

DESCRIPCIÓN TÉCNICA - PICT 2021

Título: **Dinámica de fluidos computacional para flujo con interfaces móviles en plataformas de HPC**

L. Battaglia, J. D'Elía, L. Garelli, P.A. Kler, G.A. Ríos Rodríguez y M.A. Storti.

Palabras clave y temas

- Interfaces móviles: generación de microgotas, flujo multifase en medios permeables.
- Superficie libre: agitación, tanques de olas numéricos.
- Interacción fluido-estructura: energía undimotriz, fuerzas sobre cuerpos sumergidos.

Otros integrantes

Posibles: EJ López, S Sarraf, HG Castro (ver en cuál)

revisar: **Marcela Cruchaga**

revisar: **Gente relacionada con fonarsec/UTN-FRBB.**

Becarios: Gerlero, Arriondo, Harispe, Salazar, Caram, Franck, Trivisonno?

Evaluar otros integrantes según las temáticas, hay tantos caciques como indios

Resumen

prueba github

De la ficha CEYSTE

Este proyecto se propone desarrollar técnicas de simulación numérica computacional en dinámica de fluidos para el adecuado estudio y desarrollo de aplicaciones tecnológicas que involucran interfaces entre fluidos inmiscibles, pudiendo considerarse interfaces líquido-gas, líquido-líquido, o líquido-sólido abarcando diferentes escalas de longitud. Se considerará el estudio de las interfaces mencionadas tanto en entornos abiertos como en el caso de depósitos o canales de líquidos con superficie libre y cuerpos inmersos, en entornos confinados como tubos o canales de diferentes dimensiones geométricas, y en medios porosos artificiales o naturales, como en el caso del papel, suelo u hormigones drenantes. Para el desarrollo de los algoritmos de simulación numérica propuestos, se utilizarán herramientas de código abierto basadas principalmente en el método de volúmenes finitos, las cuales se desarrollarán de acuerdo a las necesidades particulares de cada una de las aplicaciones. Todos los programas desarrollados se ejecutarán en plataformas de cálculo paralelo con alto desempeño computacional, principalmente en aquellas disponibles en el lugar de trabajo de los investigadores del proyecto.

1. OBJETIVOS GENERALES

(máx 1 pág.) Objetivos Generales e impacto: Identificar el problema general en estudio, contextualizar el problema a nivel local, identificar que parte del problema se intenta abordar /contribuir con la investigación.

El objetivo general de la propuesta es el desarrollo de métodos numéricos la resolución de problemas de interés tecnológico en el área de la dinámica de fluidos computacional que abarca fenómenos de la Multifísica tales como interfases móviles e interacción fluido-estructura. Estos fenómenos requieren formulaciones consistentes en la producción de estrategias numérico-computacionales aptas para la verificación y diseño de sistemas y prototipos en diferentes escalas de interés, desde la microfluídica a los flujos en estructuras industriales o infraestructura urbana.

Se promueve además que los métodos numéricos sean eficientes y escalables en un paradigma de computación de alto desempeño, e integrados a códigos de fuente abierta basados en métodos tales como el de volúmenes finitos, de elementos finitos y de elementos de borde, dando continuidad y proyección a futuro a los desarrollos del grupo de trabajo.

Falta enfatizar lo novedoso, nuevos fenómenos a incorporar, mayor precisión o detalle, para diferenciarlo del PICT2018.

2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS E HIPÓTESIS DE TRABAJO

(máx 1 pág) Identificar los Objetivos específicos relacionados con el problema que se abordará. Describir la hipótesis de trabajo y como se abordará el problema en cuestión a través de la experimentación y estudio.

Los objetivos específicos del proyecto están dados en función de los fenómenos a resolver, brindando para cada uno el marco metodológico previsto.

Tomado de PIP 2021 derecho. Quizás haya que rephrasear y meter hipótesis/abordaje. Tomo también la gente a trabajar, comentada dentro de cada subsection

2.1. Interfases líquido–gas confinadas: flujo en medios porosos en regimen saturado e insaturado

Se propone desarrollar técnicas y estrategias numéricas para la simulación de flujos capilares en medios porosos y del transporte de solutos en medios saturados y no-saturados a través de dichos flujos. Se considerarán dos enfoques: modelos de imbibición basados en la ecuación de Richards, y técnicas de simulación multiescala.

2.2. Interfases líquido–líquido confinadas: flujo bifásico inmiscible en generadores de microgotas

Se propone desarrollar prototipos numéricos de generadores de microgotas y microcápsulas a través del estudio y la implementación numérica de los diferentes fenómenos que involucran la ruptura de interfases líquido–líquido, como la coalescencia y división de gotas. Se proponen tres estrategias diferentes que exploran diferentes complejidades computacionales: modelos semi-empíricos, modelos completos *Volume of Fluid*. (VOF) y modelos híbridos VOF–dos fluidos acoplados a estrategias de inteligencia artificial.

