



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



Instituto
Ingeniería
Energética



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA

TRABAJO FIN DE MÁSTER
TECNOLOGÍA ENERGÉTICA PARA DESARROLLO SOSTENIBLE

SIMULACIÓN CON CFD DE UNA INSTALACIÓN EXPERIMENTAL PTS (PRESSURE THERMAL SHOCK)

AUTOR: RIVERA DURÁN, YAGO

TUTOR: ESCRIVÁ CASTELLS, FACUNDO ALBERTO

COTUTOR: BERNA ESCRICHE, CÉSAR

Curso Académico: 2016-17

Enero de 2017

AGRADECIMIENTOS

Me gustaría aprovechar esta ocasión para agradecer el apoyo de todas las personas que me han acompañado en este viaje. En primer lugar, debo aludir al lugar en el que me crié, donde me desarrollé como persona. Todo comienza en esta pequeña, muy noble y leal, bimilenaria ciudad de Astorga. La familia ha sido desde el principio el sustento principal de mi vida, los pilares sobre los que apoyarse en todos los momentos, buenos y malos. Mis padres, mi hermano, mis abuelos, mis tíos... todos son maravillosos y, sin ellos, no estaría donde estoy ni sería quien soy.

El camino que me ha traído hasta la universidad no solo comprende a la familia. Mis amigos, los de toda la vida, siempre han estado ahí, ayudándome a ser mejor persona y a pasar unos ratos inolvidables.

El apoyo de amigos y familia siempre ha perdurado, incluso en estos últimos años de universidad en los que mi hogar se encontraba desplazado unos 800 km de mi ciudad natal. Desde hace cuatro años cuento con la ayuda de otro pilar fundamental en mi vida, mi novia. Poco se puede expresar con palabras acerca de la persona con la que quieres compartir los momentos más importantes de tu vida. En todo momento está cuando se le necesita y su apoyo ha sido decisivo en los últimos años y, en concreto, en el momento de escribir este trabajo.

No puedo olvidar a todos los profesores y compañeros que he conocido a lo largo de mi carrera. Mención especial merece mi tutor del trabajo fin de máster que me ha ofrecido la oportunidad y los medios para la realización del mismo.

A todos ellos dedico este trabajo junto con un sincero abrazo,

Yago.

RESUMEN

La integridad estructural de los sistemas de tuberías es esencial para el correcto funcionamiento de las plantas nucleares. Una de las causas más importantes relacionadas con los fallos inesperados o roturas en dichos componentes son las cargas térmicas inducidas que se producen durante el mezclado de flujos a distinta temperatura.

Mediante el uso de códigos fluidodinámicos (conocidos como CFD del inglés *Computational Fluid Dynamics*) puede llegar a preverse éstos fenómenos. En este trabajo se ha estudiado la fluctuación de temperatura que se produce tras mezclar dos flujos a distinta temperatura utilizando el código ANSYS® CFX.

Los investigadores de *Vattenfall Research & Development* han desarrollado una instalación experimental para captar este fenómeno, aportando a la comunidad científica datos de validación de gran precisión. Utilizando esta información se ha reproducido el experimento mediante simulación numérica y se han comparado los resultados con las medidas reales.

Dada la gran importancia de los modelos de turbulencia en la predicción de resultados, se han detallado las técnicas de cálculo que utilizan, profundizando en el modelo *Large Eddy Simulations* (LES). Se muestran los resultados de tres simulaciones llevadas a cabo utilizando LES con distinto modelado de las pequeñas escalas de torbellinos (modelos de subgrid).

Adicionalmente se ha estudiado la sensibilidad que muestra la simulación al grado de refinado del mallado utilizado. Para ello se ha empleado un mallado de 3.8 millones de nodos y otro de 0.8 millones observando que el primero ajusta mejor los resultados a los valores experimentales.

Se puede afirmar que, tras el análisis de resultados, los códigos CFD son capaces de reproducir correctamente el comportamiento de los fluidos. No obstante, en algunas zonas pudieron observarse ligeras discrepancias que se han discutido a lo largo del trabajo.

Palabras Clave: CFD, ANSYS, CFX, LES, PTS, Fatiga térmica, Turbulencia.

RESUM

La integritat estructural dels sistemes de canonades és essencial per al correcte funcionament de les plantes nuclears. Una de les causes més importants relacionades amb les fallades inesperades o ruptures en dites components són les càrregues tèrmiques induïdes que es produeixen durant el mesclat de fluxos a distinta temperatura.

Per mitjà de l'ús de codis fluidodinàmics (coneguts com CFD de l'anglès *Computational Fluids Dynamics*) pot arribar a preveure's estos fenòmens. En aquest treball s'ha estudiat la fluctuació de temperatura que es produeix després de mesclar dos fluxos a distinta temperatura utilitzant el codi ANSYS® CFX.

Els investigadors de *Vattenfall Research & Development* han desenvolupat una instal·lació experimental per a captar aquest fenomen, aportant a la comunitat científica dades de validació de gran precisió. Utilitzant esta informació s'ha reproduït l'experiment per mitjà de simulació numèrica i s'han comparat els resultats amb les mesures reals.

Donada la gran importància dels models de turbulència en la predicció de resultats, s'han detallat les tècniques de càlcul que utilitzen, aprofundint en el model Large Eddy Simulations (ELS). Es mostren els resultats de tres simulacions dutes a terme utilitzant ELS amb distint modelatge de les xicotetes escales de remolins (models de subgrid).

Adicionalment s'ha estudiat la sensibilitat que mostra la simulació al grau de refinat de la mallada utilitzat. Per a això s'ha empleat una mallada de 3.8 milions de nodes i un altre de 0.8 milions observant que el primer ajusta millor els resultats als valors experimentals.

Es pot afirmar que, després de l'anàlisi de resultats, els codis CFD són capaços de reproduir correctament el comportament dels fluids. No obstant això, en algunes zones es van poder observar lleugeres discrepàncies que s'han discutit al llarg del treball.

Paraules clau: CFD, ANSYS, CFX, LES, PTS, Fatiga Tèrmica, Turbulència.

ABSTRACT

The structural integrity of piping systems is essential for the proper operation of nuclear plants. One of the most important causes related to unexpected failures or breaks in these kind of components are induced thermal loads originated during the mixing of two fluids at different temperature.

By using Computational Fluid Dynamics Codes (known as CFDs), these phenomena can be predicted. In this TFM, we have studied the temperature fluctuation that happens after mixing two streams at different temperature using the code ANSYS® CFX.

Researchers at *Vattenfall Research & Development* have developed an experimental mock-up to capture this phenomenon, providing a highly accurate validation data to the scientific community. Using this information, the experiment was reproduced by numerical simulation and the results were compared with the actual measurements.

Due to the importance of the turbulence models in the results prediction, the computational techniques that this models use have been detailed, going deeper into the *Large Eddy Simulations* Model (LES). The results of three simulations carried out using LES with different modeling of the small vortex scales (known as subgrid models) are shown.

In addition, a sensitivity study has been carried out considering the degree of refining of the mesh used. For this purpose, a mesh of 3.8 million nodes and another one of 0.8 million have been used, observing that the first one obtains better results.

Finally, after the analysis of the results, it can be said that CFD codes are able to correctly reproduce the behavior of fluid. However, in some areas there we slight discrepancies that have been discussed throughout the work.

Keywords: CFD, ANSYS, CFX, LES, PTS, Thermal Fatigue, Turbulence.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. ANTECEDENTES	1
1.2. JUSTIFICACIÓN.....	2
1.3. ESTRUCTURA DEL DOCUMENTO	3
CAPÍTULO 2. ESTADO DEL ARTE	5
2.1. INSTALACIONES EXPERIMENTALES	5
2.2. SIMULACIONES.....	7
CAPÍTULO 3. HIPÓTESIS DE TRABAJO Y OBJETIVOS	15
3.1. HIPÓTESIS DE TRABAJO	15
3.2. INSTALACIÓN EXPERIMENTAL <i>VATTENFALL RESEARCH AND DEVELOPMENT</i>	16
3.2.1. GEOMETRÍA.....	16
3.2.2. DISPOSITIVOS DE MEDICIÓN.....	19
3.3. OBJETIVOS	20
CAPÍTULO 4. METODOLOGÍA	23
4.1. GEOMETRÍA.....	24
4.2. MALLADO	26
4.3. CONDICIONES DE CONTORNO	31
4.4. METODOLOGÍA DE CÁLCULO	36
4.4.1. ESTADO DEL FLUJO. ESTACIONARIO VS. TRANSITORIO	36
4.4.2. TURBULENCIA.....	37
4.4.2.1. MODELOS DE TURBULENCIA RANS	38
4.4.2.2. MODELO DE TURBULENCIA LES	40
4.4.3. ESQUEMA DE TRANSPORTE (ADVECTION SCHEME)	44
4.4.4. TIEMPO DE SIMULACIÓN Y PASO DE TIEMPO.....	46

CAPÍTULO 5. DISCUSIÓN DE RESULTADOS	53
5.1. COMPARATIVA RESULTADOS MODELOS LES Y EXPERIMENTO	53
5.1.1. DISTRIBUCIÓN DE VELOCIDADES	54
5.1.2. METODOLOGÍAS CUANTITATIVAS DE COMPARACIÓN	62
5.1.3. DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURAS	65
5.1.4. ESPECTRO DE TEMPERATURAS	68
5.2. RESULTADOS MODELO FINAL	71
CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO	79
BIBLIOGRAFÍA	82

ACRÓNIMOS Y NOMENCLATURA

Cd	Constante Dynamic Smagorinsky
Cs	Constante de Smagorinsky
Cw	Constante WALE
D	Diámetro
f	Frecuencia
k	Energía cinética turbulenta
L	Longitud
L _{ij}	Tensor de movimiento turbulento
N	Número total de puntos
P	Presión
Q	Caudal
Re	Número de Reynolds
St	Número de Strouhal
T	Temperatura
u	Velocidad
x	Distancia
ρ	Densidad
μ	Viscosidad dinámica
τ	Tensión cortante
ε	Disipación turbulenta de remolinos
ω	Frecuencia de turbulencia
μ _{sgs}	Eddy Viscosity

$$Re = \frac{\rho u D}{\mu}$$

$$St = \frac{f L}{u}$$

ACRÓNIMOS

BSL	Baseline
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrich-Levy
CSN	Consejo de Seguridad Nuclear
DES	Detached Eddy Simulation
DNS	Direct Numerical Simulation
EARSM	Explicit Algebraic Reynolds Stress Model
EC	Element Center
FEM	Finite Element Model
FSI	Fluid-Structure Interaction
IAEA	International Atomic Energy Agency
IP	Integration point
LES	Large Eddy Simulations
MSE	Mean Square Error
NEA	Nuclear Energy Agency
NMSE	Normalized Mean Square Error
NRMSE	Normalized Root Mean Square Error
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development
PSD	Power Spectral Density
PTS	Pressure Thermal Shock
R&D	Research And Development
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RNG	Renormalization Group
RSM	Reynolds Stress Model
SAS	Scale Adaptative Simulation
SGS	Subgrid scale
SIF	Stress Intensity Factor
SST	Shear Stress Transport
TM	Tasa de Muestreo
WALE	Wall-Adapted Local Eddy-Viscosity

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

1.1. ANTECEDENTES

Desde hace miles de años la mecánica de fluidos ha jugado un papel muy importante en la vida del ser humano. Desde el simple hecho de pescar hasta avanzadas técnicas de molido requieren de la observación del comportamiento del movimiento de los fluidos, tanto gases como líquidos. Muchos científicos a lo largo de los tiempos han sabido la importancia de conocer dicho comportamiento y, por ello, muchas han sido las descripciones y teorías que se han dado en relación al mismo.

Hoy en día se conoce mucho más acerca de ésta rama de la física. Sin embargo, cuanto más se profundiza en ella y más progresos se realizan, más dudas surgen al respecto. La mecánica de fluidos es un campo científico muy amplio, pero son los pequeños avances los que consiguen que, continuamente, se conozca un poco más.

En nuestra vida cotidiana estamos acostumbrados a disminuir la temperatura de un fluido caliente mezclándolo con otro a menor temperatura (agregar leche fría a un café caliente). En el ámbito industrial existen también procesos similares, en los que tiene lugar el mezclado de dos fluidos a distinta temperatura. Aunque este fenómeno a priori parece sencillo, puede convertirse en algo muy complicado si tratamos de reproducir su comportamiento de forma analítica a través de sistemas de ecuaciones. Todos los teoremas y avances que se desarrollan para el cálculo de problemas de mecánica de fluidos se implementan en programas informáticos conocidos como Códigos de Dinámica Computacional (por sus siglas en inglés *CFD Computational Fluid Dynamics*).

Una de las causas más importantes relacionadas con los fallos inesperados o roturas en los componentes que forman una central nuclear son las cargas térmicas inducidas, producidas durante el mezclado de flujos a distinta temperatura. Éstas son las responsables de gran parte de la degradación de componentes dando lugar a lo que conocemos como fatiga térmica.

En el ámbito de la seguridad nuclear, la fatiga térmica está reconocida como fenómeno PTS (*Pressure Thermal Shock*). Los PTS son choques que experimentan los materiales sólidos de las instalaciones provocados por las tensiones resultantes de rápidos cambios de presión y/o temperatura.

A medida que las instalaciones crecen en términos de edad, más susceptibles son a estas tensiones y, la exposición continua a este tipo de fenómenos, puede dar lugar al envejecimiento prematuro de las mismas. En las ocasiones más graves podría producirse la rotura inesperada de algún componente poniendo en riesgo el funcionamiento de la instalación.

En la mayor parte de las ocasiones los problemas relacionados con la fatiga térmica pueden controlarse con los sistemas de monitorización de las plantas industriales. Sin embargo, existen

determinados fenómenos que no son tan sencillos de detectar con la instrumentación habitual de éste tipo de instalaciones y que pueden dar lugar a daños a largo plazo.

1.2. JUSTIFICACIÓN

Para la correcta operatividad y seguridad de las plantas nucleares debe asegurarse la integridad estructural de los sistemas de tuberías. Dada la importancia que tiene la seguridad de estas plantas, existen organismos y agencias reguladoras que se encargan de llevar a cabo evaluaciones de la degradación de las instalaciones (por ejemplo, el CSN, la OECD/NEA o la IAEA). A través de éstas, y de otras organizaciones, se realizan estudios que favorecen la realización de buenas prácticas con objeto de minimizar el impacto que pueden tener los fenómenos PTS sobre los componentes de las instalaciones.

En el artículo de Iida (1992) se realizó un estudio acerca de los fallos por fatiga en reactores de agua ligera de Japón. En el artículo exponen las causas que pueden producir estos fenómenos y las dividen en dos categorías: vibraciones mecánicas y fluctuaciones de temperatura. Observan que los componentes formados por tuberías son más sensibles a la fatiga térmica que otros elementos de la instalación. Es por ello que los estudios relacionados con la predicción de las fluctuaciones de temperatura en tuberías son muy importantes.

Para observar aún más la trascendencia de estos fenómenos, desde el año 2008 existe una base de datos en la que se recoge información acerca de fallos en el sistema de tuberías incluyendo adelgazamiento de las paredes por servicio, fisura de las paredes, fuga, rotura, y todo tipo de eventos en los que aparecen caudales indebidos a través de la pared y que pueden alcanzar hasta la capacidad de compensación de los sistemas de protección. En la publicación de Lydell & Riznic (2008) se recoge toda la información necesaria para acceder a esta base de datos y se muestra toda la documentación que puede encontrarse en ella.

Utilizando toda esta información disponible y, basándose en programas informáticos (llamados códigos CFD), se puede llegar a prever de forma eficaz gran parte de la problemática de los fenómenos PTS. En los últimos años se han realizado varios benchmark con el objetivo de comprobar si dichos códigos son capaces de predecir los parámetros más importantes que intervienen en la fatiga térmica en tuberías.

Probablemente, uno de los escenarios más preocupantes en este aspecto, es el caso en el que se juntan, en una misma tubería, dos flujos a distinta temperatura. Habitualmente este mezclado aparece en las conocidas tuberías tipo T. Tras juntarse los dos caudales comenzará a producirse un proceso de mezclado, generalmente muy alterado debido a la turbulencia, y que provocará fluctuaciones de temperatura. Si dichas fluctuaciones se transmiten mediante algún mecanismo de transmisión de calor a la pared podrán someter al material a un estrés térmico perjudicial.

La motivación inicial del trabajo es, por tanto, comprobar si se puede predecir éstas fluctuaciones de temperatura con una precisión tal que, cuando lo comparemos con los datos experimentales, los valores se encuentren dentro de los límites de error que consideremos adecuados.

1.3. ESTRUCTURA DEL DOCUMENTO

El documento consta de siete capítulos y está redactado de forma que pueda entenderse con unos conocimientos medios en física. En el Capítulo 2 se detallan los aspectos más importantes de los artículos que han servido de base para este trabajo. Conocer el estado del arte antes de comenzar a trabajar puede ahorrar tiempo y te permite observar los avances que se han alcanzado a lo largo de los últimos años. Ha de mencionarse que en este apartado se mencionan algunos conceptos que se explicarán en capítulos posteriores.

Conocida la investigación que se ha realizado en este tema, es preciso fijarse unos objetivos claros que permitan dar por finalizado el trabajo cuando se halla llegado a las conclusiones oportunas. En el Capítulo 3 se expone la hipótesis de trabajo junto con todos estos objetivos mencionados. Adicionalmente, en este apartado se mostrarán los experimentos llevados a cabo por *Vattenfall Research & Development* y que han servido de base para comparar los resultados obtenidos en las simulaciones por ordenador.

El Capítulo 4 comprende una de las partes más importantes del presente trabajo de investigación. Se desarrolla la metodología que se ha utilizado para ejecutar las simulaciones detallando el significado de los modelos y técnicas de cálculo más importantes. Se ha observado que modelos de turbulencia son fundamentales en la simulación y, de ellos dependerá en gran medida el éxito. Por tanto, la turbulencia es uno de los conceptos en los que más se ha profundizado dada la relevancia que tiene en el problema.

