiles obtenidos para un campo de velocidad definido por  $\theta = 0.8$ ,  $H = 0.4 m$  y  $U_0 = 2.5 m/s$ .

El término fuente independiente, o término reactivo  $G$  de la ecuación (1), puede modelarse mediante la siguiente expresión,

$$G(x, y, t) = G_0 \exp \left( -\frac{(y - (H \sin(2ct)/3))^2}{\lambda^2} - \frac{(x - x_0(ct + 1))^2}{\kappa^2} \right) \quad (4)$$

en donde,

- $G_0$ : Valor máximo de concentración del reactivo ( $kg/m^3_H$ )
- $x$ : Posición de evaluación de la función  $G$  en la dirección  $x$  ( $m$ )
- $y$ : Posición de evaluación de la función  $G$  en la dirección  $y$  ( $m$ )
- $t$ : Instante de evaluación de la función  $G$  ( $s$ )
- $H$ : Altura del canal, o ancho en dirección  $y$  ( $m$ )
- $c$ : Velocidad de avance del punto de máxima concentración del término fuente  $G_0$  ( $1/s$ )
- $x_0$ : Posición inicial (en  $t = 0$ ) del término fuente en la dirección  $x$  ( $m$ )
- $\lambda$ : Parámetro de ajuste del nivel de difusión del término  $G_0$  en la dirección  $y$
- $\kappa$ : Parámetro de ajuste del nivel de difusión del término  $G_0$  en la dirección  $x$

La evaluación de la posición del término fuente (y en general todas las coordenadas del problema) debe hacerse considerando un sistema coordenado con origen ubicado en la mitad de la entrada izquierda del canal, tal y como se representa en la Figura 2.

A manera de referencia, en la siguiente imagen (Figura 4) se muestra la distribución del término fuente  $G$  en cuatro instantes diferentes, considerando los siguientes valores para los parámetros de la ecuación (4):  $G_0 = 0.25 kg/m^3_H$ ,  $x_0 = 0.2 s$ ,  $\kappa = 0.04$ ,  $y_0 = 0 m$ ,  $\lambda = 0.04$ ,  $c = 0.3 s^{-1}$ ,  $H = 0.4 m$ . Observe que los valores de los parámetros  $\lambda$  y  $\kappa$  son adimensionales.