2.3. Interfases líquido-sólido confinadas: flujo reactivo en reactores microestructurados

Se propone el desarrollo de estrategias numéricas para el estudio del comportamiento de reactores catalíticos estructurados tipo monolíticos. Estas estrategias deben contemplar la naturaleza intrincada del flujo de fluidos a través de matrices de porosidad microestructurada (contemplada en el objetivo específico 2.1) y los procesos complejos que involucran varias etapas fisicoquímicas, como la difusión, la adsorción y la activación de las especies químicas involucradas, mediada por la presencia de superficies catalíticas y otras condiciones que determinan el desarrollo de las reacciones.

2.4. Interfases líquido-gas no confinadas: superficie libre

Se generarán estrategias para resolver casos con superficie libre empleando el método de volúmenes finitos combinado con metodologías específicas para la representación de interfases en tres dimensiones espaciales, con el propósito de resolver el flujo en cursos de agua con generación y simulación de olas en torno a estructuras total o parcialmente inmersas, así como también la agitación en dominios cerrados.

2.5. Interfases líquido-sólido: interacción fluido estructura

BEM para interacción fluido-MEMs?

Se desarrollarán métodos de resolución de problemas de interacción fluido-estructura, en los cuales los cuerpos inmersos, rígidos, interactúan con un flujo no estacionario, viscoso e incompresible, como ser en sedimentación de partículas o el flujo en torno a cuerpos fijos o con desplazamientos impuestos, en distintas escalas de resolución.

3. RELEVANCIA DEL PROBLEMA

(máx 3 pág.) Desarrollar la importancia e impacto a nivel local, general y para la especialidad del problema, los objetivos y el conocimiento que se generará. Describir antecedentes, avances y el estado del arte – búsqueda bibliográfica actualizada.

3.1. Relevancia e impacto en el medio

Itemizo como ayuda a la redacción. Luego podemos agrupar por párrafo.

- Interfases líquido-gas confinadas: flujo en medios porosos en régimen saturado e insaturado en la micro- y nanoescala,
- Interfases líquido-líquido confinadas: flujo bifásico inmiscible en generadores de microgotas
- Interfases líquido-sólido confinadas: flujo reactivo en reactores microestructurados
- Interfases líquido-gas no confinadas: superficie libre
- Interfases líquido-sólido: interacción fluido estructura

3.2. Relevancia en la especialidad

Lo comentado está tomado del PIP2021 - Kler. Hay que resumir y seleccionar. Faltan cosas de BEM.

4. RESULTADOS PRELIMINARES Y APORTES DEL GRUPO AL ESTUDIO DEL PROBLEMA EN CUESTIÓN

(máx 3 pág.) Describir con suficiente detalle los resultados ya obtenidos por el grupo, sean publicados o no, que indican la capacidad técnica del grupo y la dedicación previa del grupo para el estudio propuesto.

Lo comentado está tomado del PIP2021 - Kler. Hay que resumir y seleccionar. Faltan cosas de BEM.

5. CONSTRUCCION DE LA HIPOTESIS y JUSTIFICACION GENERAL DE LA METODOLOGIA DE TRABAJO

(máx 1 pág.) A partir de lo expuesto en la introducción y los datos preliminares proponer la hipótesis de trabajo y justificar la metodología propuesta.

Se desarrollarán modelos numéricos y sus correspondientes implementaciones computacionales a través de la discretización de los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias que representan el comportamiento de los sistemas físicos a estudiar a través de los métodos de elementos finitos y volúmenes finitos. El código generado bajo licencias de libre distribución será ejecutado en las facilidades de cómputo presentes en CIMEC.

Abajo, lo del PICT2018 como molde, comentado.

6. TIPO DE DISEÑO DE INVESTIGACION Y MÉTODOS

(máx. 9 pág.) Se deberá organizar el estudio propuesto en secciones mayores, correspondientes a los objetivos específicos, y, secciones menores, correspondientes a experimentos específicos para explicar: 1. La base racional de cada experimento o estudio propuesto. 2. Como se llevara a cabo el experimento o estudio. 3. Que controles se usarán – en caso de ser necesarios - y porqué. 4. Que técnicas específicas se utilizarán discutiendo aspectos más críticos o modificaciones de manipulaciones habituales: Respecto a las técnicas y tecnologías empleadas (los métodos) si son parte del patrimonio del grupo y han sido descriptas en publicaciones propias o en los datos preliminares - no deberán detallarse y solo deberá citarse la fuente-. Explicar si se recibirá apoyo técnico de colaboradores. 5. Como se interpretaran los datos a la luz de lo que se quiere estudiar y como se contrastará con la hipótesis de trabajo. 6. Tratar de evaluar los potenciales problemas y limitaciones de la metodología y técnicas propuestas y en lo posible proponer alternativas.