Los resultados se exponen en el Capítulo 5, donde se efectuará una discusión de los mismos. La comparativa más importante corresponde a tres simulaciones que utilizan el modelo de turbulencia *Large Eddy Simulation* (LES) con distinto modelado de subgrid (*Smagorinsky*, *WALE* y *Dynamic*). Todos los resultados se muestran junto a los correspondientes datos experimentales con objeto de reconocer aquellos que se ajusten mejor. Adicionalmente, en este Capítulo 5 se incluye una comparativa con el modelo *Dynamic* LES de dos simulaciones con distinto mallado (0.8 millones de nodos frente a 3.8 millones).

Finalmente, se incluye un capítulo con las conclusiones más importantes y los trabajos futuros que pueden realizarse como continuación del presente documento (Capítulo 6).

CAPÍTULO 2. ESTADO DEL ARTE

2.1. INSTALACIONES EXPERIMENTALES

En primer lugar, debemos hacer referencia a todas aquellas instalaciones experimentales que se han diseñado a lo largo del tiempo con objeto de estudiar la fenomenología que sucede durante el mezclado. Los problemas de fatiga térmica son conocidos y pueden monitorizarse utilizando la instrumentación adecuada. Revisando la literatura, se encuentran multitud de instalaciones preparadas para medir tanto las temperaturas como las velocidades del fluido en diferentes puntos de la tubería.

Aunque a priori parece una tarea sencilla, surgen algunos problemas que suponen un reto para los investigadores. Uno de los más importantes es comentado en (Metzner & Wilke 2005) donde determinan que las cargas de temperatura no pueden ser medidas de una forma apropiada utilizando termopares. A lo largo de los años los investigadores han ido solucionando todas las complicaciones y encontramos una multitud de instalaciones experimentales funcionales.

Es necesario mencionar el incidente nuclear que tuvo lugar el 12 de mayo de 1998 en la central nuclear de Civaux. Una de las tuberías del circuito de refrigeración del reactor nº1 sufrió una importante rotura que dio lugar a una fuga de líquido. Aunque este acontecimiento no supuso un mayor problema (nivel 2 en la Escala Internacional de Accidentes Nucleares, ver Figura 1), la comunidad científica comenzó a estudiar aún con más detalle los fenómenos que pudieron dar lugar a dicha rotura. Este incidente se estudia, tal y como mencionamos en el Capítulo 1, dentro de los accidentes PTS (*Pressure Thermal Shock*).

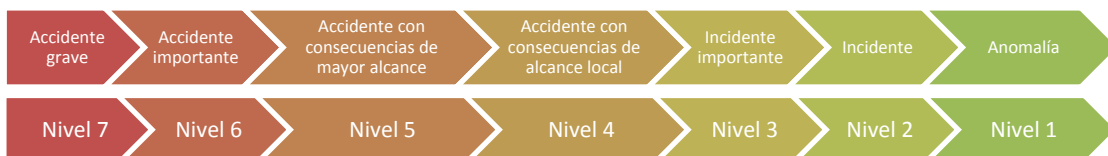


Figura 1. Escala Internacional de Accidentes Nucleares (importancia en materia de seguridad)

En la Tabla 1 se puede observar todas las instalaciones de experimentos en tuberías tipo T desde el incidente de la Central Nuclear de Civaux. Las principales diferencias entre cada una de ellas corresponden a:

- Material y tamaño de la tubería.
- Presión de trabajo.
- Diferencia de temperaturas y velocidades entre los dos flujos de entrada.

Tabla 1. Listado de Instalaciones para experimentos PTS en tuberías tipo T a partir del año 2000

AÑO	INSTALACIÓN	AUTOR	CONDICIONES				
			ΔT [K]	P [bar]	$D_{\text{main Inlet}}$	$D_{\text{branch Inlet}}$	u_m/u_b
2002	Toshiba Experiments	(Ogawa et al. 2002)	40	-	100	100	5
2003	Hitachi Experiments	Kawamura et al.	31 - 34	1	100	100	0.2 - 4.7
2005	INTHEPOL	(Curtit & Stephan 2005)	120 - 140	-	-	-	-
2005	WATLON	Ogawa et al.	15	1	150	50	0.005 - 6
2009	FATHERINO	(Brailard & Edelin 2009)	75	1	50	50	3
2011	Vattenfall Research	(Smith et al. 2011)	15	1	140	100	1
2011	FATHER	(Le Duff et al. 2011)	160	-	152.4	152.4	1
2013	IKE Cold Test Facility	(Kuschewski et al. 2013)	0	1	71	35.5	2
2014	EXTREME	(Chen et al. 2014)	70	1	20.8	2.1	0.034 - 0.153
2014	FSI	Kuschewski et al.	117	75	71.8	38.9	1.4
2014	ETHZ T-Junction Facility	(Kickhofel et al. 2014)	0	1	50	50	28 - 400
2016	National Tsing University Taiwan	(Lin et al. 2016)	5 - 9	1	208	21	6.5 - 29.4

2.2. SIMULACIONES

Tras analizar las instalaciones experimentales que han trabajado con tuberías tipo T en estudios de fatiga térmica, se debe estudiar las simulaciones con códigos CFD. En la literatura pueden encontrarse una gran cantidad de artículos, tesis, documentos, etc. en los que se analiza este fenómeno.

En el artículo de Hu & Kazimi (2006) se realiza una pequeña revisión teórica del modelo de turbulencia LES (*Large Eddy Simulations*) para continuar explicando cómo aplicarlo en una simulación del experimento llevado a cabo por Hitachi y Toshiba Experiments (Ogawa et al. 2002). Tras exponer todos los detalles relacionados con el "input" y el "setup" del código CFD, el autor realiza una comparativa entre sus resultados y los experimentos anteriormente mencionados.

La discusión del artículo concluye mencionando que se han obtenido buenos resultados, aunque en algunas comparativas la diferencia puede ser sustancial (como en el caso de la fluctuación de temperatura normalizada en la que los resultados son algo mayores que las medidas experimentales).

Westin et al. (2008) han realizado simulaciones utilizando los modelos de turbulencia LES y DES (*Detached Eddy Simulations*, combinación de los modelos $k-\omega$ y SST). La parte más interesante de este artículo es el estudio que se ha llevado a cabo comparando los resultados obtenidos según apliquemos o no una serie de perturbaciones en el flujo de entrada con objeto de observar la posible influencia de éstas en el comportamiento de la mezcla. Finalmente se concluye mencionando que las inestabilidades producidas en la zona de mezcla son independientes de las perturbaciones de entrada. Los resultados obtenidos parecen ajustarse bastante bien a los datos experimentales.

En la publicación de Nakamura et al. (2009) se realizan una serie de simulaciones numéricas con la intención de comparar modelos de turbulencia diferentes. En la primera simulación no se tiene en cuenta la turbulencia (modelo laminar) y en la última se utiliza el modelo DES. Para comprobar la exactitud de las simulaciones los autores comparan sus resultados con los obtenidos en el experimento WATLON (realizado por Japan Atomic Energy Agency).

Finalmente, los resultados obtenidos con el modelo DES son los que más se acercan a los datos experimentales. Se indica, adicionalmente, que las estructuras de vórtice que aparecen en el fluido tienen forma de omega arqueada para la zona de la pared y forma de "U" invertida en la zona de choque de los dos flujos.

En el artículo de Kamide et al. (2009) se han simulado los experimentos T-Junction realizados por WATLON. Para ello, los autores han utilizado un código CFD desarrollado por ellos mismos denominado AQUA. El código está basado en el método de diferencias finitas y permite analizar las distribuciones de velocidad y de temperatura de los flujos de entrada, y del flujo de mezcla.

Las comparativas realizadas entre sus resultados y el experimento muestran una correlación bastante buena entre ambos. Observando el espectro de temperaturas se puede advertir una frecuencia dominante para $St=0.2$ (Strouhal number) debida a vórtices que aparecen debajo del jet de salida de la tubería de agua caliente.

Lee et al. (2009) inicialmente utilizan un esquema de discretización espacial upwind de segundo orden pero tras compararlo con el esquema de diferencias centrales observan que el primero produce una amortiguación indebida del momento y de la fluctuación de energía.

Los autores desarrollan una metodología de análisis de fatiga térmica a través de la cuál son capaces de predecir escenarios seguros y no seguros de trabajo atendiendo únicamente a la diferencia de temperaturas entre los fluidos y al coeficiente de transmisión de calor.

Aplicando dicha metodología, demuestran que, por debajo de 0.01 Hz, las fluctuaciones de temperatura producen una variación térmica de SIF (*Stress Intensity Factor*) muy pequeña debida al retraso del tiempo de respuesta. Por otro lado, para frecuencias superiores a 10 Hz, el tiempo de respuesta de la temperatura superficial amortigua la carga fluctuante y la reduce a aproximadamente una carga constante de pequeño impacto. Tras su análisis concluyen que las frecuencias más perjudiciales se encuentran en el rango de 0.1 – 10 Hz.

Frank et al. (2010) analizan dos escenarios para el caso de la tubería. El primer caso se trata de simular el experimento ETHZ T-Junction Facility. En este análisis se utilizan dos flujos de agua a la misma temperatura y se utiliza el modelo SAS-SST (*Scale Adaptive Simulation* con el modelo *Shear Stress Transport* de turbulencia). Los resultados obtenidos son bastante parecidos a los datos medidos.

El segundo escenario corresponde al caso *Vattenfall* en el que la diferencia de temperatura entre ambos flujos es de 15K. En esta ocasión se observó que los resultados obtenidos de la simulación eran poco satisfactorios en términos de precisión si lo comparamos con los datos experimentales a excepción de los vórtices y estructuras turbulentas desarrolladas, que podían observarse cualitativamente bien reproducidas en la simulación.

En el trabajo de Kuhn et al. (2010) se analiza el comportamiento de una simulación LES con dos modelos diferentes de subgrid (ver explicación y detalles de estos modelos en el apartado 4.4.2. del Capítulo 4), y se comparan los resultados con los datos experimentales obtenidos en FATHERINO (instalación experimental). La diferencia de temperaturas para este experimento fue de 75K.

Los tipos de subgrid comparados fueron los modelos Smagorinsky clásico y dinámico. Para el primero se necesitan funciones de amortiguación en la pared para corregir la viscosidad turbulenta cerca de éstas. Sin embargo, para el modelo dinámico, esta necesidad desaparece y el procedimiento pasa por la obtención de un coeficiente C_s que asegure el comportamiento cerca de la pared de la viscosidad turbulenta. Finalmente, se indica que los resultados obtenidos con el modelo dinámico se ajustan mejor a los datos experimentales.

Adicionalmente se observa que las fluctuaciones de temperatura que se producen en el sólido son entre 3 y 10 veces menores que las del fluido. La fluctuación de temperatura se amortiguará más cuanto más gruesa sea la pared (3 veces menor para una pared delgada y 10 veces menor para una gruesa).

En la publicación de Naik-Nimbalkar et al. (2010) se realiza una revisión de la bibliografía desde el año 1980 hasta el 2010 y se recoge en una tabla los parámetros de entrada principales de las simulaciones de cada uno de los autores. Utilizando códigos CFD simulan una T-Junction tridimensional en estado estacionario utilizando el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ junto con una ecuación para la variación de temperaturas con el objetivo de analizar las fluctuaciones que se

producen. Los resultados, a pesar de ser obtenidos en un estacionario, son bastante coherentes cuando los comparan con los datos experimentales.

El estudio realizado por Simoneau et al. (2010) abarca simulaciones de diferentes geometrías, entre las que se encuentra la junta tipo T, con objeto de analizar posibles fenómenos de fatiga térmica y vibraciones. La simulación se lleva a cabo utilizando distintos modelos de turbulencia, desde los más sencillos (el $k-\varepsilon$) hasta los más complejos (como el *Large Eddy Simulation*). Tras comparar los resultados con los valores experimentales de los que disponían pudieron verificar que el modelo LES predecía de forma más precisa el comportamiento inestable real que se produce en este tipo de geometrías.

Walker et al. (2010) han aprovechado los datos experimentales obtenidos en un experimento llevado a cabo por los mismos autores en (Walker et al. 2009) para realizar simulaciones en estacionario utilizando los modelos SST ($k-\varepsilon$ y $k-\omega$) y BSL-RSM (*Baseline Reynolds Stress Model*).

Observaron que los resultados no captaron correctamente ni el campo de temperaturas ni el de velocidades. Para tratar de corregir este desajuste se procedió a modificar el coeficiente C_{μ} del modelo $k-\varepsilon$ obteniendo en este caso unos resultados más precisos.

En el estudio de Jayaraju et al. (2010) se han realizado 3 simulaciones diferentes atendiendo a distintos aspectos entre los que se encuentran el mallado, número de Reynolds, paso de tiempo y la función de pared (*wall function*). A diferencia de otros autores, las simulaciones llevadas a cabo tienen en cuenta la transferencia de calor que se produce en la pared (escenario no adiabático).

Una de las conclusiones más importantes que se obtuvieron tras analizar los resultados fue el hecho de que consiguieron realizar un escalado del número de Reynolds preservando las características esenciales del flujo; lo que permite reducir el coste computacional. El modelo LES WALE que utilizaron reprodujo, con bastante fidelidad, las medidas obtenidas en el experimento *Vattenfall*. Es importante mencionar que para las simulaciones utilizan un factor de mezclado para el advection-scheme *Boundary Central Difference* de 0.1.

Los campos de velocidad resultaron ser más precisos cuando se aplicaron las funciones de pared (si lo comparamos con un tratamiento "wall-resolved", es decir, un tratamiento de resolución directa sin utilizar funciones de pared). Sin embargo, la fluctuación de velocidad y de temperatura y la transferencia de calor a través de la pared fue más precisa en el caso wall-resolved. Es por ello que determinaron que, las funciones de pared (wall-functions) deben utilizarse con cautela y siendo conscientes de que pueden estar cometiendo errores.

En el trabajo de Kuczaj et al. (2010) se lleva a cabo un conjunto de simulaciones LES utilizando un modelo de escala de subcuadrícula (denominado generalmente modelo de subgrid) desarrollado en la publicación de Vreman (2004). Las distintas simulaciones se diferencian entre ellas por grado de refinamiento del mallado, variando éste entre 0.15 y 7.3 millones de celdas. De esta manera, se realiza un estudio de sensibilidad que pone de manifiesto que para obtener soluciones numéricas cercanas a las medidas experimentales la resolución de la malla debe ser tal que permita resolver las microescalas de longitud de Taylor o, al menos, ser del mismo orden que dichas microescalas obtenidas de las simulaciones RANS. Por tanto, si nuestro objetivo es obtener resultados muy precisos debemos utilizar mallados muy finos para captar las fluctuaciones en las capas más próximas a la zona de mezcla.

Ndombo & Howard (2011) llevan a cabo varias simulaciones utilizando el modelo *Dynamic* LES atendiendo al refinado del mallado y al tiempo de simulación. En su estudio indican que con 9 segundos obtienen los mismos valores medios que cuando simulan a lo largo de 30 segundos. Afirman que pueden obtenerse suficientes datos para obtener promedios convergidos en 9 segundos de simulación.

Se analiza también el efecto de la inclusión de condiciones de turbulencia en el fichero de entrada del programa. Los resultados obtenidos muestran que la diferencia en velocidades es muy pequeña, únicamente se aprecian ligeros cambios en la energía cinética turbulenta cerca de la pared aguas abajo de la zona de mezclado que parece ser menor cuando se incluyen las condiciones turbulentas a la entrada. Se estudia la correlación velocidad-temperatura ya que se observa que se reduce un 10% y se desplaza 1 cm cuando se incluyen dichas condiciones.

Los autores concluyen indicando que, aunque el comportamiento principal del flujo es muy similar en ambos casos, pueden apreciarse diferencias significativas debidas al comportamiento de la turbulencia cerca de la pared.

En el artículo de Hannink & Blom (2011) se utilizan dos códigos conjuntamente Fluent-FEM (*Finite Element Model*) junto con un modelo sinusoidal. El objetivo de esta unión es obtener una visión más amplia del fenómeno físico que causa la fatiga térmica debida a la mezcla turbulenta. Para la simulación CFD utilizan el modelo LES WALE y la comparativa de los resultados obtenidos muestra que las fluctuaciones de temperatura y las fluctuaciones de intensidad de los esfuerzos cortantes se corresponden bastante bien con los datos experimentales. No obstante, necesitan dedicar más recursos para obtener unos resultados más concluyentes.

En el trabajo de Ayhan & Sökmen (2012) se realizan 2 simulaciones LES con diferente modelo de escala de subcuadrícula (subgrid), distinto esquema de discretización temporal y distinto acoplamiento presión-velocidad. Para el cálculo numérico usan ANSYS FLUENT, pero el código de geometría y mallado que utilizan es GAMBIT. Basándose en el estudio de (Kuczaj et al. 2010), la resolución del mallado debe ser del orden de las micro-escalas de Taylor obtenidas para la simulación RANS con lo que concluyen que 1.7 mm entre celdas es suficiente para la tubería simulada en el experimento *Vattenfall*.

Se analiza la distribución de velocidades y de temperaturas en los distintos puntos requeridos en el benchmark de 2010 de la OECD/NEA y se observa que, a pesar de usar un mallado que no llega al millón de nodos, los resultados obtenidos se corresponden bastante bien con los datos experimentales.

En este artículo (Höhne 2014) se muestran los resultados de una simulación LES sobre el experimento *Vattenfall*. El autor indica la baja precisión de los modelos RANS para este tipo de fenómenos y realiza una simulación LES para generar unos resultados más realistas. En el espectro de temperaturas obtienen picos de frecuencia en el rango de 3 a 5 Hz, siendo de alta peligrosidad para la tubería en términos de fatiga térmica.

En el artículo de Timperi (2014) se muestran las simulaciones realizadas sobre el experimento *Vattenfall* utilizando el modelo de turbulencia LES en el código StarCD. El autor no se limita a simular el comportamiento del fluido, sino que incluye también la fenomenología que sucede en la tubería. A pesar de que en el experimento *Vattenfall* utiliza una tubería de Plexiglass, en las simulaciones sustituyen ésta por una tubería de acero inoxidable con objeto de obtener un

mayor flujo a través de la pared. Realiza una comparativa entre los resultados obtenidos con y sin alteraciones turbulentas de los flujos de entrada. En general la conclusión que obtiene es que los flujos de entrada alterados producen variaciones no despreciables en la fluctuación de temperatura cerca de la pared (menores respecto al caso de flujos de entrada no alterados). Sin embargo, inesperadamente, encuentran localizaciones en las que, los casos de flujo no alterado, se comportan de forma más cercana al experimento.