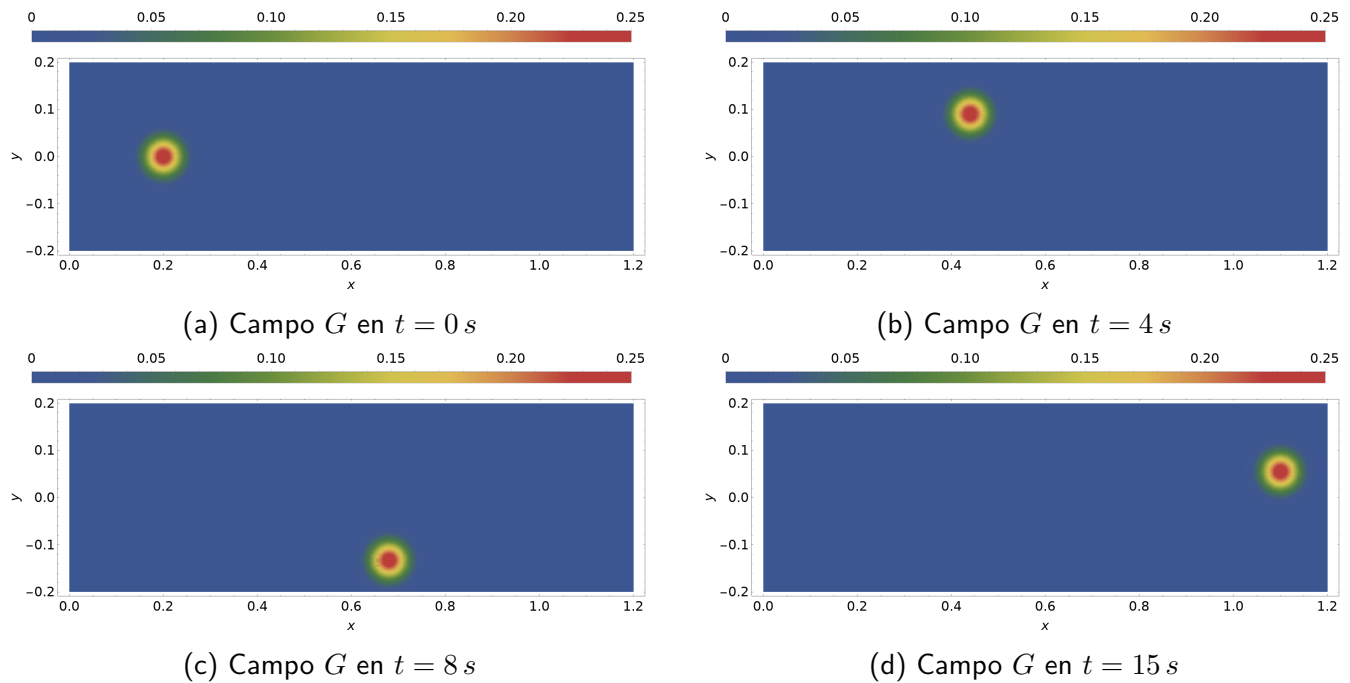


Figura 4: Perfil de campo del término fuente  $G$  en cuatro instantes diferentes ( $t = 0\text{ s}, 4\text{ s}, 8\text{ s}, 15\text{ s}$ ) para:  $G_0 = 0.25\text{ kg/m}_\text{fl}^3$ ,  $x_0 = 0.2\text{ s}$ ,  $\kappa = 0.04$ ,  $y_0 = 0\text{ m}$ ,  $\lambda = 0.04$ ,  $c = 0.3\text{ s}^{-1}$ ,  $H = 0.4\text{ m}$

### Objetivos y actividades

Usted debe escribir un código computacional usando volúmenes finitos para obtener la distribución del reactivo  $\phi$ . Los requerimientos técnicos y científicos del código son:

1. Programa computacional en Python que cumpla con los siguientes criterios:
  - Adquisición de datos requeridos para simulación a partir de archivos de entrada,
  - Uso de `numpy` y `scipy` para solución de sistemas de ecuaciones resultantes.
2. El código debe resolver una versión adimensional del problema
3. Usar Volúmenes Finitos como método de discretización espacial, con esquemas de segundo orden de exactitud
4. El código debe usar el método Crank-Nicolson como método de integración temporal
5. Los resultados deben ser reportados de forma que puedan ser leídos por alguna herramienta de visualización (Gnuplot, Matplotlib, Paraview, etc)

### Contenido informe

Para este caso, en el informe final usted debe documentar lo siguiente:

- Identificación si el flujo principal es incompresible,
- Determinación del comportamiento del contaminante usando: curvas simples de valor vs tiempo para diferentes posiciones, y patrones de concentración usando isocontornos
- Análisis y discusión del caso, incluyendo análisis de números adimensionales involucrados

## Caso 3. Proyecto de Curso - Manejo de OpenFOAM (50 %)

**Fecha entrega de primer avance preliminar:** Martes 07 de Noviembre de 2023

**Fecha entrega de segundo avance preliminar:** Martes 21 de Noviembre de 2023

Con el fin de evaluar si usted adquirió capacidades básicas para simulación de casos mediante el software OpenFOAM, se requiere que usted escoja y desarrolle UNA de las siguientes dos alternativas.

### Caso 3.1. Opción 1: Exploración intensiva de tutoriales de OpenFOAM

#### *Objetivos y actividades*

En esta opción usted debe:

- (a) Seleccionar 2 casos tutoriales a desarrollar
- (b) Resolver los casos tutoriales de manera consistente con el planteamiento original
- (c) Introducir modificaciones a los tutoriales y realizar simulaciones adicionales del fenómeno abordado por cada tutorial
- (d) Presentar resultados posprocesados de forma TANTO gráfica como numérica
- (e) Presentar de forma concisa un análisis de resultados y conclusiones

### Caso 3.2. Opción 2: Uso de OpenFOAM para simulaciones de interés propio

#### *Objetivos y actividades*

En esta opción usted debe:

- (a) Presentar el contexto del caso abordado: física relevante, números adimensionales relevantes, datos existentes (computacionales o experimentales), etc.
- (b) Determinar las condiciones de frontera, condiciones iniciales y esquemas numéricos relevantes para el caso a simular
- (c) Configurar malla computacional y parámetros de simulación
- (d) Llevar a cabo al menos una simulación de validación (usando datos publicados en bibliografía especializada)
- (e) Llevar a cabo al menos una simulación con variaciones respecto a las simulaciones de validación
- (f) Presentar resultados posprocesados de forma TANTO gráfica como numérica
- (g) Presentar de forma concisa un análisis de resultados y conclusiones

## Referencias

- [1] J. D. Anderson, G. Degrez, E. Dick y R. Grundmann, *Computational fluid dynamics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [2] M. J.H. Ferziger, *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 2001.