Mechar con PID UTN (más actualizado)

Tomado de PIP2020

6.1. Acerca del grupo de trabajo

revisar: Marcela Cruchaga.

revisar: Gente relacionada con fonarsec/UTN-FRBB.

Como se ha indicado en secciones previas, el grupo responsable de la propuesta se compone de investigadores formados (adjuntos, independiente y principal en CIC CONICET) con lugar de trabajo en CIMEC. En particular, J D'Elía es Responsable Técnico ante el SNCAD de los clusters de cómputo en la UE. En el grupo colaborador se incluyen a aquellos investigadores formados que colaboran ya sea en tareas experimentales de validación informadas y proyectadas: Federico Schaumburg (INTEC), Raúl Urteaga (IFIS), y Hugo G. Castro (IMIT, Chaco), como en la formulación matemática y numérica en BEM: el Inv. Adjunto Ezequiel López y la Inv. Asistente Sofía Sarraf (dirigida por J. D'Elía), ambos en

el IITCI (UNCo-CONICET), Universidad Nacional del Comahue (UNCo), Neuquén. Completan el grupo colaborador becarios doctorales dirigidos por los integrantes del grupo responsable que se encuentran trabajando temáticas afines al proyecto. Otros investigadores con los cuales hay vínculos de colaboración establecidos son Marcela Cruchaga (USACH) y Marco Schauer (Institut für Statik, TU Braunschweig, Alemania) [1, 7]. Poner trabajos en congresos 2021 en común. [Vinculaciones por BIOTRAFO?](#)

6.2. Descripción de la metodología

Los problemas a resolver pueden ser descriptos mediante ecuaciones diferenciales en derivadas parciales con respecto al tiempo y a las coordenadas espaciales. El abordaje del problema se lleva a cabo en el marco teórico de la mecánica del continuo. La descripción cuantitativa del transporte de dos o más fluidos transportando especies (bio)químicas se realiza a partir de los principios de conservación de cantidad de movimiento, energía, y materia. Básicamente se trata de un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas quedando el problema completamente definido cuando se fija el dominio de aplicación, las condiciones iniciales y de borde. En el caso del flujo de fluidos, se considerarán las ecuaciones de Navier–Stokes para el caso incompresible, viscoso, newtoniano e isotérmico.

La formulación e implementación de los cálculos se hará utilizando el Método de Volúmenes Finitos (MVF) en las plataformas y Code_Saturne. El MVF consiste en la discretización de la ecuaciones de conservación en forma débil, es decir mediante el balance de flujos en las caras de un dominio dividido en una cantidad finita de volúmenes, lo cual da lugar a su nombre. El método es inherentemente conservativo, cualidad de suma importancia cuando se desean resolver problemas de flujo incompresible y/o transporte de especies que reaccionan. Una vez definidos los dominios, las ecuaciones, las propiedades fisicoquímicas, y las condiciones iniciales y de borde en las plataformas mencionadas, se resolverán en computadoras personales, clusters locales [4] o supercomputadoras asociadas al SNCAD [28], según la magnitud del problema.

Se detallan a continuación algunas particularidades de los modelos matemáticos y estrategias computacionales a utilizar para cada aplicación:

6.2.1. Flujo capilar y transporte

Para el caso del estudio del flujo capilar, conviene separar en casos donde se estudia el flujo no-saturado, incluyendo la forma del frente de imbibición, y flujos saturados. Para el primer caso, conviene utilizar la formulación conocida como ecuación de Richards [24], cuya expresión simplificada para medios homogéneos es:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{k \rho g}{\mu} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{k}_r}{C} \nabla \theta \right) = 0 \quad (1)$$

donde θ es la saturación del medio, \mathbf{k} representa la permeabilidad del medio saturado, ρ y μ la densidad y viscosidad del fluido, y \mathbf{k}_r y C representan la permeabilidad relativa y la *capacidad capilar del medio*. Estos dos últimos parámetros son función de la saturación θ , y dicha dependencia es objeto de estudio, siendo los modelos más utilizados los de Brooks–Corey [3], Van Genuchten [33] y LET [17]. Esta ecuación es resuelta de una manera muy eficiente para éstos y otros modelos en **fronts**.

Para el caso de flujo en medios porosos saturados, se utiliza la siguiente generalización de la ecuación de Navier–Stokes para la conservación de momento:

$$\frac{\tau^2}{\phi} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\tau^2}{\phi} \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{u}}{\phi} \right) = \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \left(\frac{\mathbf{u}}{\phi} \right) - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu \tau}{\rho} \frac{\mathbf{u}}{K} \quad (2)$$

donde τ y ϕ representan la tortuosidad y la porosidad del medio, ρ es la densidad del fluido, y \mathbf{u} y \mathbf{p} los campos incógnita de velocidad y presión. Cabe destacar que esta ecuación es la más general que se conoce para este tipo de problemas y simplemente despreciando los términos correspondientes a cada caso (no todos los términos son no-nulos simultáneamente), se llega a formulaciones conocidas y muy utilizadas como la formulación de Darcy, Darcy–Forchheimer, o Darcy–Brinkman. Esta implementación se encuentra funcional y verificada en nuestro código `electroMicroTransport` [8].