La comparativa entre paredes adiabáticas y no adiabáticas muestran un claro amortiguamiento de las fluctuaciones de temperatura en el caso de existir flujo a través de éstas.

Por último, se menciona el efecto que tiene el mallado sobre la predicción de resultados. Para mallados gruesos se obtienen buenas predicciones, aunque fallan ligeramente en las zonas cercanas a la pared (lo que nos da a entender que para realizar una buena simulación necesitamos un mallado muy fino en las proximidades de la pared de la tubería).

Selvam et al. (2015) realizan un conjunto de simulaciones sobre el experimento FSI (*Fluid-Structure Interaction*) que pretende medir, en condiciones realistas de presión y temperatura (hasta 75 bar y 553 K respectivamente), la fenomenología que sucede en la tubería tipo T. En este caso el flujo de agua fría entra por la tubería secundaria en lugar de por la tubería principal y la diferencia de temperaturas entre estos es de 117 y 123K. Las dos simulaciones realizadas varían atendiendo al número de Reynolds y la temperatura del flujo de entrada de agua caliente.

Los efectos asociados a la fuerza de la gravedad producen un flujo estratificado aguas abajo de la tubería y, utilizando el modelo de turbulencia LES WALE, consiguen predecir este fenómeno. El espectro de temperaturas indica que no existen frecuencias dominantes, aunque, se aprecia que las mayores fluctuaciones de energía se encuentran en el rango de frecuencias de 0.1 a 3 Hz.

El artículo de Selvam et al. (2016) supone la continuación de los estudios realizados sobre la instalación FSI. En este caso se analizan con mayor detalle las estructuras de vórtice que se generan debido al mezclado de los dos flujos de agua. Adicionalmente se analiza el número de Richardson con objeto de cuantificar los efectos de la fuerza de gravedad en los flujos de entrada. Los autores concluyen que los efectos de estratificación debidos a las características de los flujos de entrada producen una atenuación en la longitud de la oscilación de temperatura más importante, que se observa en el centro de la tubería tras el mezclado.

Tras la revisión realizada en este apartado podemos observar que la mayoría de los investigadores utilizan el modelo de turbulencia LES con mucha mayor frecuencia que los modelos RANS para el estudio de mezclado en tuberías tipo T. Esto puede deberse principalmente a dos factores:

- Aumento de la capacidad y los recursos computacionales, que permiten que los modelos complejos (como el modelo LES) puedan resolverse en un periodo de tiempo asequible.
- Mejora de los modelos numéricos, que permiten una mejor predicción de la física de los fluidos (incluidos flujos complejos como el mezclado de la tubería tipo T).

Las principales diferencias entre los estudios que se han revisado están relacionadas con la variación de las condiciones de contorno:

- Alteraciones turbulentas de los flujos de entrada.
- Tuberías con codos aguas arriba o aguas abajo de la zona de mezcla.
- Diferentes configuraciones de la tubería tipo T (en horizontal y en vertical).
- Variación de temperaturas entre los dos fluidos de entrada diferentes.

No obstante, existen también multitud de diferencias entre los estudios atendiendo al código CFD utilizado y los métodos numéricos implementados en cada uno de éstos. En la Tabla 2 se recogen la mayor parte de los parámetros de “setup” que se han utilizado en cada uno de los artículos y se pueden observar con más detalle todas estas diferencias.

Tabla 2. Listado de artículos de casos PTS en tuberías tipo T.

AUTORES	EXPERIMENTO SIMULADO	CÓDIGO CFD	MALLADO [Millones nodos]	MODELO TURBULENCIA	MODELO DE ESCALA DE SUBCUADRÍCULA (LES)	ESQUEMA DE TRANSPORTE	TIEMPO	PASO DE TIEMPO [ms]
(Hu & Kazimi 2006)	Hitachi and Toshiba Experiments	FLUENT	1.3	LES	RNG	Central difference	-	1
Westin et al.*	Vattenfall Research	FLUENT	0.5 - 10	LES	WALE	Central difference	-	-
(Lu et al. 2009)	Experimental data from a paper of Fukushima et al.	FLUENT	0.8 - 1.54	LES	Smagorinsky-Lilly	Central difference with second-order upwind	13	5
(Nakamura et al. 2009)	WATLON Experiments	CFX	1.3	DES	(NC)	-	-	-
(Kamide et al. 2009)	WATLON Experiments	AQUA (código propio)	0.59	MILES	(NC)	QUICK FRAM 2nd order central Semi-implicit (M-ICE)	17	66
(Lee et al. 2009)	Hitachi and Toshiba Experiments	FLUENT	1.3	LES	Smagorinsky-Lilly	Central difference	-	1
(Frank et al. 2010)	ETHZ T-Junction Facility y Vattenfall Research	CFX	0.44 - 7.8	URANS (SST)	(NC)	High Resolution	7.6	1
(Kuhn et al. 2010)	FATHERINO	FLUENT	1.9 fluido 0.3 sólido	LES	Classic y Dynamic Smagorinsky-Lilly	Bounded Central Difference y PRESTO	4	-
(Naik-Nimbalkar et al. 2010)	-	FLUENT	0.4 - 2.7	k-ε	-	Second Order Upwind y First Order Upwind	(NC)	(NC)
(Simoneau et al. 2010)	-	Star-CD	-	LES	Smagorinsky-Lilly	Central difference y MARS	-	-

(Walker et al. 2010)	Walker et al. previous experiment	CFX	0.25 - 2.6	k- ϵ , SST y BLS Reynolds Stress models	(NC)	High Resolution	(NC)	(NC)
(Jayaraju et al. 2010)	Vattenfall Research	StarCCM+	1 - 7	LES	WALE	Bounded Central Difference	8 time periods (8*(v/l))	0.5
(Kuczaj et al. 2010)	Vattenfall Research	OpenFOAM	0.15 - 7.3	LES	Vreman	Second-order backward-differencing scheme	20	-
(Ndombo & Howard 2011)	Vattenfall Research	Code Saturne	6, 10	LES	Dynamic Smagorinsky	Second order central difference	6, 12 y 27	0.15
(Hannink & Blom 2011)	Vattenfall Research	FLUENT y FEM	1.4	LES	WALE	Bounded Central Difference, second-order upwind y PISO	13	1
(Ayhan & Sökmen 2012)	Vattenfall Research	FLUENT	0.9	LES	Smagorinsky-Lilly y WALE	Presto, Quick y Boundary Central Difference	15 y 100	0.25 y 1
Klören D. et al.*	IKE cold test facility	FLUENT	-	LES	Dynamic Smagorinsky	-	-	-
(Höhne 2014)	Vattenfall Research	CFX	1	LES	WALE	Bounded Central Difference	19.5	1
(Timperi 2014)	Vattenfall Research	StarCD	0.22 y 1.8 fluido 0.074 y 0.6 sólido	LES	Smagorinsky-Lilly	SIMPLE y MARS (modificado)	30	-
(Selvam et al. 2015)	Fluid-Structure Interaction (FSI) Test Facility	CFX	7	LES	WALE	-	20 y 15	0.5
(Selvam et al. 2016)	Fluid-Structure Interaction (FSI) Test Facility	CFX	7	LES	WALE	-	30	0.2

*No se dispone de la referencia

Toda esta información recopilada ha sido utilizada como base para el desarrollo del trabajo que se expone en los siguientes apartados. Los datos experimentales de los que se dispone corresponden al caso que se llevó a cabo en *Vattenfall R&D*, y es por lo que se han analizado con más detenimiento los resultados obtenidos en estos artículos. El tipo de mallado, modelo de turbulencia, esquema de transporte y demás parámetros de la Tabla 2 se han utilizado como guía para iniciar las simulaciones. En los capítulos sucesivos, se definirán cada uno de estos parámetros de forma que pueda entenderse por qué se han utilizado.

CAPÍTULO 3. HIPÓTESIS DE TRABAJO Y OBJETIVOS

3.1. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Los códigos CFD se han utilizado desde hace muchos años para el cálculo de problemas de dinámica de fluidos. Sin embargo, el campo de la fluidodinámica es tan amplio que deben concentrarse los esfuerzos en tratar de entender un problema bien definido. De lo contrario, podría llegar un punto en el que no se sepa a qué se debe cada fenómeno y se den posibles explicaciones que disten mucho de la realidad.

Este capítulo está destinado a definir el objetivo principal del trabajo. A medida que se avanza la información crece de manera significativa, y es importante no perder de vista este objetivo. No obstante, es recomendable salirse del área de trabajo de vez en cuando para tener una idea global y creativa de lo que se está realizando.

Como se ha puesto de manifiesto en el capítulo anterior, son muchos los autores que se han centrado únicamente en el fenómeno de mezclado que sucede al juntar dos flujos a diferente temperatura. Algunos de ellos han reducido el problema hasta el punto de juntar dos flujos de la misma sustancia a la misma temperatura con el objeto de determinar únicamente la distribución de velocidades aguas abajo. Son muchas las leyes, algoritmos, variables, etc. que intervienen por simple que parezca el fenómeno de estudio.

Tal y como se adelantaba en el apartado 1.1. , la visión inicial del trabajo es la de determinar la capacidad de los códigos CFD para predecir el comportamiento de un fluido que se mezcla a distinta temperatura. Para ello lo primero que se necesita es un trabajo experimental sobre el que comparar los resultados, con la intención de determinar si se ajustan correctamente o si, por el contrario, no captan adecuadamente los fenómenos físicos que suceden.

Se han llevado a cabo experimentos de mezclado en tuberías tipo T en multitud de países, Francia, Japón, Alemania, Suecia, Suiza, etc., sin embargo, debemos destacar los experimentos que se llevaron a cabo en Suecia desde 2006 en el Laboratorio de *Vattenfall Research and Development*. Los ensayos que realizaron los investigadores de este centro fueron llevados a cabo con alta precisión, con el principal objetivo de proporcionar datos de validación de gran calidad para una amplia variedad de relaciones de caudal.

Tras conocer toda la información que este laboratorio podía aportar a la comunidad científica, en el año 2009 la OECD/NEA (*Organisation for Economic Co-operation and Development, Nuclear Energy Agency*) decidió programar un benchmark internacional para comprobar la capacidad que tenían los códigos CFD de predecir el comportamiento real del fluido. Tras las negociaciones con el personal del laboratorio *Vattenfall R&D* llegaron al acuerdo de realizar un test ciego, que sirviese de base para el benchmark, aportando la información inicial del experimento (geometría y condiciones de contorno), pero manteniendo en secreto los resultados obtenidos.

3.2. INSTALACIÓN EXPERIMENTAL VATTENFALL RESEARCH AND DEVELOPMENT

La tubería tipo T sobre la que se llevará a cabo el test fue construida a partir de Plexiglas (polimetilmetacrilato), material que destaca por ser transparente y por resistir de forma satisfactoria a condiciones de temperatura y presión desfavorables. Los flujos de la tubería principal y de la tubería secundaria se introducen a una temperatura constante de 19 y 36 °C respectivamente y con una pérdida de calor a través de la pared despreciable.

Para evitar problemas equívocos entre los distintos participantes los autores tuvieron cuidado de proporcionar de forma simple pero completamente definida las condiciones de entrada y geometría.

3.2.1. GEOMETRÍA

El esquema general de la instalación puede observarse en la Figura 2, donde encontramos las medidas de los conductos más importantes y de los diámetros de las tuberías de entrada a la junta tipo T.

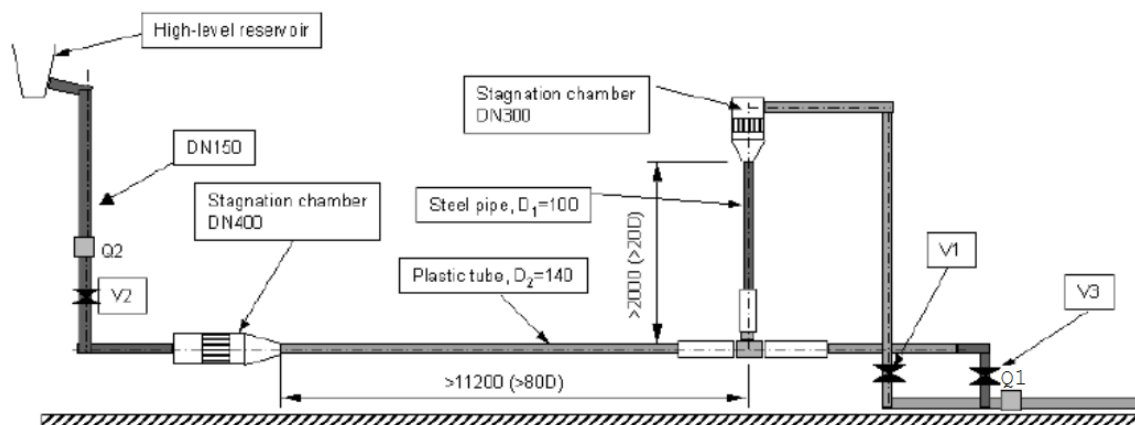


Figura 2. Esquema de la instalación de Vattenfall R&D T-junction.

El flujo de agua fría lo proporciona un tanque situado a una altura elevada y diseñado para mantener un nivel constante de agua independientemente del caudal que deseen extraer del mismo. Tras este tanque y antes de la tubería principal se dispone un módulo de alineamiento y estabilización diseñado para proporcionar un flujo de alta calidad sin torbellinos de alta frecuencia o flujos secundarios (ver Figura 3). Este elemento está compuesto por una serie de platos y tubos que alinean, homogeneizan y acondicionan el fluido para iniciar el proceso denominado “desarrollo del flujo”.

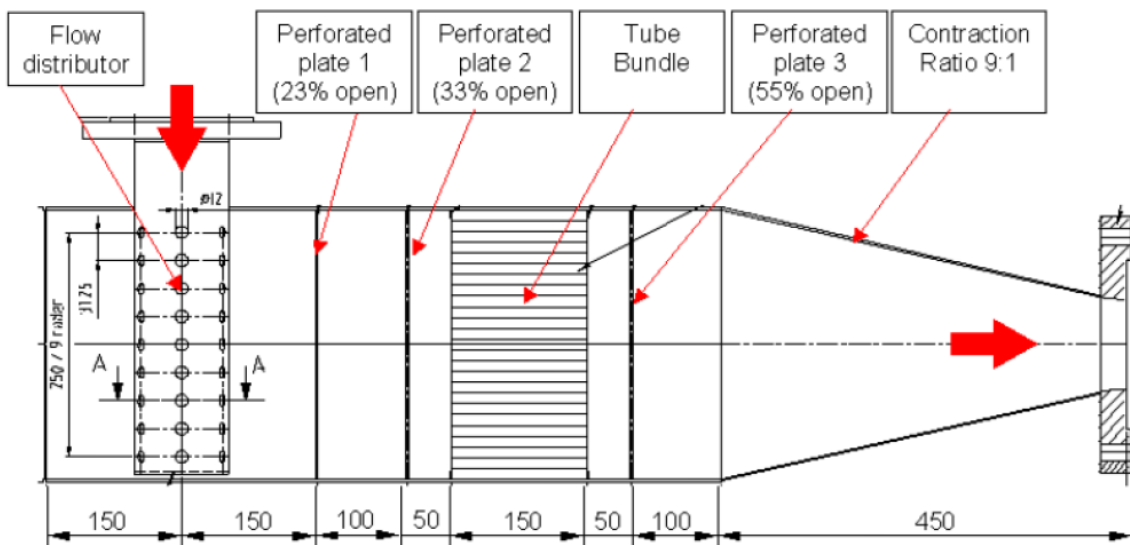


Figura 3. Detalle del dispositivo de alineamiento y estabilización.

Este dispositivo está conectado con un conducto de plástico ABS (acrilnitrilo butadieno estireno) de aproximadamente 10 m de longitud. A continuación de este tramo de tubería se encuentra la sección de Plexiglas de la que se hablaba al comienzo de este apartado.

Para la medición de los caudales de entrada se utiliza un medidor de flujo electromagnético, no invasivo y con valores de precisión bastante elevados (en la Figura 2 los encontramos designados como Q1 y Q2).

El agua caliente se extrae de un tanque de 70 m³ y, en este caso, se utiliza una bomba controlada por el medidor de caudal Q1 para mantener un flujo constante. De forma similar a la sección de agua fría, previo a la tubería que conducirá el agua caliente a la zona de mezcla, se sitúa un módulo de alineamiento y estabilización. El conducto que se ubica a continuación está construido de acero y se extiende aproximadamente 2 m hasta encontrarse con la sección de Plexiglas.

Viendo la Figura 2 se puede advertir una diferencia importante en la longitud de las tuberías previas a la zona de mezcla. Para el flujo de agua fría el conducto se extiende más de 80D mientras que para el de agua caliente sólo se desarrolla por 20D. En el caso de esta última no puede obtenerse un flujo totalmente desarrollado, aunque la calidad del flujo sí que cumple con las expectativas gracias a la presencia del dispositivo de alineamiento y estabilización.

En la Figura 4 se puede observar en detalle la sección de Plexiglas de la instalación con las medidas de cada una de las piezas de las que se compone. Los canales circulares del bloque central son del mismo diámetro de las tuberías anexas y pueden considerarse hidráulicamente lisas, aunque no se ha realizado ninguna medida de la rugosidad de la pared.