Una alternativa a estas formulaciones de propiedades del medio poroso promediadas en el espacio son los modelos multiescala basados en homogeneización ya sea a través de la ecuación de Navier–Stokes [2] o a través de una reformulación de las relaciones de clausura entre la saturación, permeabilidad y presión capilar en la ecuación de Richards. Este último enfoque es novedoso y uno de los ejes principales de una tesis de una becaria doctoral del grupo.

En cuanto al transporte de especies en medios porosos, ya sea para modelar analitos en ensayos de flujo lateral, contaminantes en acuíferos u otros escalares de interés, se modela mediante la superposición de diferentes tipos de flujo y un término reactivo que propicia la generación o extinción de dicho escalar. Formalmente, la concentración de dicho escalar C^j , se obtiene resolviendo la siguiente ecuación:

$$\frac{d(C^j \phi)}{dt} = -\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{u}}{\phi} (C^j \phi) - \left(\frac{D_0^j}{\tau^2} + s_f \left| \frac{\mathbf{u}}{\phi} \right| \right) \nabla (C^j \phi) \right) + r^j \phi \quad (3)$$

donde s_f es el coeficiente de dispersión y r^j el término reactivo. Para este caso, los diferentes tipos de flujo considerados son (en orden de aparición en la ecuación desde la izquierda) el flujo advectivo, el flujo difusivo, y el flujo dispersivo. Esta ecuación ya se encuentra implementada y validada en nuestro software `electroMicroTransport`. Los términos reactivos pueden ser de las naturalezas más variadas, como adsorptivos, ácido–base, de hibridación, enzimáticos, inmunológicos, etc. La formulación de estos términos reactivos forma parte de las tareas asociadas al paquete "Flujo reactivo".

6.2.2. Simulación de generadores de microgotas

Para estudiar la dinámica en la formación de microgotas, tanto la fase continua como la dispersa, se modelan como incompresibles, con propiedades reológicas constantes e inmiscibilidad perfecta. En una juntura T microfluídica, disposición típica de los generadores de microgotas, el número capilar indica que los efectos de tensión superficial son dominantes en la medida adecuada para la formación de gotas monodispersas.

Justamente el número capilar es la base de todos los modelos semi-empíricos presentes en la literatura, que se compendiarán en el calculador web que se propuso como tarea. La interfase se desarrollará en `javascript` y realizará todos los cálculos del lado del cliente, desestimando el requisito de tener un servidor dedicado.

Cuando se utilizan modelos menos empíricos, se debe comenzar con poder cuantificar los efectos de la tensión superficial. Estos efectos se deben contemplar agregando un término de fuerza superficial \mathbf{F}_s a la ecuación de Navier–Stokes para la conservación de momento. Esta fuerza se calcula como:

$$\mathbf{F}_s = \int_{S(t)} \gamma \kappa(\mathbf{x}, t) \mathbf{n} dS \quad (4)$$

donde γ es el coeficiente de tensión superficial, $\kappa(\mathbf{x}, t)$ la curvatura de la interfase $S(t)$, cuyo vector

normal es \mathbf{n} . La curvatura se calcula como:

$$\kappa(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad (5)$$

y el vector normal como:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \quad (6)$$

donde α es la fracción másica de alguna de las dos fases definida de la manera estándar en el método de VOF. El desafío numérico de este esquema está en calcular de manera correcta las curvaturas para poder calcular de manera adecuada la fuerza actuante y determinar así el valor de α en todo el dominio en cada instante de tiempo.

Para los prototipos numéricos basados en esta estrategia, la primera alternativa para el manejo de la interfase es VOF. Aquí se utilizará una herramienta de simulación numérica de alto desempeño basada en MVF llamada **Basilisk** [22]. **Basilisk** es una herramienta de código abierto, paralela, programada en **C**, orientada a flujo multifásico, basado en el método de VOF y con diferentes estrategias para el tratamiento de las interfases, como el refinamiento adaptativo basado en *octrees* y algoritmos de alto orden para el cálculo de curvaturas. Se validarán los resultados con datos experimentales de la bibliografía para los regímenes reológicos, geométricos y de operación simulados.

Se espera que mediante el uso de **Basilisk** se simulen generadores de microgotas bajo diversas condiciones de operación, topologías y regímenes de flujo tanto para sistemas O/W como W/O. Existe un antecedente de este tipo de simulación, publicado hace algunos años por los desarrolladores de la herramienta, que otorga perspectiva de éxito en el corto plazo. Es importante mencionar que existen relaciones de colaboración fluidas entre CIMEC y los desarrolladores de **Basilisk** en el instituto D'Alembert de París.

Sin embargo, el costo computacional de estas simulaciones basadas en VOF, es por ahora incompatible con procesos de diseño y prototipado rápido. Siendo necesario elaborar estrategias con menor costo computacional.

Tradicionalmente, una forma de disminuir el costo computacional de prototipos numéricos, es la disminución de la carga debida al dominio. Esto, implica la reducción de dimensiones (resolver problemas equivalentes en una o dos dimensiones) o disminuir la calidad de las mallas hasta lograr un compromiso adecuado precisión/costo. En el caso de los generadores de microgotas, excepto por los generadores coaxiales, resulta inadecuada la reducción dimensional [27]. Por otra parte, y sobre todo en el método de VOF, reducir la calidad de la malla puede resultar en la divergencia casi inmediata de las soluciones [18].

Otra estrategia para disminuir el costo computacional, es tener aproximaciones menos complejas a la física de los problemas. En este marco se encuentra el método de dos fluidos. Este método, de menor costo computacional que VOF, basa su estrategia en incorporar leyes de cierre (generalmente pseudo-empíricas) para ajustar los esfuerzos en la interfase de los fluidos, sin necesidad de resolver la zona con tanta precisión. Es sabido que el método de dos fluidos presenta muchos problemas de estabilidad y es muy sensible a la forma matemática de las leyes de cierre propuestas [9], por ello, en el marco de una tesis doctoral (y excediendo el alcance exclusivo de este proyecto), se investigará si se puede configurar una red neuronal para funcionar con mayor potencialidad que una simple regresión lineal a partir de los datos de VOF para enriquecer los modelos de dos fluidos. Para ello deben desarrollarse estrategias adecuadas que permitan la incorporación de parámetros reológicos y principios de conservación.

Se investigará acerca de las particularidades informáticas de esta implementación, a los fines de lograr arquitecturas de la red y estructuras de datos acordes a los requerimientos del problema planteado.

6.2.3. Flujo reactivo

En este caso, los mecanismos de reacción a estudiar revisten una complejidad moderada, dada la actividad de alta especificidad propia de las superficies catalíticas presentes en los reactores monolíticos, por ejemplo la oxidación en medio acuoso de lactosa a ácido lactobiónico en presencia de superficies oro-alúmina [23]. Dicho mecanismo contempla la reacción propiamente dicha entre la lactosa y el oxígeno adsorbidos sobre la superficie catalítica de oro-alúmina para obtener ácido lactobiónico en proporciones estequiométricas adecuadas. La novedad/complejidad que requieren las nuevas implementaciones es contemplar la acción catalítica de la superficie oro-alúmina, ya que para esto se requiere contemplar diversos factores como la adsorción de los reactivos, el tiempo de adsorción/reacción, la liberación del sitio de catálisis, entre otros.

Se implementarán diferentes aproximaciones a este tipo de reacciones y a otras de similar interés industrial. En principio la herramienta propuesta, i.e. **Reaktoro** [15] debería satisfacer los requerimientos de la aplicación. De ser necesario, y al ser de código abierto, se podrá modificar para lograr la consecución de esta tarea.

Se utilizará el prototipado numérico de alto desempeño basado en el método de volúmenes finitos (MVF) a través de la herramienta de código abierto OpenFOAM [34] para optimizar diseños y condiciones de operación de los diferentes dispositivos. Estas actividades pueden incluir la proposición de nuevos modelos de transporte adecuados a las características del material propuesto o las condiciones de operación. Es destacable que el grupo de trabajo tiene vasta experiencia en el desarrollo de algoritmos para la resolución tanto del flujo de fluidos como de diversos mecanismos de transporte no-tradicionales como dispersión mecánica, electromigración, dispersión electroforética, entre otros [8, 26].

Habiendo desarrollado las tareas mencionadas en los dos puntos anteriores, se procederá a la construcción de prototipos numéricos de alto desempeño para el estudio de los reactores monolíticos de interés. Cabe destacar el hecho de que los prototipos se resolverán en plataformas de cálculo distribuido presentes en el lugar de trabajo [4] involucrando, en principio, herramientas para la resolución de flujo como **porousMultiphaseFOAM** [11] que contempla propiedades promediadas del medio poroso. En caso de que esta estrategia no brinde resultados adecuados en cuanto a su precisión numérica, puede contemplarse el estudio de estrategias de simulación multiescala basadas en homogeneización [2].

Finalmente, una vez implementados los prototipos numéricos, será conveniente desarrollar estrategias de validación basadas en literatura de la disciplina, o en experimentos conjuntos con el grupo colaborador que desarrolla estos reactores monolíticos. Para ello, el grupo colaborador dispone de reactores monolíticos agitados en donde realizar experimentos de transporte reactivo, por ejemplo, la mencionada oxidación selectiva de lactosa a ácido lactobiónico. También se cuenta con las herramientas adecuadas para analizar el desempeño de los sistemas bajo estudio en diferentes condiciones de trabajo según resulte necesario. Dada la dificultad de la instrumentación interna que presentan los prototipos reales, las validaciones se harán mediante parámetros promediados considerando las características y composición de los flujos de entrada y salida [23].