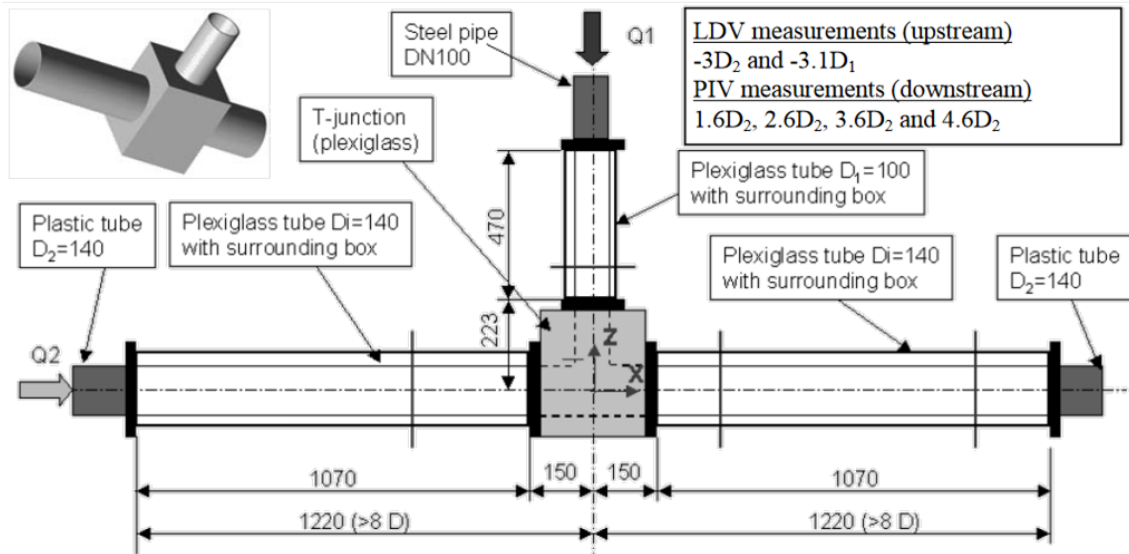


Figura 4. Detalle de la junta tipo T de la instalación de Vattenfall R&D T-junction.

Las medidas de cada una de las piezas que forman esta junta se muestran en la Tabla 3. Cabe mencionar que la T se construyó con bordes internos “afilados”, es decir el borde de intersección existente entre el conducto principal, secundario y de mezcla dentro del bloque no ha sido sometido a un tratamiento de curvado. A pesar de que se desconoce el radio de curvatura exacto, se estima menor a 0.2 mm.

Tabla 3. Dimensiones de la sección principal de la instalación

COMPONENTE	MATERIAL	LONGITUD [mm]	DIÁMETRO INTERNO [mm]	DIÁMETRO EXTERNO [mm]
Tubería principal (agua fría)	Plexiglas	1070	$D_2=D=140$	150
Tubería secundaria (agua caliente)	Plexiglas	470	$D_1=100$	110
Tubería post-mezclado	Plexiglas	1070	140	150
Bloque en T	Plexiglas	-	Agua fría: 100 A. caliente: 140	-
		Largo (x): 220	Ancho (y): 285	Alto (z): 325

3.2.2. DISPOSITIVOS DE MEDICIÓN

En el apartado anterior se indicó cuáles eran los dispositivos utilizados para la medición de los caudales de entrada a la zona de mezclado. Los resultados experimentales necesarios para llevar a cabo el benchmark requieren adicionalmente del uso de sensores de temperatura y velocidad correctamente ubicados.

Para la medición de las fluctuaciones de temperatura cerca de la pared de la tubería se utilizaron termopares. Éstos se situaron a 1 mm de la pared interior de la tubería principal en siete secciones aguas abajo de la zona de mezclado y en una sección aguas arriba, ver Figura 5.

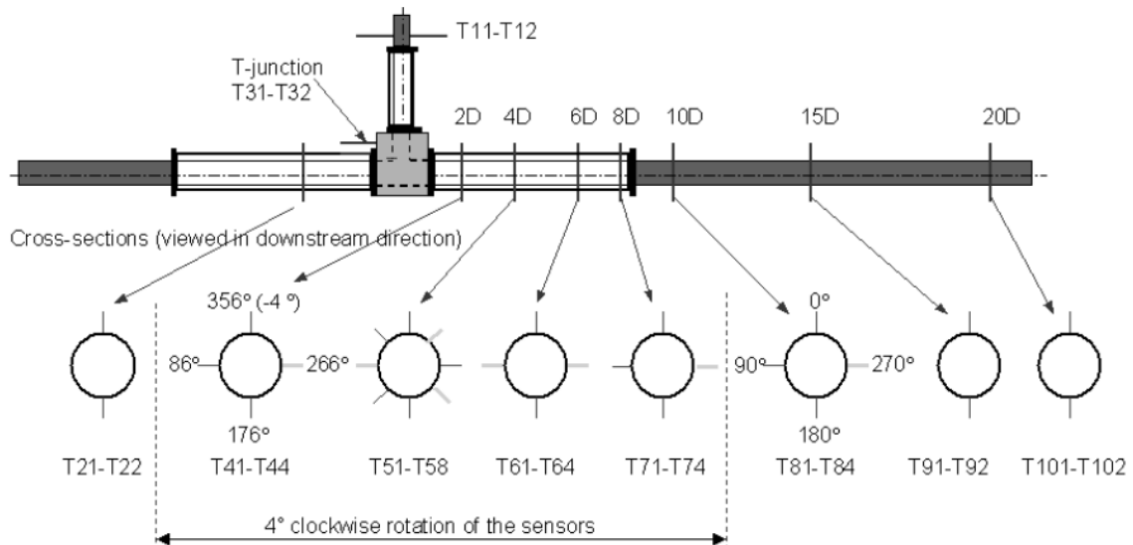


Figura 5. Esquema de la tubería y de la localización inicial de los sensores de temperatura.

Para la medición de los perfiles de velocidad se utilizó un sistema LDV (*Lasser Doppler Velocimeter*) de doble componente. Este dispositivo es capaz de medir de forma muy precisa la velocidad del fluido sin perturbar el flujo (técnica no invasiva). Las medidas se realizan en un determinado punto definido por la intersección de dos rayos laser. Cuando el fluido atraviesa dicho punto dispersa los haces de luz sobre un detector capaz de determinar la frecuencia de la señal Doppler resultante (directamente proporcional a la velocidad del fluido en dicho punto).

Para la rama de agua fría el dispositivo de medida toma datos en un plano a 3D aguas arriba de la junta. Con esta información se puede confirmar el estado totalmente desarrollado del flujo en este punto. De forma parecida, las medidas del ramal de agua caliente se toman a $3.1D_1$ aguas arriba de la zona de mezclado y, como se mencionó anteriormente, el flujo no se encuentra totalmente desarrollado.

Se debe mencionar que alrededor de cada una de las tuberías de la junta (las dos de entrada y la de mezclado) están rodeadas por una caja rectangular rellena de agua (ver Figura 4). Esto es necesario para el correcto funcionamiento de dispositivo de medida de velocidad evitando así distorsiones del haz del láser sobre las superficies curvas de las tuberías. En la tubería de mezclado, aguas abajo de la junta, la caja está rellena de agua sólo durante la medición de velocidades y, se llena de aire para la medición de temperaturas. De esta manera se consigue que las pérdidas de calor a través de la pared se consideren despreciables.

3.3. OBJETIVOS

El siguiente paso es definir de forma más precisa cuáles son los objetivos del trabajo. Tal y como se indica en (Smith et al. 2011) los parámetros críticos que intervienen en los análisis de fatiga térmica son:

- Frecuencia (ω). Hace referencia a la frecuencia con la que se producen las fluctuaciones de temperatura debidas a los remolinos que se produzcan durante el mezclado. Aunque previamente se advirtió de que las frecuencias más perjudiciales se encontraban entre 0.1 y 10 Hz (Lee et al. 2009) en este estudio indican que el rango más dañino es entre 3 y 10 Hz.
- Diferencia de temperatura entre los flujos de entrada (ΔT). Tal y como nos dice la lógica, a mayor diferencia de temperatura de los fluidos, mayor será la fluctuación de temperatura durante el mezclado.
- Número de ciclos. Similar al tiempo de exposición a la perturbación.
- Propiedades del material. Dependiendo del tipo de material del que se compone tendrá una predisposición mayor al desgaste por fatiga térmica.

Se puede observar que los dos últimos parámetros no dependen de la capacidad de los códigos CFD para predecir resultados, por lo que no serán objeto del trabajo. Sin embargo, los dos primeros parámetros sí serán estudiados ya que, en función de una diferencia de temperatura entre flujos de entrada definida, obtendremos un comportamiento determinado que deberá reproducir, lo más fielmente posible, el comportamiento real.

Teniendo en cuenta el alto coste computacional de este tipo de códigos, se debe analizar detenidamente todos aquellos aspectos que puedan aumentar o reducir dicho gasto. Para ello, se llevará un control ordenado de todas las simulaciones que se efectúen y se realizará un seguimiento de aquellos parámetros que puedan influir en el coste de computación.

Uno de los aspectos más relevantes que debemos tener en cuenta antes de realizar una simulación en la que intervienen fluidos con un número de Reynolds elevado es la turbulencia. Este fenómeno ha sido estudiado a lo largo de los años por una gran cantidad de científicos y son muchos los modelos que se han desarrollado para su cálculo. En capítulos posteriores se estudiará la influencia que tienen éstos sobre los resultados finales y se seleccionará el modelo que mejor representa el comportamiento real.

Se llevará a cabo un estudio de la distribución de velocidades a lo largo de la tubería. La velocidad del fluido es una de las variables más importantes en el cálculo de la turbulencia y de ésta forma podremos observar si el modelo de turbulencia utilizado consigue captar correctamente la fenomenología de mezclado. De forma similar se realizará un seguimiento de los valores medios de temperatura en diferentes puntos de la tubería para observar si se corresponden con los valores experimentales.

Los códigos CFD se caracterizan por permitir al usuario modificar una enorme cantidad de parámetros que conformarán el input necesario para iniciar el cálculo. Esto supone un arma de doble filo, por un lado, permiten un alto grado de adaptación del modelo al escenario real, pero por otro, aumentan las posibilidades de error si no se tienen en cuenta todos los detalles, a la vez que dificultan la detección de los mismos. Teniendo esto en cuenta, es lógico pensar que se

desarrollarán una importante suma de modelos durante todo el estudio. Para determinar cuán acertado es un modelo será necesario desarrollar una metodología que nos permita comparar de manera cuantitativa los resultados obtenidos en las simulaciones con los datos experimentales.

Resumiendo todo lo expuesto anteriormente, los objetivos más importantes del trabajo son los siguientes:

- Análisis de los parámetros más importantes que intervienen en el proceso de fatiga térmica y son susceptibles al cálculo con códigos CFD: frecuencia de los remolinos para una diferencia de temperatura entre fluidos de entrada determinada.
- Estudio del coste computacional de los códigos CFD atendiendo a los parámetros más importantes de nuestro modelo.
- Análisis de la influencia de los diferentes modelos de turbulencia en los resultados finales obtenidos.
- Cálculo de la distribución de velocidades y temperaturas del fluido a lo largo de la tubería para comprobar la fidelidad de nuestro modelo con el escenario real.
- Desarrollo de una metodología de cálculo que nos permita comparar los resultados de las simulaciones y los datos experimentales de forma cuantitativa.
- Desarrollo de un conjunto de lecciones bien aprendidas y buenas prácticas de uso de los códigos CFD para problemas con relevancia en seguridad nuclear.

CAPÍTULO 4. METODOLOGÍA

En este capítulo se detalla el procedimiento necesario para la obtención de un modelo del sistema que se desea simular. En la actualidad podemos encontrar multitud de códigos CFD disponibles en el mercado que se diferencian entre ellos principalmente en el tipo de métodos de cálculo implementados. Como se verá más adelante se pueden definir una serie de pasos para la creación del modelo del sistema y, en función del programa utilizado, éstos pasos se efectuarán de una manera u otra.

El software utilizado para la realización de éste trabajo es ANSYS®. Dentro de este programa encontramos diferentes códigos CFD disponibles entre los que destacan, para el cálculo de fluidos, ANSYS FLUENT y ANSYS CFX. Ambos códigos tienen sus puntos a favor y en contra, pero en general, ambos son lo suficiente potentes para el escenario que se desea simular. ANSYS CFX es un código termohidráulico de alto rendimiento, diseñado para proporcionar soluciones reales y precisas de forma rápida y para un amplio rango de escenarios. Sus puntos fuertes son la precisión, la velocidad de cálculo y la robustez del código. Aunque podría haberse utilizado cualquiera de los dos, finalmente ha decidido utilizarse ANSYS CFX (de aquí en adelante lo llamaremos simplemente CFX).

El paso inicial para desarrollar el modelo es definir la geometría que se va a simular. Este paso es muy importante, aunque una vez se tenga clara cuál va a ser, se mantendrá para el resto de pasos. A continuación, generaremos un mallado, es decir, dividiremos el espacio que ocupará el fluido en una serie de volúmenes de control sobre los que resolveremos las ecuaciones. Estos dos primeros pasos los realizaremos a partir de programas integrados en el software global ANSYS® pero diferentes de CFX.

Una vez generado el mallado pasaremos a definir los parámetros del input del código termohidráulico. Es el momento de especificar todos los detalles de los diferentes modelos matemáticos que utilizaremos, las condiciones de contorno, parámetros de cálculo, monitorización, etc.

Tras realizar este paso, tendremos preparado el modelo del sistema para iniciar el cálculo iterativo que resolverá las ecuaciones del momento, masa y energía (y adicionalmente aquellas necesarias en función de los modelos matemáticos utilizados) en cada una de las celdas en las que hemos dividido el espacio.

Si se han indicado correctamente los parámetros y el sistema tiene una solución físicamente posible, lo más probable es que, tras un número determinado de iteraciones, la solución vaya convergiendo hacia un resultado único. Si nuestro sistema es transitorio, tras converger la solución, avanzará un corto periodo de tiempo definido por el usuario (paso de tiempo), e iniciará de nuevo el proceso iterativo.

4.1. GEOMETRÍA

Partiendo de la información recogida en el apartado 3.2. Instalación Experimental *Vattenfall Research & Development*, podemos definir una geometría de la tubería tipo T. En nuestro caso nos interesa:

- Simular la menor cantidad de tubería posible para reducir al máximo el coste computacional y obtener tiempos de cálculo aceptables.
- Generar una geometría lo suficientemente grande como para captar todos los fenómenos que puedan afectar al cálculo de la fluctuación de temperatura cerca de la pared.

Como ya se mencionó previamente, se debe tomar una decisión a la hora de determinar la geometría de la tubería T. El razonamiento que se ha seguido en este trabajo consiste en diseñar tres geometrías diferentes (ver Figura 6). En primer lugar, generaremos una tubería de entrada de agua fría que utilizaremos para desarrollar un flujo a lo largo de 80 diámetros de longitud, tal y como realizaron en el experimento *Vattenfall*. El segundo paso consiste en generar una tubería para la entrada de agua caliente, de la misma manera que para la de agua fría, pero de 20 diámetros de longitud. Por último, diseñaremos una tubería en T en la que se permita que el flujo, una vez mezcladas las corrientes fría y caliente, se desarrolle hasta 20 diámetros de longitud.

Los dos conductos de entrada, agua caliente y fría, se utilizarán únicamente para desarrollar el flujo y obtener las condiciones de contorno a la salida de los mismos. Esto se realiza con el objetivo de no tener que simular estos tramos de tubería cada vez que se quiera lanzar una simulación diferente de la tubería en T. Los perfiles de velocidades que aparecen a la salida del conducto se tomarán como datos de entrada para la tubería en T (lo que se conoce como el "input" o fichero de entrada del modelo).

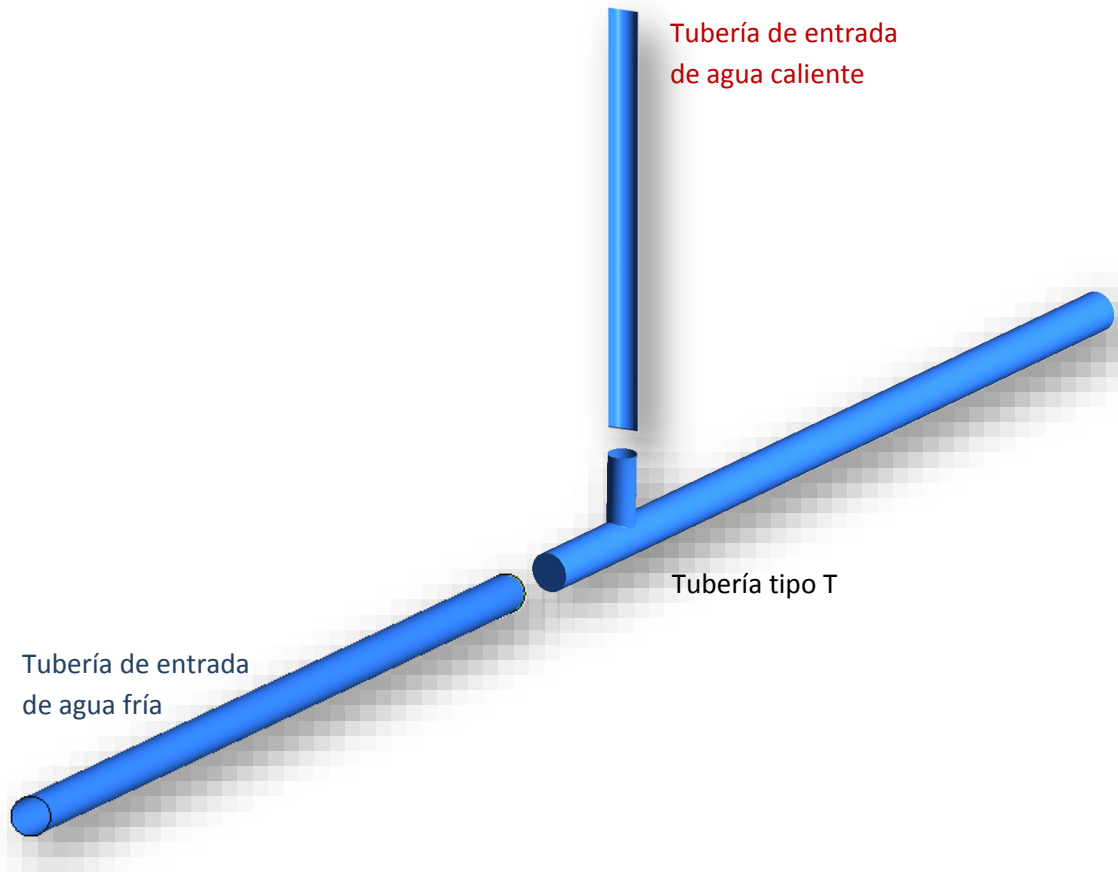


Figura 6. Esquema de las tres geometrías diseñadas para el modelo (no está a escala).