6.2.4. Superficie libre

Las primeras actividades a llevar adelante consisten en adoptar programas en volúmenes finitos en entornos de computación de alto desempeño, ya sean **Code_Saturne** [6] u [19]. Para ello, se prevé reproducir casos de validación a fin de precisar parámetros de resolución apropiados, ya sea en relación al resolutor de volúmenes finitos, los parámetros de la representación de la superficie libre para VOF, los requerimientos de discretización, entre otros aspectos. A continuación, se establecerá una metodología pa-

ra el cálculo de solicitaciones globales y detalladas en contornos [35], así como también efectos de fuerzas y momentos en estructuras de soporte o vehículos de transporte [32], en el marco de la continuidad del estudio de la agitación en fluidos viscosos e incompresibles.

El estudio computacional de dominios con fronteras abiertas, tal como cierta sección de un canal a superficie libre, se ve afectado por efectos numéricos no deseados originados en los contornos artificiales impuestos debido a la reflexión de olas que en ellos se produce. Por este motivo, es de interés el desarrollo de un estanque de olas numérico (NWT, por sus siglas en inglés) [12], caracterizado por (i) generadores de ondas de ingreso y (ii) condiciones de borde absorbentes, que evitan reflexiones espurias en los contornos ficticios. En este sentido, se estudiarán modelos de producción de ondas con el propósito de reproducir el oleaje que se registra en condiciones naturales [16, 25, 29]. A tal fin, las técnicas a emplear deberán considerar una regla de desplazamiento de ingreso para la superficie libre, y una regla para definir las velocidades en el mismo contorno. En lo referido a reflexiones espurias de olas en contornos artificiales, producidas tanto en secciones de ingreso como de salida en régimen subcrítico, es preciso dotar al NWT de regiones diseñadas para evitar tales reflejos. Estas regiones pueden contar con propiedades absorbentes en general [21], o definirse con condiciones de contorno variables [30]. Técnicas similares [5, 10] serán tomadas como referencia para la validación y/o contraste. Empleando estas técnicas, la caracterización de empujes hidrodinámicos sobre objetos sumergidos total o parcialmente, permitirán calcular acciones dinámicas en los objetos sumergidos [31] sin afectarlas con reflexiones espurias.

Como parte de la metodología, se prevé establecer una comparación con las estrategias a proponer en la Sec. 6.2.5 en cuanto a precisión y escalabilidad en entornos de HPC a fin de contar con elementos de decisión al momento de optar por una u otra herramienta de cálculo.

6.2.5. Interacción fluido estructura con cuerpos embebidos

La interacción de un fluido con un cuerpo inmerso se representa en la técnica embebida propuesta mediante un término de Darcy en las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo incompresible:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{u} + \kappa (\mathbf{u} - \mathbf{u}_b) \quad (7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (8)$$

donde \mathbf{u} es la velocidad del fluido, p es la presión y \mathbf{u}_b es la velocidad del cuerpo inmerso. Además, ρ y μ son la densidad y la viscosidad dinámica del fluido, respectivamente; κ es una resistividad hidráulica ficticia empleada para identificar el cuerpo ($\kappa > 0$), tal que en el fluido es $\kappa = 0$. La Ec. (7) se resuelve mediante volúmenes finitos en el entorno de Code_Saturne [6], donde se ha empleado al nivel de rutina de usuario. La representación del sólido queda supeditada a la discretización, cartesiana, ya que la máscara que permite aplicar la penalidad o resistividad κ puede tomar valores unitarios o cero únicamente. La determinación de las fuerzas sobre los cuerpos inmersos consiste en calcular en cada instante de cálculo la integral del término de fuerzas $\kappa (\mathbf{u} - \mathbf{u}_b)$ sobre todo el dominio que, en virtud de la máscara binaria, abarcará únicamente el sector ocupado por el cuerpo. A dichas fuerzas, y en el caso de cuerpos en movimiento, se adicionan los efectos inerciales de la masa del cuerpo en la suma de fuerzas global. Se ha concluido de los resultados preliminares que pueden obtenerse valores de fuerzas y momentos sobre un cuerpo con la precisión suficiente como para determinar las magnitudes de arrastre y sustentación [36], y se prevé su aptitud para resolver el problema de la dinámica del cuerpo rígido libre mediante un programa externo. Las dificultades en el cálculo de las fuerzas se encuentran relacionadas con problemas numéricos debidos a altos valores de la penalización κ y a restricciones sobre el tamaño

del paso de tiempo a emplear.