Las dimensiones exactas que se han utilizado para estos tramos de entrada se recogen en la Tabla 4. La tubería en T se representa en la Figura 7 donde se recogen las medidas de necesarias para diseñarla.

Tabla 4. Dimensiones de la sección principal de la instalación

COMPONENTE	LONGITUD [mm]	DIÁMETRO [mm]
Tramo tubería agua fría	11200	140
Tramo tubería agua caliente	2800	100

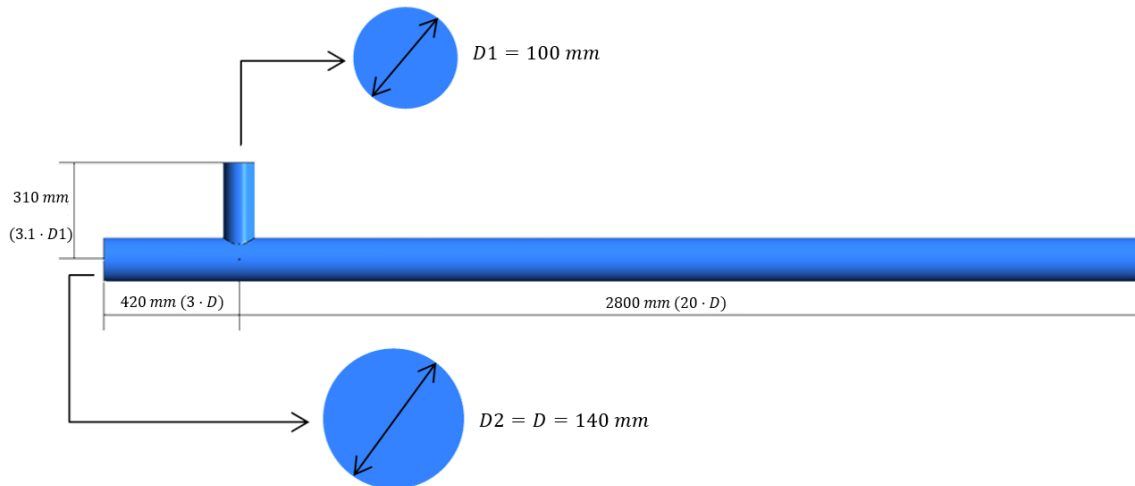


Figura 7. Dimensiones de la junta tipo T.

En este trabajo se ha utilizado el software *Design Modeler*, integrado en ANSYS® para generar estos cuerpos. De aquí en adelante nos referiremos a ellos como “dominios” del modelo. El siguiente paso es transferir el archivo con los dominios al programa ICEM CFD donde crearemos el mallado.

4.2. MALLADO

Las ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan el movimiento de los fluidos y la transmisión de calor pueden resolverse únicamente para casos muy simples. Por tanto, para el análisis de flujos, los dominios se dividen en pequeños subdominios, formados por hexaedros o tetraedros en el caso de dominios 3D, generalmente denominados como “celdas” o “elementos”. De esta manera, lo que se realiza es una discretización de las ecuaciones para resolverlas dentro de cada uno de estos elementos. Al conjunto de celdas de un dominio se le llama “mallado” (en inglés *mesh* o *grid*).

Los tres métodos más utilizados para la resolución del sistema de ecuaciones aproximado resultante son: volúmenes finitos, elementos finitos o diferencias finitas. Estos métodos definen la manera en que se integran las ecuaciones y las estrategias de cálculo. Casi todos los códigos utilizan uno de éstos tres métodos y es una de las principales diferencias entre ellos. CFX utiliza elementos finitos (también denominados vértices de celda o nodos) para discretizar el dominio, mientras que FLUENT utiliza volúmenes finitos (centros de celda).

El software ICEM CFD tiene implementados algoritmos de cálculo de malla tanto estructurada como no estructurada. El solver (motor de cálculo) que utiliza CFX calcula únicamente mallas no estructuradas por lo que se utilizará el correspondiente algoritmo de cálculo.

Adicionalmente, ICEM CFD nos permite seleccionar entre mallados hexaédricos, tetraédricos, o formados por prismas del número de caras que se desee. Para el caso de fluidos, donde habitualmente tendremos una sustancia que se mueve dentro del dominio, es recomendable

generar un mallado isotrópico y cuyas caras estén alineadas con la dirección en la que se mueve la sustancia.

Siguiendo las indicaciones del Manual de Usuario de mallado de ANSYS (Canonsburg 2011b), las buenas prácticas que se han seguido a la hora de generar la malla del dominio de la tubería tipo T son las siguientes:

- Alinear los elementos con el flujo.
- Refinar las celdas cerca de las paredes. Se recomendó un *Aspect Ratio* menor de 1.2 (parámetro de calidad explicado unas páginas más adelante).
- En flujos desarrollados pueden alargarse las celdas manteniéndolas siempre en el sentido del flujo (en este tipo de flujos habrá poca variación entre celdas contiguas en el sentido en el que se mueve el fluido).
- Evitar cambios bruscos en el mallado.
- Generalmente obtendremos mejores resultados con mallas hexaédricas
- Debe definirse la densidad de malla de tal manera que sea suficiente para capturar los procesos y fenómenos que sucedan.
- Es recomendable comenzar con un mallado grueso e ir refinando la malla hasta que se obtengan los mismos resultados (o con una diferencia muy pequeña).
- Junto a la pared deben definirse correctamente las capas de celdas con objeto de conseguir un cálculo de gradientes preciso.
- Como guía para el cálculo: Hasta 100.000 nodos se recomienda utilizar 1 procesador, a partir de esta cifra se irán añadiendo procesadores hasta aproximadamente 1.000.000 de nodos donde se recomienda utilizar ordenadores en paralelo y multiprocesador.

El desarrollo del mallado en ICEM CFD requiere de uso de “bloques”. Los bloques son representaciones aproximadas mediante líneas rectas del dominio que permiten al algoritmo adaptarse a las superficies curvas de la geometría. Se han diseñado bloques con superficies octogonales y rectangulares que servirán de base para el algoritmo de mallado (ver Figura 8).

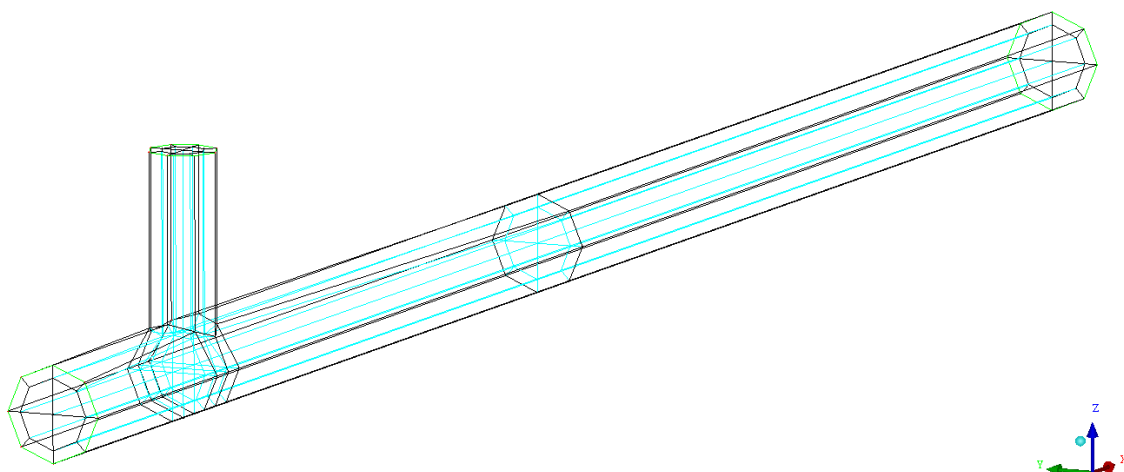


Figura 8. Bloques base de la tubería necesarios para el mallado.

A partir de estos bloques se han creado diferentes mallados atendiendo principalmente al número de nodos totales. En la Tabla 5 puede observarse que se han generado 6 mallados distintos y puede advertirse un adelanto de los casos que se han ejecutado sobre cada uno de ellos. Cabe destacar que se dispone del mallado de 5.1 millones de nodos, pero no se ha ejecutado todavía ningún caso debido a su alto coste computacional.

Tabla 5. Mallados generados atendiendo al número de nodos y casos que se han ejecutado con cada uno de ellos

ORDEN	MALLADO [Millones de nodos]	CASOS EJECUTADOS
1	0.8	10
2	1	5
3	1.8	2
4	3	4
5	3.8	2
6	5.1	0

En la Figura 9 se muestra el resultado obtenido, correspondiente al mallado de 3.8 millones de nodos. En la Figura 10 se observan las secciones de entrada de agua fría y agua caliente de la tubería. Cabe recalcar que el mallado cerca de la pared es mucho más refinado que en el centro de la tubería ya que es la zona donde más rápido varía la velocidad (gradiente) y donde queremos calcular la variación de temperatura. Por último, podemos advertir en la Figura 11 el detalle del mallado en un plano longitudinal X-Z. Se muestra este plano para recalcar el refinado que se ha diseñado para la zona en la que se producirá la mezcla y donde mayores fluctuaciones de temperatura aparecerán.

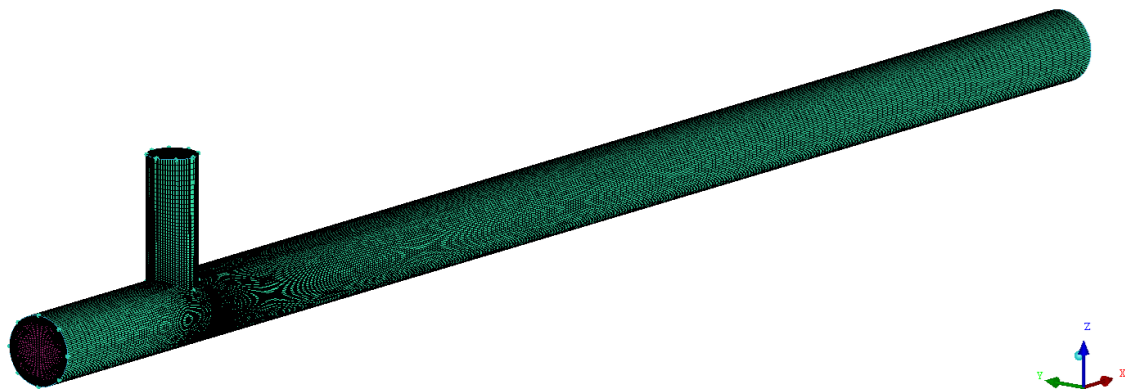


Figura 9. Mallado de 3.8 millones de nodos de la tubería.

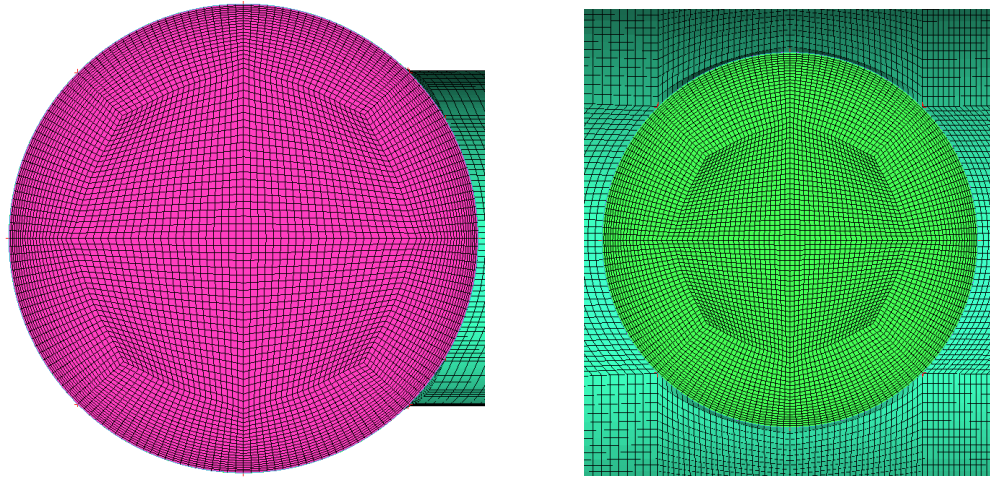


Figura 10. Detalles del mallado de las secciones de entrada de agua fría (izquierda) y caliente (derecha).

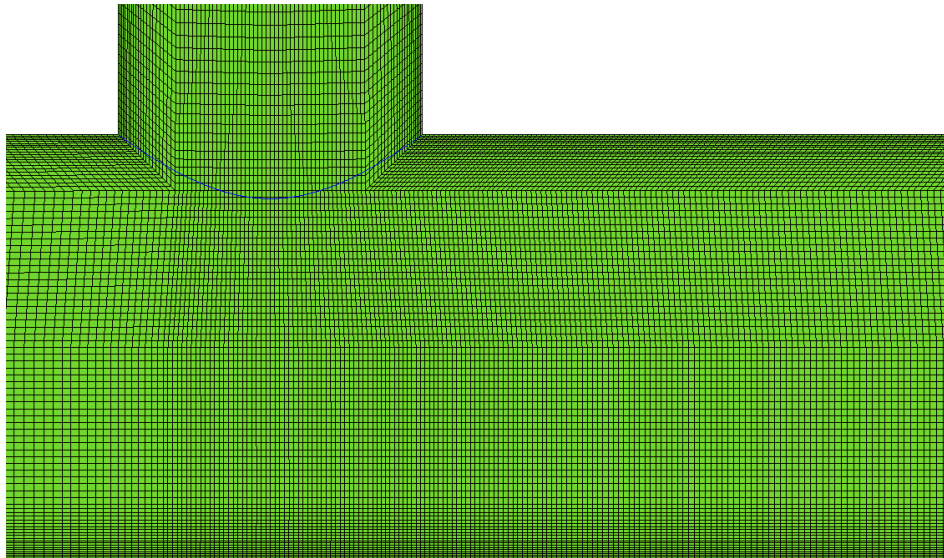


Figura 11. Detalle del mallado en un plano longitudinal que pasa por el origen de coordenadas.

Antes de finalizar este apartado, cabe mencionar algunos datos acerca de la calidad del mallado. A continuación, se muestra una lista con algunos de los más importantes. Se ha mantenido la nomenclatura en inglés al ser esta la que se emplea en este ámbito.

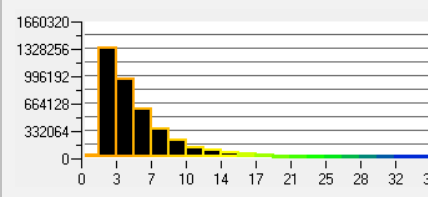
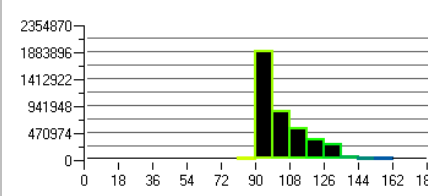
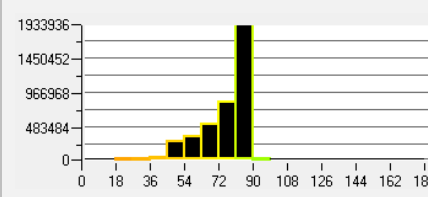
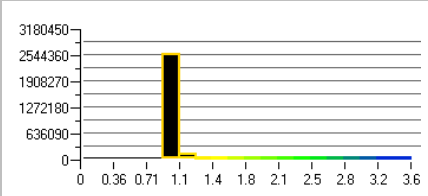
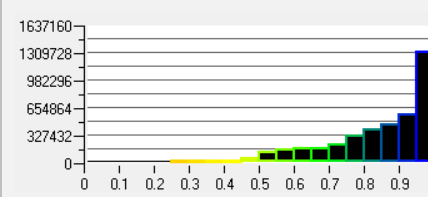
- **Quality:** Medida creada por ICEM CFD para el cálculo de la calidad global del mallado. Para determinar este valor se tienen en cuenta los siguientes parámetros de calidad:
 - Para elementos tetraédricos:
 - Skewness de la celda.
 - Para elementos hexaédricos:
 - Determinante: Ratio entre el menor y el mayor determinante de las matrices jacobianas computadas en cada vértice del elemento.

- Max Ortho: Mide la máxima desviación de los ángulos internos del elemento mayores de 90°.
- Max Warp: Mide el máximo ángulo entre los triángulos que se forman al conectar las diagonales de cada cara del elemento.
- Mesh Expansion Factor: Ratio de volumen entre celdas adyacentes.
- Aspect Ratio: Cociente entre las longitudes de la arista más larga y la más corta de una celda.
- Maximum Face Angle: Máximo ángulo de todas las caras que tocan un nodo.
- Minimum Face Angle: Mínimo ángulo de todas las caras que tocan un nodo.
- Element Volume Ratio: Se define como el cociente entre el máximo volumen y el mínimo volumen de los elementos que se encuentra en contacto con un mismo nodo (vértice).
- Skewness: Determina lo que se acerca una cara o celda a ser ideal. Puede calcularse de diferentes maneras. Algunos programas miden la relación entre los ángulos de las aristas de la celda. ICEM CFD realiza un cálculo complejo en el que intervienen los ángulos más grandes y pequeños de cada elemento y el ángulo del elemento regular correspondiente (60° para un triángulo, 90° para el cuadrado, etc.). Se puede decir que mide cuánto de similar es la celda con la celda ideal correspondiente (por ejemplo, cuánto se parece una celda hexagonal al cubo).

Dado que todos los parámetros se calculan para cada celda o nodo, una de las maneras más sencillas de observar el resultado es en forma de histograma, por ello, en la última columna de la Tabla 6 se muestra este gráfico; por ejemplo, para el parámetro Quality puede observarse que la mayoría de los valores están por encima de 0.9. Asimismo, en la Tabla 6 pueden observarse los valores de cada parámetro del mallado de 3.8 millones de nodos y los mínimos necesarios para una malla de buena calidad. Los datos recomendados se han extraído del Manual de Usuario de Mallado de ANSYS (Canonsburg 2011b) y del Manual de Usuario de Mallado propio de ICEM CFD integrado dentro del programa.

Tabla 6. Valores recomendados de los parámetros de calidad de la malla y valores obtenidos en el mallado de 3.8 Millones de Nodos.