El estudio de la dinámica del cuerpo rígido viene dado mediante la ecuación de Newton-Euler a resolver mediante el acoplamiento con librerías externas al código actualmente desarrollado, que consiste en la determinación de fuerzas hidrodinámicas sobre el cuerpo, para resolver a continuación, mediante acoplamiento débil, la solución de la dinámica del cuerpo, que es retornada al solver del fluido para actualizar posición y velocidad del sólido rígido embebido en el fluido. Se encuentra previsto que el código 3DLSDEM [14, 13] sea empleado como librería en externa en el código de volúmenes finitos para materializar el proceso, bien un solver de tipo Newton [20] para cuerpos esféricos.

Las metodología propuesta deberá ser evaluada en cuanto a convergencia, así como también se estudiará su escalabilidad que, se espera, muestre un buen desempeño debido a las características de regularidad de malla y uso de mecanismos de identificación de la posición de los cuerpos. La validación se realizará mediante la solución de benchmarks tales como los de sedimentación de partículas esféricas, o resultados experimentales disponibles. Las aplicaciones previstas se realizarán en la última etapa de trabajo, y consistirá en estudiar modelos generadores de energía undimotriz en conjunto con la Universidad de Santiago de Chile, así como también se aplicará al cálculo de fuerzas dinámicas sobre fustes de generadores eólicos near-shore, objeto de estudio en la sección de superficie libre.

7. CRONOGRAMA DE TRABAJO

(máx. 1 pág.) Se presentará una tabla de doble entrada con las tareas desagregadas y los tiempos estimados que consumirán.

7.1. Presentación gráfica del cronograma

Tarea	Meses											
	1-3	4-6	7-9	10-12	13-15	16-18	19-21	22-24	25-27	28-30	31-33	34-36
1.1	■	■	■	■								
1.2			■	■	■	■						
1.3					■	■						
1.4	■	■	■	■								
1.5										■	■	■
1.6						■	■	■				
2.1				■	■	■						
2.2						■	■	■	■	■		
2.3							■	■	■			
3.1.	■	■	■	■			■	■	■	■		
3.2.				■	■	■				■	■	■
3.3	■		■		■		■		■		■	
4.1				■	■							
4.2							■	■	■			
4.3									■	■	■	■

Referencias

- [1] L. Battaglia, M. Cruchaga, M. Storti, J. D'Elia, J. Núñez Aedo, and R. Reinoso. Numerical modelling of 3D sloshing experiments in rectangular tanks. *Applied Mathematical Modelling*, 59:357–378, 2018.

- [2] Pablo Javier Blanco, Alejandro Clausse, and Raúl Antonino Feijóo. Homogenization of the navier-stokes equations by means of the multi-scale virtual power principle. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 315:760–779, 2017.
- [3] R. H. Brooks and A. T. Corey. Hydraulic Properties of Porous Media. *Hydrology Papers, Colorado State University*, (March), 1964.
- [4] C3. Centro de Cómputos del CIMEC, 2020. <http://www.cimec.org.ar/c3/>.
- [5] LF Chen, J Zang, AJ Hillis, GCJ Morgan, and AR Plummer. Numerical investigation of wave-structure interaction using OpenFOAM. *Ocean Engineering*, 88:91–109, 2014.
- [6] Code_Saturne. Free, open-source software developed and released by EDF for CFD applications. <https://www.code-saturne.org>, 2020.
- [7] M.A. Cruchaga, R. S. Reinoso, M.A. Storti, D.J. Celentano, and T.E. Tezduyar. Finite element computation and experimental validation of sloshing in rectangular tanks. *Computational Mechanics*, 52(6):1301–1312, 2013.
- [8] Santiago Márquez Damián, Federico Schaumburg, and Pablo A Kler. Open-source toolbox for electromigrative separations. *Comput Phys Commun*, 237:244–252, 2019.
- [9] Martin López De Bertodano, William Fullmer, Alejandro Clausse, and Victor H Ransom. *Two-fluid model stability, simulation and chaos*. Springer, 2017.
- [10] Z. Deng, C. Wang, Y. Yao, and P. Higuera. Numerical simulation of an oscillating water column device installed over a submerged breakwater. *Journal of Marine Science and Technology*, 25:258–271, 2020.
- [11] Pierre Horgue, Cyprien Soulaire, Jacques Franc, Romain Guibert, and Gérald Debenest. An open-source toolbox for multiphase flow in porous media. *Computer Physics Communications*, 187:217–226, feb 2015.
- [12] Zheng Zheng Hu, Tri Mai, Deborah Greaves, and Alison Raby. Investigations of offshore breaking wave impacts on a large offshore structure. *Journal of Fluids and Structures*, 75:99 – 116, 2017.
- [13] A.X. Jerves, R.Y. Kawamoto, and J.E. Andrade. Effects of grain morphology on critical state: a computational analysis. *Acta Geotechnica*, 11(3):493–503, 2016.
- [14] R Kawamoto, E Ando, G Viggiani, and JE Andrade. Level set discrete element method for three-dimensional computations with triaxial case study. *J. of the Mech. and Phys. of Solids*, 91:1 – 13, 2016.
- [15] Allan Leal and Reaktoro. Reaktoro. a unified framework for modelling chemically reactive systems, 2018. www.reaktoro.org.
- [16] Z. Li, G. Deng, P. Queutey, B. Bouscasse, G. Ducrozet, L. Gentaz, D. Le Touzé, and P. Ferrant. Comparison of wave modeling methods in CFD solvers for ocean engineering applications. *Ocean Engineering*, 188:106237, 2019.
- [17] Frode Lomeland and AS Orec. Overview of the LET family of versatile correlations for flow functions. SCA, 2018.
- [18] Angel Edecio Malaguera Mora et al. Numerical study of the dynamics of a droplet in a t-junction microchannel using openfoam. *Chemical Engineering Science*, 196:514–526, 2019.
- [19] OpenFOAM. Open source field operation and manipulation, 2017. www.openfoam.org.
- [20] R. Ortega, J.C. García Orden, M. Cruchaga, and C. García. Energy-consistent simulation of frictional contact in rigid multibody systems using implicit surfaces and penalty method. *Multibody System Dynamics*, 41(3):275–295, Nov 2017.
- [21] R.R. Paz, M.A. Storti, and L. Garelli. Local absorbent boundary condition for non-linear hyperbolic problems with unknown Riemann invariants. *Computers & Fluids*, 40(1):52 – 67, 2011.
- [22] Stéphane Popinet. A quadtree-adaptive multigrid solver for the Serre–Green–Naghdi equations. *Journal of Computational Physics*, 302:336–358, 2015.