PARÁMETRO CALIDAD	RECOMENDADO MALLA MUY BUENA CALIDAD	MALLADO 3.8 Millones de Nodos	GRÁFICO [Eje X nodos, Eje Y valor parámetro]
QUALITY	> 90 % por encima de 0.8	92.2% por encima de 0.8	
MESH EXPANSION FACTOR	< 20	< 5.6 (96.3% por debajo de 2)	

ASPECT RATIO	< 30	< 35 (88.2% por debajo de 10)	
MAXIMUM ANGLE FACE	< 170°	< 162° (98% por debajo de 125°)	
MINIMUM ANGLE FACE	> 10°	> 18° (98% por encima de 45°)	
ELEMENT VOLUME RATIO	< 10	< 3.6	
EQUIANGLE SKEWNESS	> 0.5	> 0.25 (98.4% por encima de 0.5)	

Para terminar, mencionar que este proceso se ha llevado a cabo para los conductos de desarrollo del fluido previo a la entrada en la junta tipo T. Se han desarrollado mallados para cada uno de ellos siguiendo la misma filosofía. Inicialmente se han utilizado los mallados más simples y, a continuación, se ha ido creando mallados más refinados para aumentar la precisión de los resultados.

4.3. CONDICIONES DE CONTORNO

Se entiende como condiciones de contorno a todos aquellos datos necesarios para definir el comportamiento del modelo en sus límites. Esto quiere decir que debemos aportarle al código la información necesaria para que entienda en qué condiciones está trabajando (presión, temperatura, etc.), qué entra o sale del dominio y por dónde lo hace, fuerzas externas que intervienen, características de las paredes...

En el caso que se estudia en este trabajo, las condiciones de contorno vienen definidas por el experimento *Vattenfall*. El objetivo es conseguir unas condiciones análogas utilizando toda aquella información disponible y que se pueda introducir en el código.

Los dominios están definidos por un conjunto de límites. Se denomina “Inlet” a aquel límite que permiten la entrada o salida de fluido, “Outlet” a los que sólo permiten salida, “Opening” a aquellos que permiten entrada y salida del fluido especificado, “Wall” a los que no permiten ni entrada ni salida y “Symmetry” a aquellos cuya magnitud es la misma a ambos lados del mismo. El dominio de este trabajo se define por cuatro límites (ver Figura 12):

- Inlet de entrada de agua caliente.
- Inlet de entrada de agua fría.
- Outlet de salida de la mezcla.
- Walls que limitan la salida de flujo simulando las paredes de la tubería.

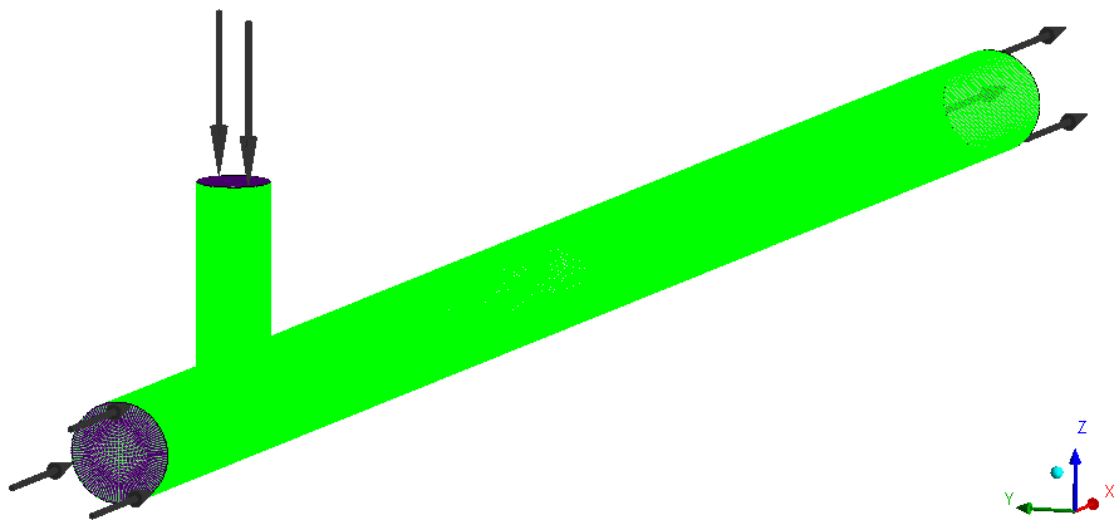


Figura 12. Límites del dominio, Inlets en morado, Wall en verde y Outlet punteado al final.

Las condiciones de contorno de los inlet están completamente definidas en los informes del experimento *Vattenfall* (Smith et al. 2011). En la Figura 13 y Figura 14 se muestran todas las medidas de velocidad necesarias para definir los flujos de entrada (agua caliente y agua fría). En la Tabla 7 están recogidos los valores de temperatura y caudal de los mismos así como la localización en las que se han medido.

Tabla 7. Condiciones de contorno de los Inlets del dominio.

Límite	Temperatura [°C]	Diámetro de la tubería* [mm]	Localización de medida [mm]	Caudal volumétrico [litros/s]
Inlet agua fría	19	140 (D)	-420 (-3D)	9
Inlet agua caliente	36	100 (D ₁)	-310 (-3.1D ₁)	6

*D diámetro tubería principal, D₁ diámetro tubería secundaria

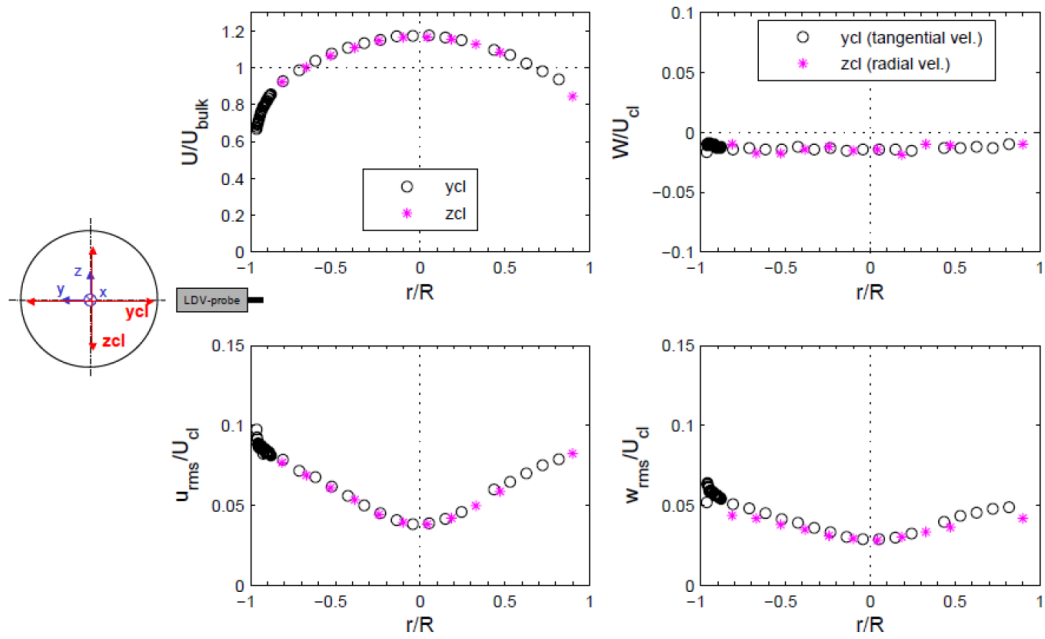


Figura 13. Medidas de velocidad y de las tensiones de Reynolds de la tubería de agua fría a 3D aguas arriba del punto de mezclado (origen de coordenadas). A la izquierda medidas de la componente axial de la velocidad (u) y a la derecha las de la componente transversal (w).

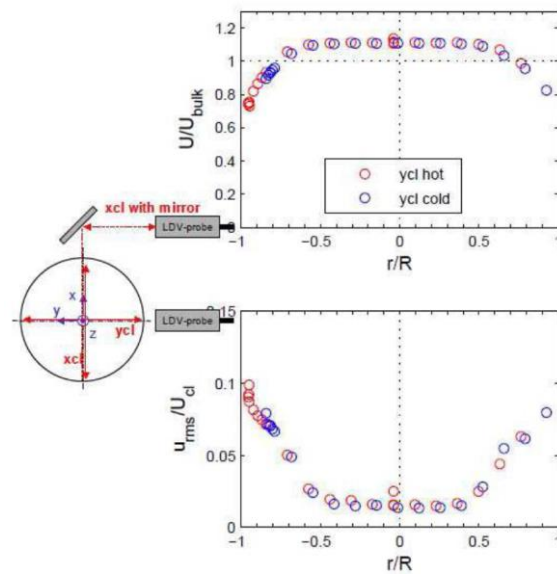


Figura 14. Medidas de velocidad y de las tensiones de Reynolds de la tubería de agua caliente a $3.1 D_1$ aguas arriba del punto de mezclado (origen de coordenadas). Medidas con agua caliente y con agua fría.

Para obtener unas condiciones lo más parecidas posible a éstas se han llevado a cabo una simulación para cada conducto de entrada. En la Figura 15 puede observarse los perfiles de velocidad que se han obtenido en las simulaciones.

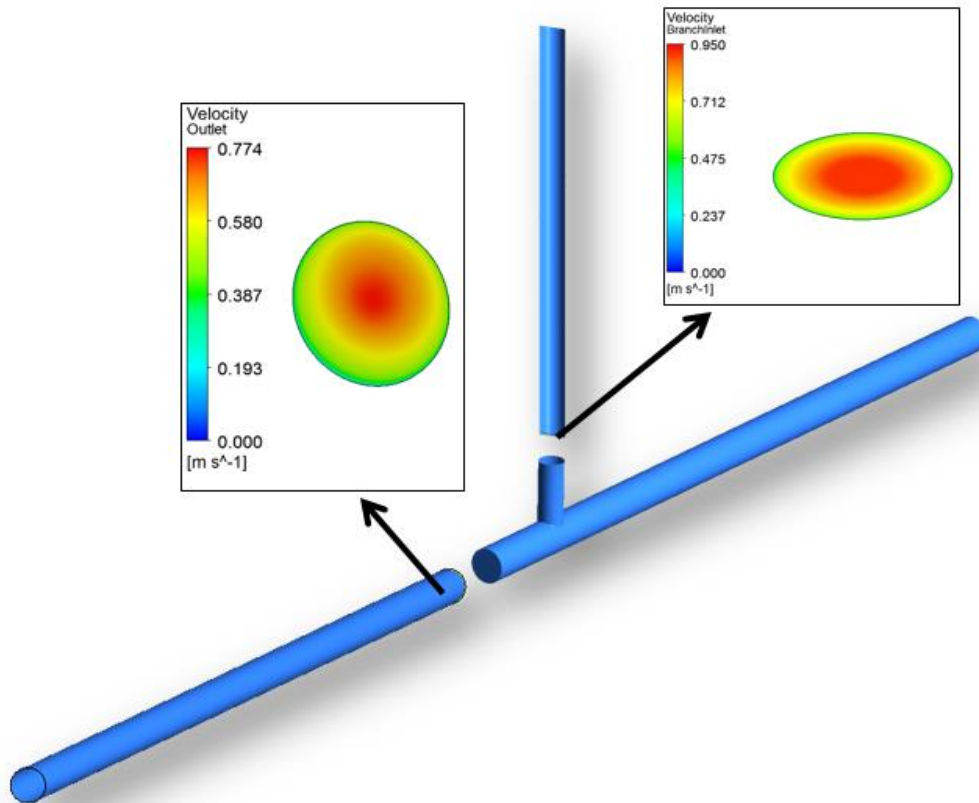


Figura 15. Perfiles de velocidad a la salida de los conductos de desarrollo de flujo.

El resultado que se ha obtenido tras varias pruebas se parece al medido experimentalmente, aunque no coincide por completo (ver Figura 16 y Figura 17). La velocidad en el centro de la tubería de agua fría para el caso experimental es de 0.86 m/s mientras que en el caso simulado asciende hasta los 0.91 m/s lo que supone un desvío de 0.05 m/s.

Puede observarse que en el caso de la tubería de agua caliente no se ha alcanzado el estado de flujo completamente desarrollado debido a los 20 diámetros hidráulicos de longitud comparado con los 80 de la tubería de agua fría.

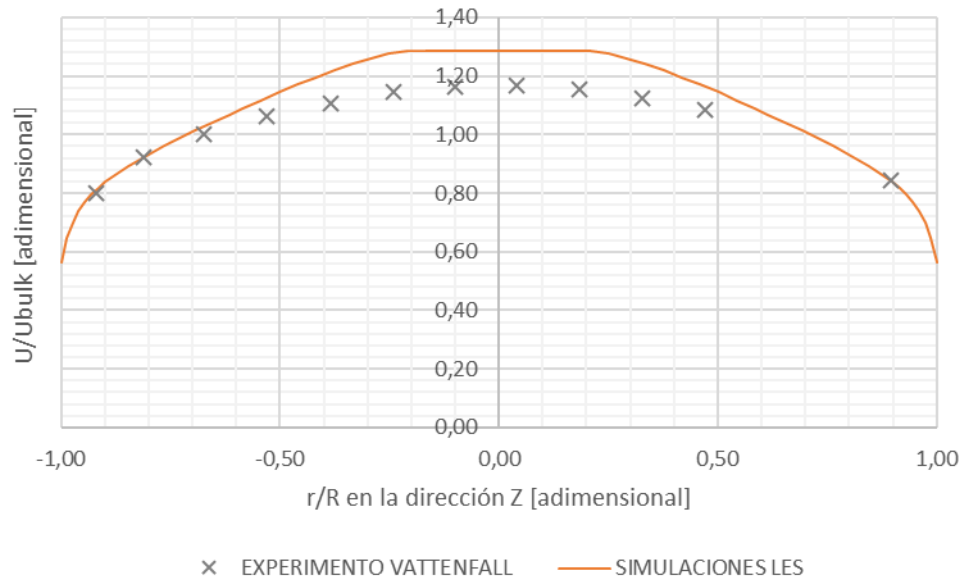


Figura 16. Comparativa del perfil de velocidad entre la entrada de agua fría en la simulación y en el experimento.

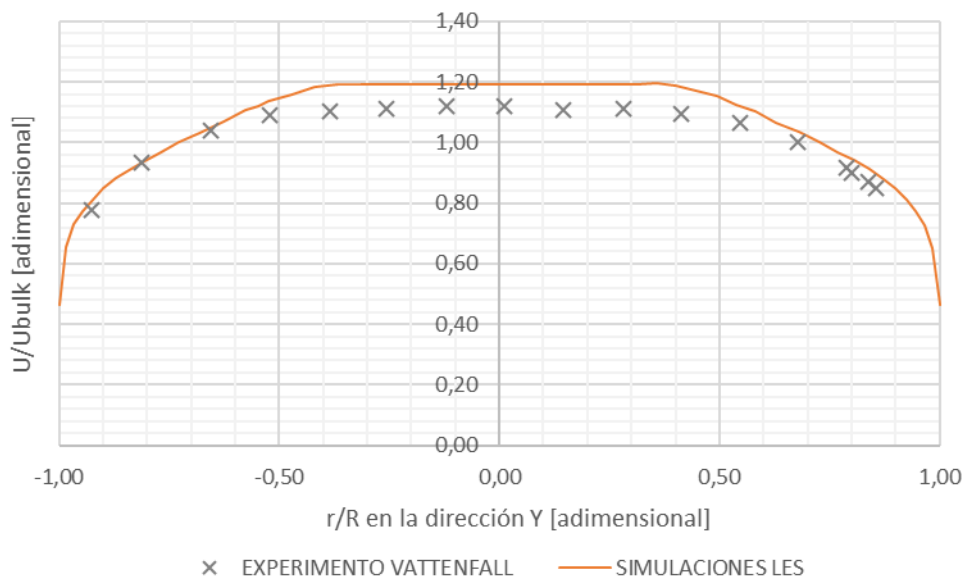


Figura 17. Comparativa del perfil de velocidad entre la entrada de agua caliente en la simulación y en el experimento.

En lo relacionado con el límite Wall, tal y como se indica en el informe de Smith et al. (2011), la pared se considera hidráulicamente lisa y la velocidad del fluido en la misma es igual a 0 por lo que ésta será la información que se implementará en el programa.

Por último, el Outlet situado al final de la tubería permitirá la salida de la mezcla y tendrá una presión similar a la de entrada de los fluidos. En este caso se ha realizado a presión ambiente por lo que la presión relativa será igual a 0.

4.4. METODOLOGÍA DE CÁLCULO

En este apartado se explican todos los detalles de los modelos y parámetros utilizados para la simulación. En este trabajo se intenta dar una visión completa de la metodología empleada explicando en qué consiste cada modelo y por qué se utiliza.

4.4.1. ESTADO DEL FLUJO. ESTACIONARIO VS. TRANSITORIO

En primer lugar, debemos diferenciar entre el cálculo de un estacionario y de un transitorio. Un estacionario es aquel estado del fluido en el que, tras el paso de un intervalo de tiempo suficientemente largo, las características no cambian con el tiempo. Esto es muy útil ya que, en muchas ocasiones, se puede considerar que un flujo es estacionario tras un desarrollo inestable del fluido.

Sin embargo, existen otros muchos escenarios en los que no es posible asumir que el flujo es estacionario y se necesitará información a tiempo real para determinar la evolución del mismo. Este comportamiento transitorio de los fluidos puede deberse a varias causas. En el caso de este trabajo, el comportamiento transitorio está inherentemente relacionado con las características del flujo ya que nunca se alcanzará un estado estacionario, aunque el resto de condiciones del flujo no varíen.

Adicionalmente hay que tener en cuenta que, si tratamos de lanzar una simulación de un flujo transitorio en estado estacionario, puede que el cálculo no consiga converger independientemente de la calidad de la malla o del intervalo de tiempo seleccionado. Uno de los factores que determina el estado transitorio es observar un comportamiento oscilatorio en los residuos de las ecuaciones de masa, momento y energía. En otras ocasiones, principalmente cuando utilizamos códigos muy robustos como CFX, sí conseguirán obtenerse resultados estacionarios, aunque el sistema sea transitorio (ver Figura 18).

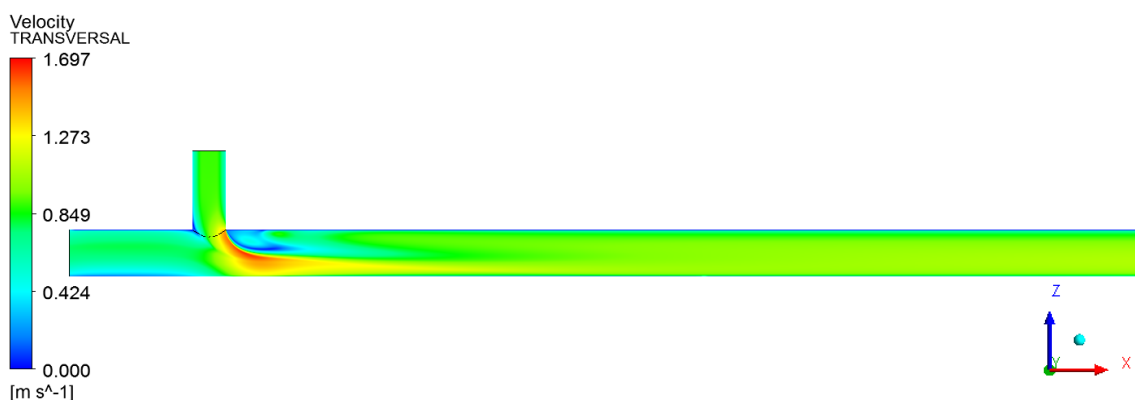


Figura 18. Plano longitudinal que pasa por el centro de la tubería sobre el que se representa la velocidad en estado estacionario.

Estos resultados, aunque son irreales, nos servirán de base para definir las condiciones iniciales del transitorio y favorecer una rápida convergencia del mismo en cada paso de tiempo. Como se ha mencionado previamente, el código resuelve las ecuaciones en cada nodo y repite estas

operaciones hasta obtener un resultado con un residuo por debajo del límite que se establezca. En el caso del transitorio, este proceso ha de realizarse para cada instante de tiempo. En la Figura 19 se muestra el estado del vector velocidad para el segundo 4.5 de una de las simulaciones transitorias.

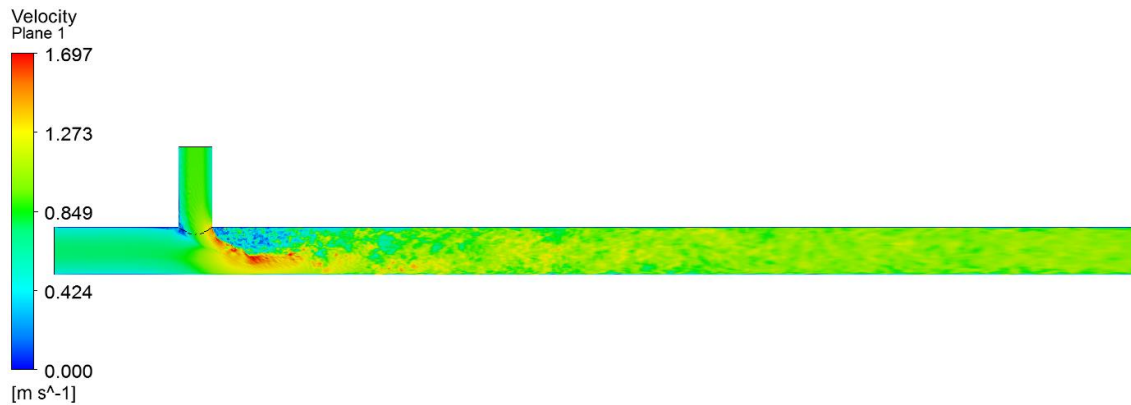


Figura 19. Plano longitudinal que pasa por el centro de la tubería sobre el que se representa la velocidad en el instante de tiempo 4.5s.

4.4.2. TURBULENCIA

La turbulencia es un régimen de flujo en el que el fluido está sometido a una serie de cambios caóticos en la presión y la velocidad. Hinze (1975) enunció la siguiente definición de turbulencia:

“El movimiento de un fluido turbulento es una condición irregular del flujo en el que varias variables muestran una variación caótica con el tiempo y con las coordenadas espaciales, por lo que se pueden obtener distintos valores promediados”.

Esta naturaleza irregular contrasta con el movimiento laminar, denominado así históricamente debido a que se pensaba que el fluido se desplazaba en láminas suaves o capas.

Los avances en dinámica de fluidos han permitido determinar que el número de Reynolds juega un papel muy importante en la turbulencia. Este número indica una medida de la importancia relativa de las fuerzas de inercia (asociadas con los efectos convectivos) y las fuerzas viscosas.

El número de Reynolds es adimensional y se define en [1] siendo ρ la densidad, v la velocidad del fluido, D el diámetro de la tubería y μ la viscosidad dinámica.

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot D}{\mu} \quad [1]$$

El fluido se encontrará en régimen turbulento cuando el número de Reynolds supere un valor característico denominado $Re_{crítico} = 2040$. En el caso de este trabajo podemos afirmar que se encuentra en régimen turbulento ya que el número de Reynolds es de 141164 [2], muy superior al $Re_{crítico}$.

$$Re = \frac{998 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \cdot 0.9 \left[\frac{m}{s} \right] \cdot 0.14 \left[m \right]}{8.899 \cdot 10^{-3} \left[\frac{N \cdot s}{m^2} \right]} = 141\ 164 \quad [2]$$

Para conocer cómo se comporta un fluido en una situación determinada pueden realizarse estudios experimentales con los que construir modelos. Sin embargo, con el desarrollo de la informática, los investigadores han comenzado a apoyarse en simulaciones numéricas de las ecuaciones que rigen el movimiento de los fluidos, las ecuaciones de Navier-Stokes [3] [4] [5] y [6]. Dado que estas ecuaciones son muy complicadas de resolver, en la mayor parte de las ocasiones se utilizan resoluciones aproximadas mediante diferentes métodos matemáticos.

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x \quad [3]$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y \quad [4]$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z \quad [5]$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad [6]$$

Existen tres formas básicas de abordar el problema:

- Modelos de turbulencia *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS)
- Simulación de grandes escalas de remolinos y modelado de las pequeñas escalas: *Large-Eddy Simulations* (LES)
- Simulación numérica directa o *Direct Numerical Simulation* (DNS)

La simulación numérica directa o DNS consiste en la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes sin la utilización de ningún modelo de turbulencia. Este es un proceso que tiene un alto coste computacional, varios órdenes de magnitud por encima del resto de técnicas, y no será objeto de este trabajo. En los siguientes apartados se explicará con más detalle los modelos de turbulencia RANS y LES que, como se verá más adelante, son los que se han utilizado en las simulaciones del presente documento. Todos estos modelos tienen una serie de variables ajustables por el usuario en el fichero de entrada por lo que, al utilizar estos códigos, se debe conocer perfectamente las ecuaciones en que se basan los diferentes modelos de turbulencia.

4.4.2.1. MODELOS DE TURBULENCIA RANS

Una de las técnicas tradicionales y más extendidas para resolver estas ecuaciones es la de descomponer las variables en una parte media y otra fluctuante. Así promediando las ecuaciones obtenemos las ecuaciones de Reynolds, denominadas RANS por sus siglas en inglés *Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations*. Dado que las ecuaciones de Navier-Stokes son no

lineares, en las ecuaciones RANS aparece un término no lineal conocido como “tensiones de esfuerzo de Reynolds”:

$$\tau_{xx} = -\rho \overline{u'^2} \quad \tau_{yy} = -\rho \overline{v'^2} \quad \tau_{zz} = -\rho \overline{w'^2} \quad [7]$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = -\rho \overline{u'v'} \quad \tau_{xz} = \tau_{zx} = -\rho \overline{u'w'} \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = -\rho \overline{v'w'} \quad [8]$$

Por tanto, para obtener los valores de velocidad y presión medios necesitamos modelar estos términos como funciones de los valores promedio del flujo. Existen muchos modelos que utilizan esta técnica entre los que destacamos:

- Modelos lineales:
 - Modelo de Prandtl
 - Modelo $k-\varepsilon$ (con sus variantes: estándar, RNG, realizable, etc.)
 - Modelo $k-\omega$ (variantes: Wilcox, Near-wall treatment, etc.)
 - *Shear Stress Transport (SST)*
- Modelos no lineales:
 - Cubic $k-\varepsilon$
 - *Explicit Algebraic Reynolds Stress Models (EARSM)*
 - *Scale Adaptive Simulation (SAS)*

De entre todos estos modelos, $k-\varepsilon$ y $k-\omega$ son los más conocidos. Ambos introducen dos nuevas variables de cálculo: “k” en ambos casos y “ε” u “ω” según el modelo utilizado.

- “k” hace referencia a la energía cinética turbulenta (*Turbulence Kinetic Energy* o *TKE* en inglés) y se define como la variación de las fluctuaciones de velocidad (medida generalmente en m^2/s^2).
- “ε” corresponde a la disipación turbulenta (*Turbulence Eddy Dissipation*) y puede definirse como la velocidad de disipación de las fluctuaciones de velocidad.
- “ω” corresponde a la frecuencia de turbulencia (*Turbulent Frequency*)

Adicionalmente a estas variables, los modelos incluyen constantes. En el modelo $k-\varepsilon$ se utilizan $C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, \sigma_k$ mientras que en $k-\omega$ se utilizan $\alpha, \beta, \beta', \sigma_k, \sigma_\omega$. Las dos ventajas más importantes de estos modelos son la velocidad de cálculo y la gran validación por parte de la comunidad científica. A pesar de utilizar constantes y reducir el cálculo de la turbulencia a pequeñas operaciones, los modelos estiman el comportamiento con bastante fidelidad. No obstante, en ningún caso podrán obtenerse soluciones de gran precisión (sobre todo en transitorios) ya que el objetivo de estas técnicas es aproximar los valores que permiten calcular los efectos turbulentos.

En términos generales, se puede afirmar que $k-\varepsilon$ es un modelo que funciona mejor en la parte central de los flujos en tubería mientras que $k-\omega$ aproxima mejor los resultados en las zonas más próximas a la pared. A raíz de este razonamiento, surge un modelo nuevo, que trata de aprovechar las ventajas de cada uno de ellos. Para lograr este objetivo, utiliza la denominada “función de mezcla” (*blending function*) que se calcula a partir de la distancia a la superficie más cercana y de las variables de flujo (velocidad, viscosidad, etc.). Esta función es crítica y de ella dependerá el éxito del modelo.

Los modelos clásicos RANS son los más empleados en códigos CFD mientras que los modelos DNS de simulación numérica directa siguen consumiendo excesivos recursos computacionales por lo que prácticamente no se utilizan. En la actualidad, se está comenzando a extender el uso de modelos comprendidos entre la simulación numérica directa y los modelos clásicos RANS denominados *Large-Eddy Simulations* (LES).

4.4.2.2. MODELO DE TURBULENCIA LES

Al comenzar a estudiar el modelo LES lo primero que se observa es que existen multitud de formas diferentes de afrontar el problema. El modo de filtrado más extendido es conocido como “filtro de convolución” (*Band-Pass Filtering*) pero existen una abundante cantidad de métodos diferentes (como *Ensemble-Averaged Models* o *Regularized Navier-Stokes Models*).

La estrategia que se emplea con el “filtro de convolución” para la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes se basa en la utilización de una “función filtro” que deje pasar sólo las grandes escalas de remolinos dejando las pequeñas escalas para resolver mediante un modelo complementario. Para conseguir este filtrado se pasa al espacio de fases k y ω (k representa la variación en espacio y ω la variación en tiempo) mediante la transformada de Fourier, y se desechan los valores grandes de k , que están asociados a los pequeños remolinos.

Utilizando esta técnica se descompone la variable en una componente filtrada y una residual. La componente filtrada representa el movimiento de grandes remolinos y será tridimensional y dependiente del tiempo. Por el otro lado, la componente residual representa los torbellinos más pequeños y es considerada utilizando un modelo de escala de subcuadrícula (*Subgrid-Scale Models* o Modelos SGS).

CFX Para explicar el procedimiento que utiliza el modelo LES de CFX supondremos una variable θ determinada. La parte filtrada de la variable se denota como $\bar{\theta}$ y se define en [9] siendo D el dominio del fluido y G la “función filtro”.

$$\bar{\theta}(x) = \int_D \theta(x') G(x; x') dx' \quad [9]$$

La componente residual se denota como θ' y está definida en [10].

$$\theta' = \theta - \bar{\theta} \quad [10]$$

CFX utiliza la siguiente “función filtro” $G(x; x')$ [11].

$$G(x; x') = \begin{cases} 1/V & \text{si } x' \in V \\ 0 & \text{resto de casos} \end{cases} \quad [11]$$

Por lo que, podemos implementar $G(x; x')$ directamente en la discretización del dominio en volúmenes de control de la siguiente manera [12].

$$\bar{\theta}(x) = \frac{1}{V} \int_V \theta(x') dx', \quad x' \in V \quad [12]$$

Las ecuaciones de Navier-Stokes ya filtradas (el filtro conmuta con la derivación $\overline{\partial\theta}/\partial s = \partial\bar{\theta}/\partial s$) quedan de la siguiente manera [13].

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u_i u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad i = 1,2,3 \quad [13]$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$

En estas ecuaciones observamos que aparece un término no lineal $(\overline{u_i u_j})$ que deberá tratarse. La forma más común y la que utiliza CFX es la “Descomposición de Leonard”. Tras una serie de operaciones se llega a [14].

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad [14]$$

En esta ecuación aparece por primera vez el término τ_{ij} que corresponde al tensor de subgrid [15]. Este es el parámetro donde se incluyen los efectos de las pequeñas escalas de turbulencia.

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho u_i u_j} + \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j \quad [15]$$

Tal y como indica la Guía Teórica del Solver de CFX (ANSYS Inc. 2015), el código CFX utiliza un modelo SGS basado en una variable denominada *Eddy Viscosity*, que representa la transferencia de momento causada por los remolinos turbulentos. Esta variable también se utiliza en los modelos RANS, sin embargo, en el modelo LES solamente se utiliza para los pequeños remolinos. A continuación, se muestra el enfoque que utiliza CFX para resolver τ_{ij} [16] relacionando éste con la *Eddy Viscosity* μ_{sgs} y con el tensor de esfuerzo de gran escala \bar{S}_{ij} [17].

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} = 2 \mu_{sgs} \bar{S}_{ij} \quad [16]$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad [17]$$

En CFX tiene implementados tres modelos SGS. Estos tres modelos están bastante relacionados entre sí y se diferencian entre ellos en la forma en que calculan la *Eddy Viscosity* (μ_{sgs})

- Modelo *Smagorinsky*
- Modelo *Wall-Adapted Local Eddy-viscosity* o WALE.
- Modelo *Dynamic Smagorinsky-Lilly*

El **modelo Smagorinsky** es un modelo algebraico basado en un análisis dimensional. Para el cálculo de μ_{sgs} utiliza una constante C_s conocida como “constante de Smagorinsky” [18].

$$\mu_{sgs} = \rho (C_s \Delta)^2 |\bar{S}| \quad [18]$$

$$\Delta = \sqrt[3]{V} \quad [19]$$

$$|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}} \quad [20]$$

$$C_s = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{3C_k} \right)^{3/4} \quad [21]$$

La constante C_s no es universal (varía entre 0.065 y 0.25 dependiendo del flujo y del mallado) por lo que el modelo puede presentar errores si no se selecciona su valor correctamente. El valor por defecto de C_s es 0.18. Adicionalmente, hay que tener en cuenta que el modelo necesita utilizar una “función de amortiguación” cerca de la pared con objeto de mitigar la viscosidad turbulenta.

$$\mu_{sgs} = \rho \min(l_s, f_\mu C_s \Delta)^2 |\bar{S}| \quad [22]$$

$$l_{mix} = k \cdot y_{wall}$$

Siendo k una constante con valor 0.4 por defecto, y_{wall} la distancia a la pared y f_μ la “función de amortiguación”. Esta función puede mantenerse en un valor constante o utilizarse la función predefinida de Van Driest o la de Piomelli.

El **modelo WALE** utiliza una ecuación para el cálculo de μ_{sgs} un poco más compleja.

$$\mu_{sgs} = \rho (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} \quad [23]$$

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} (\bar{g}_{ij}^2 + \bar{g}_{ij}^2) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \bar{g}_{kk}^2 \quad [24]$$

$$\bar{g}_{ij}^2 = \bar{g}_{ik} \bar{g}_{kj} = \sqrt[2]{\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}} \quad [25]$$

En la ecuación [23] S_{ij}^d denota la parte simétrica residual del cuadrado del tensor gradiente de velocidad mientras que δ_{ij} es una constante denominada Símbolo de Kronecker. C_w es otra constante, calibrada para un flujo de turbulencia isotrópica que cae libremente, que toma por defecto el valor de 0.5. La principal ventaja de éste modelo es la capacidad para reproducir la transición entre laminar y turbulento que tiene lugar en las cercanías de la pared.

El **modelo Dynamic Smagorinsky-Lilly** añade un método de evaluación de los coeficientes utilizados en el proceso de cálculo utilizando información del campo de velocidades. Por tanto, las constantes dejan de ser valores fijos, variando y ajustándose automáticamente según el tipo de flujo.

La ecuación base del modelo es muy similar al modelo Smagorinsky pero la clave está en el proceso de cálculo del coeficiente C_d .

$$\mu_{sgs} = \bar{\rho} C_d \Delta^2 |\bar{S}_{ij}| \quad [26]$$

La idea básica de este modelo dinámico es el uso de una función algebraica que filtra las escalas pequeñas en dos anchos diferentes. El filtrado de las escalas más pequeñas viene dado por el tamaño de la malla en sí, mientras que el segundo filtrado (de escalas un poco más grandes) requiere el uso de una expresión algebraica.

$$L_{ij} = T_{ij} - \{\tau_{ij}\} = -\{\bar{\rho}\bar{u}_i\bar{u}_j\} + \frac{\{\bar{\rho}\bar{u}_i\} + \{\bar{\rho}\bar{u}_j\}}{\{\bar{\rho}\}} \quad [27]$$

T_{ij} denota el tensor de subgrid a escala $\{\Delta\}$ mientras que τ_{ij} denota el tensor de subgrid a escala Δ . Utilizando [27] calculamos el tensor de movimiento turbulento L_{ij} intermedio entre Δ y $\{\Delta\}$. El cálculo de C_d se realiza mediante este tensor y la denominada *Germano Identity* [28].

$$L_{ij}^a = L_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} L_{kk} \quad [28]$$

$$M_{ij} = m_{ij}^{test} - \{m_{ij}^{sgs}\} \quad [29]$$

$$C_d = \frac{L_{ij}^a M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}} \quad [30]$$

De esta manera, el coeficiente C_d varía en tiempo y en espacio. Este ajuste proporciona grandes ventajas al modelo permitiendo suplir las deficiencias del modelo Smagorinsky. Sin embargo, para evitar la inestabilidad numérica producida por la variación de C_d se impone un límite superior e inferior para el coeficiente y un cálculo de relajación en tiempo.