- [23] Silvina Andrea Regenhardt, Camilo Ignacio Meyer, O Sanz, V Sebastian, S Ivanova, MA Centeno, JA Odriozola, M Montes, Alberto Julio Marchi, and Teresita Francisca Garetto. Monolithic stirrer reactor: The selective lactose oxidation in liquid phase over Au/Al₂O₃ nanostructured catalysts. *Molecular Catalysis*, 481:110219, 2020.
- [24] L. A. Richards. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, 1(5):318–333, nov 1931.
- [25] A. Romanowski, T. Tezdogan, and O. Turan. Development of a CFD methodology for the numerical simulation of irregular sea-states. *Ocean Engineering*, 192:106530, 2019.
- [26] F. Schaumburg, P. A Kler, and C.L.A. Berli. Comprehensive model of electromigrative transport in microfluidic paper based analytical devices. *Electrophoresis*, 41(7-8):598–606, 2020.
- [27] Ting Shao, Xuelan Feng, Yong Jin, and Yi Cheng. Controlled production of double emulsions in dual-coaxial capillaries device for millimeter-scale hollow polymer spheres. *Chemical Engineering Science*, 104:55–63, 2013.
- [28] SNCAD. Sistema Nacional de Computación de Alto Desempeño, 2013. <http://www.supercalculo.mincyt.gob.ar/>.
- [29] D. Stagonas, P. Higuera, and E. Buldakov. Simulating breaking focused waves in CFD: Methodology for controlled generation of first and second order. *Journal of Waterway, Port, Coastal, and Ocean Engineering*, 144(2):06017005, 2018.
- [30] M. A. Storti, N. M Nigro, R. R. Paz, and L. D. Dalcín. Dynamic boundary conditions in computational fluid dynamics. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Engr.*, 197(13–16):1219–1232, 2008. Elsevier, Amsterdam, The Netherlands.
- [31] L. Suja-Thauvin, J.R. Krokstad, and E.E. Bachynski. Critical assessment of non-linear hydrodynamic load models for a fully flexible monopile offshore wind turbine. *Ocean Engineering*, 164:87 – 104, 2018.
- [32] M. Toumi, M. Bouazara, and M.J. Richard. Impact of liquid sloshing on the behaviour of vehicles carrying liquid cargo. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 28(5):1026 – 1034, 2009.
- [33] M. Th. Van Genuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5):892–898, 1980.
- [34] Henry G. Weller, Gavin Tabor, Hrvoje Jasak, and Christer Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, 12(6):620, 1998.
- [35] C-H. Wu, B-F. Chen, and T-K. Hung. Hydrodynamic forces induced by transient sloshing in a 3D rectangular tank due to oblique horizontal excitation. *Computers & Mathematics with Applications*, 65(8):1163–1186, 2013.
- [36] E.A. Zamora, B.A. Storti, L. Battaglia, M.A. Cruchaga, and M.A. Storti. Estudio de estabilidad del flujo alrededor de un cilindro a diferentes números de Reynolds mediante un método embebido. In A. Cardona, L. Garelli, J.M. Gimenez, P.A. Kler, S. Márquez Damián, and M.A. Storti, editors, *Mecánica Computacional*, volume XXXVII, page 1819, Santa Fe, Noviembre 2019. AMCA.