Límite inferior: $C_d = \max(C_d, C_d^{min}), \quad C_d^{min} = 0 \quad [31]$

Límite superior: $C_d = \min(C_d, C_d^{max}), \quad C_d^{max} \text{ entre } 0.04 \text{ y } 0.09 \quad [32]$

Relajación: $C_d^{\sim n} = \alpha C_d^n + (1 - \alpha) C_d^{\sim n-1} \quad [33]$

El valor de C_d^{max} debe estar en el rango de 0.04 a 0.09. El valor por defecto de CFX es de 0.04 habiendo sido calibrado para un flujo de turbulencia isotrópica que cae libremente.

Cabe destacar que, en la Guía de Referencia de CFX (Canonsburg 2011a) recomiendan el uso de mallados muy finos cuando se utilice LES debido a que las escalas de longitud de turbulencia cerca de la pared se vuelven muy pequeñas. Aunque se realizarán pruebas con los mallados más gruesos, los resultados que se muestren en este trabajo serán los obtenidos de simulaciones con mallado fino.

CFX tiene implementados 22 modelos de turbulencia distintos. El modelo LES sólo puede utilizarse para el cálculo de transitorios por lo que, de entre el resto de modelos, se ha decidido utilizar *Shear Stress Transport (SST)* para la simulación de estacionarios y el modelo *Large-Eddy Simulation (LES)* para los transitorios.

4.4.3. ESQUEMA DE TRANSPORTE (ADVECTION SCHEME)

El *Advection Scheme* corresponde al modelo utilizado para el transporte de propiedades de una celda a otra. Como se ha mencionado previamente, CFX utiliza un método de discretización de elementos finitos por lo que las soluciones de las variables y del fluido se almacenan en los nodos o vértices de las celdas. El código construye un volumen de control alrededor de cada nodo definido por la unión de los centros de las aristas y los centros de la celda del nodo correspondiente.

El siguiente paso consiste en la discretización de las integrales de volumen y de superficie. Las integrales de volumen se discretizan dentro de cada sector de elemento y se acumulan en el volumen de control al que pertenecen. Las integrales de superficie se discretizan en unos puntos denominados *integration points* localizados en el centro de cada segmento de superficie dentro de la celda y se distribuyen a los volúmenes de control adyacentes (ver Figura 20).

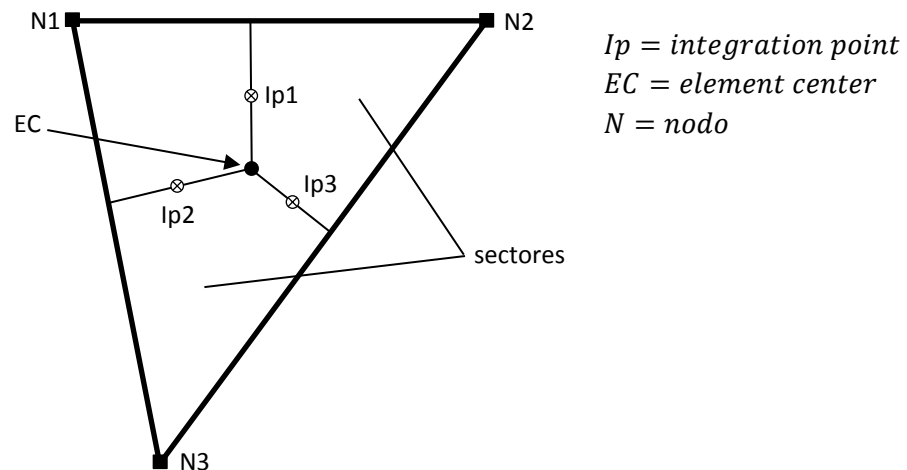


Figura 20. Un elemento de la malla en 2D sobre el que se aplica el algoritmo numérico de discretización de integrales de volumen y de área.

Para esta discretización de las integrales ha de utilizarse un método determinado. CFX ofrece la posibilidad de utilizar dos: *First Order Backward Euler Scheme* o *Second Order Backward Euler Scheme*. Según nos indica la Guía Teórica del Solver CFX (ANSYS Inc. 2015) para mejor precisión en transitorios es preferible el uso de un esquema de segundo orden. Sin embargo, además de incrementar el coste, las aproximaciones de segundo orden que se llevan a cabo son generalmente menos estables numéricamente, lo que puede producir problemas de convergencia.

Para algunas ecuaciones será necesario el cálculo previo de gradientes en los nodos. El código, por defecto, utiliza el teorema de divergencia de Gauss para evaluar dichos gradientes utilizando los ya mencionados "integration points" (en adelante ip). Dado que las soluciones se guardan en los nodos, para este cálculo, se necesitará calcular los valores en los ip. Previo al cálculo de esto, CFX debe localizar los ip utilizando "funciones de forma" basadas en elementos finitos. Dependiendo de la forma que tengan los elementos se describirá una serie de funciones lineares que permiten aproximar las coordenadas de los ip dentro de la celda.

El siguiente paso de este proceso es el cálculo del transporte de las propiedades de una celda a la siguiente (*advection scheme*). Para ello, CFX debe calcular las propiedades en los ip utilizando uno de los cinco métodos que tiene implementados. Este trabajo no pretende entrar en detalle en el cálculo de cada uno de estos esquemas, pero sí mencionar las características más importantes:

- Esquema Upwind de primer orden (*First Order Upwind Differencing Scheme*). Esquema muy robusto, pero con problemas de difusión numérica (más adelante se explica este fenómeno) por lo que el método tiende a introducir errores cuando los gradientes son bastante acusados.
- Esquema con factor de mezcla específico (*Specified Blend Factor*). Permite introducir el parámetro β del esquema de Upwind de primer orden entre 0 y 1. Cuando sea 0 coincidirá con el Esquema Upwind de primer orden y, cuando sea 1, coincidirá con el High Resolution de segundo orden.
- Esquema Alta Resolución (*High Resolution*). Utiliza un método para mantener el valor de β lo más cercano a 1 posible. Este esquema es uno de los más empleados ya que es robusto y preciso al mismo tiempo.
- Esquema de Diferencias Centrales (*Central Difference Scheme*). Esquema de segundo orden poco difusivo. Útil en caso de tener fluidos no encerrados y con alto componente transversal al flujo.
- Esquema de Diferencias centrales encerrado (*Bounded Central Difference Scheme*). El esquema de Diferencias Centrales es muy preciso desde el punto de vista de la difusión numérica. Sin embargo, en muchos casos tiene problemas cuando se encuentra cuerpos inmóviles o cuando el fluido se encuentra rodeado por paredes. Para estos casos se ha desarrollado un esquema capaz de suplir las carencias del anterior.

Uno de los mayores problemas cuando se trata simular un escenario con códigos CFD es un fenómeno, inherente al este proceso de cálculo matemático, denominado “difusión numérica”. Este suceso da lugar a un aumento de la amortiguación de las variables del medio simulado respecto al medio real. Para prevenir la difusión numérica es necesario tener en cuenta varios aspectos. En primer lugar, debemos utilizar un mallado lo suficientemente refinado como para calcular las pequeñas variaciones de temperatura y, en segundo lugar, utilizar un esquema numérico de alto orden.

Una vez expuesto todo esto, el siguiente paso consiste en seleccionar el esquema que mejor se ajusta a las características del escenario de la tubería tipo T. En *Best Practice Guidelines for the Use of CFD in Nuclear Reactor Safety Applications* (Mahaffy et al. 2014) se indica que para el modelo de turbulencia LES deben utilizarse esquemas de alto orden no difusivos como el *Stabilized Centred Scheme* o el *Central Difference Scheme*. Dado que la tubería es un espacio confinado, el modelo de Diferencias Centrales puro puede no funcionar correctamente en algunas ocasiones y por ello se ha decidido utilizar el *Bounded Central Difference Scheme*.

Antes de finalizar, es importante destacar que la mayor parte de autores han utilizado este esquema en sus simulaciones (ver Tabla 2. Listado de artículos de casos PTS en tuberías tipo T.). En concreto, en uno de los artículos (Jayaraju et al. 2010) se llega a especificar el valor de un parámetro de este esquema denominado “factor de mezclado”. Este factor es el encargado de

hibridar el esquema de diferencias centrales (sin difusión, pero de baja estabilidad) con un esquema upwind (con alta difusión y robustez). Cuanto más bajo sea el valor de este factor más presente estará el esquema de diferencias centrales y menos el upwind. En el artículo se menciona que el valor utilizado es de 0.1 no obstante, en las simulaciones realizadas para este trabajo se ha utilizado 0.25, el valor por defecto de CFX para este tipo de situaciones.

4.4.4. TIEMPO DE SIMULACIÓN Y PASO DE TIEMPO

Tanto el tiempo de simulación como el paso de tiempo se deben seleccionar de forma premeditada. En primer lugar, el tiempo de simulación hace referencia al tiempo total que se utiliza para el cálculo y que marca el final de la simulación (diferente del tiempo que tarda nuestro ordenador en calcular la simulación). El tiempo de simulación se seleccionará atendiendo principalmente a dos criterios:

- Debe transcurrir el suficiente tiempo de simulación como para obtener las propiedades medias en todos los puntos de la tubería. Cada una de las propiedades irá variando a lo largo del tiempo por lo que no nos vale la medida de un momento puntual sino el promedio de esa propiedad a lo largo de un tiempo determinado. En (Ndombo & Howard 2011) se realizó un pequeño análisis del tiempo de simulación y determinaron que con 9 segundos se obtenían suficientes datos.
- Debe transcurrir el suficiente tiempo de simulación como para obtener las bajas frecuencias del espectro de temperaturas. La frecuencia es inversamente proporcional al tiempo [34] por tanto para frecuencias bajas necesitaremos un tiempo de simulación elevado. Tal y como se mencionó en el Capítulo 2, (Lee et al. 2009) determinaron que el rango de frecuencias que más favorece la fatiga térmica está comprendido entre 0.1 y 1 Hz. Siendo 0.1 la frecuencia más baja que deseamos observar, el tiempo de simulación debe ser igual o superior a 10s.

$$f[\text{Hz}] = 1/t[\text{s}] \quad [34]$$

De los dos criterios debemos seleccionar el más restrictivo y simular a lo largo de un tiempo superior al mismo por lo que se ha decidido simular a lo largo de 10 segundos sin tener en cuenta el primer segundo para las propiedades medias. De todas las simulaciones realizadas, la última ha sido llevada a cabo a lo largo de 11 segundos en lugar de 10.

El paso de tiempo debe definirse correctamente para flujos donde las propiedades varían con el tiempo, como es el caso de nuestra tubería. En otras palabras, se debe especificar el tiempo entre cada una de las soluciones iterativas del código, es decir, el tiempo que transcurrirá en cada cálculo de convergencia desde 0 segundos hasta el tiempo de simulación definido. Siempre que se utilice el modelo de turbulencia LES es importante que se seleccione un paso de tiempo muy pequeño con el fin de evitar amortiguaciones de la turbulencia.

En *Best Practice Guidelines for the Use of CFD in Nuclear Reactor Safety Applications* (Mahaffy et al. 2014) se indica que una partícula de fluido debe permanecer al menos 3 pasos de tiempo en una misma celda antes de pasar a la siguiente. No obstante, se indica que esta verificación no hace falta tenerla en cuenta siempre y cuando se asegure que el número de Courant es inferior a la unidad.

Por tanto, un parámetro fundamental que debe estimarse antes de lanzar una simulación es el *Número de Courant-Friedrich-Levy* (o simplemente CFL). Este parámetro se define como la relación entre el paso de tiempo (Δt) y el tiempo de residencia de una partícula de fluido en una determinada celda ($\Delta x/u$) [35].

$$CFL = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad [35]$$

El número CFL definirá el límite superior del paso de tiempo que asegura la convergencia de las soluciones a cada paso de tiempo. Para el escenario de la tubería en T el número de Courant debe mantenerse por debajo de 1 en todas las celdas de la malla. No obstante, el código CFX es muy robusto y está dotado de las herramientas suficientes para conseguir la convergencia de la solución incluso con números CFL por encima de la unidad.

Dado que a priori se desconoce la velocidad que tiene el fluido en cada punto y la distancia entre nodos es muy variable, se hace muy complicado estimar el número de Courant. En la Tabla 2. *Listado de artículos de casos PTS en tuberías tipo T*. se han recogido los valores del paso de tiempo que han utilizado los investigadores en sus simulaciones. Partiendo desde un paso de tiempo de 5 ms se ha ido verificando el número CFL tras las simulaciones y ajustando hasta fijarse en un valor de 0.75 ms para un mallado de casi 1 millón de nodos. El número de Courant se ha mantenido en torno a 0.2 en la mayor parte del dominio alcanzando los 1.79 en la zona más crítica.

La última simulación se ha llevado a cabo con 3.8 millones de nodos y un paso de tiempo de 0.6 ms. En la Figura 21 se puede observar el número de Courant a lo largo de un plano longitudinal central de la tubería con la escala restringida entre 0 y 1. El número de Courant se mantiene por debajo de 1 en la mayor parte del dominio a excepción de una pequeña zona donde asciende a hasta 2.



Figura 21. Número de Courant en un plano longitudinal que pasa por el origen en el segundo 11 de simulación. Escala limitada entre 0 y 1.

En la Tabla 8 se recogen todas las simulaciones que se han realizado previas a la redacción de este trabajo. El encabezado de la tabla recoge todos los parámetros que se han descrito en esta sección y se ha utilizado una leyenda de colores para agrupar las simulaciones por grupos.

Tabla 8. Simulaciones realizadas.

Boundary Conditions	Estacionario	Transitorio corto	Transitorio largo	Simulación fallida
---------------------	--------------	-------------------	-------------------	--------------------

Orden	Geometría	Tipo de malla [Nodos]	Estacionario / Transitorio	Modelo de turbulencia	Esquema de transporte	Tiempo total simulación [s]	Paso de tiempo [s]	¿Finalizado?	Tiempo computación [dd-hh-mm]
1	Main Inlet	-	Estacionario	SST	High Resolution	-	Auto	Si	
2	Branch Inlet	-	Estacionario	SST	High Resolution	-	Auto	Si	
3	Tee	3M	Estacionario	SST	High Resolution	-	Auto	Si	< 1h-00m
4	Tee	3M	Transitorio	SST	High Resolution	4	0.01	Si	7h-50m
5	Tee	3M	Transitorio	SAS	High Resolution	4	0.01	Si	8h-30m
6	Tee	5M	Estacionario	k-w	High Resolution	-	Auto	Si	< 1h-00m
7	Tee	1M	Estacionario	SST	High Resolution	-	Auto	Si	< 1h-00m
8	Tee	1M	Transitorio	LES WALE	High Resolution	2.5	0.005	Si	7h-00m
9	Tee	1M	Transitorio	LES WALE	BCD	2.5	0.005	Si	12h-00m
10	Tee	1M	Transitorio	LES WALE	High Resolution	10	0.005	Si	> 2d-00h-00m
11	Tee	1M	Transitorio	LES WALE	BCD	10	0.005	Si	> 2d-00h-00m
12	Tee	3M	Transitorio	LES WALE	High Resolution	0.05	0.005	Si	3h-00m
13	Main Inlet	-	Estacionario	SST	High Resolution	-	Auto	Si	
14	Branch Inlet	-	Estacionario	SST	High Resolution	-	Auto	Si	
15	Tee	0,8M	Estacionario	SST	High Resolution	-	Auto	Si	< 1h-00m
16	Tee	0,8M	Transitorio	LES WALE	BCD	0.01	0.001	Si	5m
17	Tee	0,8M	Transitorio	LES WALE	BCD	10	0.00075	Si	2d-08h-00m
18	Tee	0,8M	Transitorio	LES WALE	BCD	10	0.00075	Hasta 1,87s	10h-00m
19	Tee	0,8M	Transitorio	Dynamic LES	BCD	10	0.00075	Hasta 3,94s	19h-40m
20	Tee	0,8M	Transitorio	Dynamic LES	BCD	10	0.00075	Hasta 1,91s	10h-00m
21	Tee	0,8M	Transitorio	LES Smagorinsky	BCD	10	0.00075	Si	2d-01h-00m
22	Tee	0,8M	Transitorio	Dynamic LES	BCD	10	0.00075	Si	2d-05h-50m
23	Tee	0,8M	Transitorio	LES WALE	BCD	10	0.00075	Si	2d-06h-32m
24	Main Inlet	3,6M	Estacionario	SST	High Resolution	-	Auto	Si	14m
25	Tee	1,77M	Transitorio	LES WALE	BCD	11	0.0007	Si	7d-01h-20m
26	Tee	1,77M	Transitorio	LES Smagorinsky	BCD	11	0.0007	Si	6d-18h-20m
27	Tee	3,8M	Transitorio	Dynamic LES	BCD	11	0.0006		11d-12h-41m

Tal y como se mencionaba anteriormente, el proceso comienza con la simulación de los conductos de desarrollo del flujo, denominados en la Tabla 8 como Main Inlet para la tubería de agua fría y Branch Inlet para la tubería de agua caliente. Estos conductos se han calculado en estacionario ya que el objetivo de las simulaciones es únicamente recoger los valores de la velocidad en la sección de salida.

A continuación, se han realizado pruebas tanto en estacionario como en transitorio de la tubería en T (designada como Tee) utilizando modelos de turbulencia sencillos como el $k-\varepsilon$ o el SST. El tiempo de cómputo de estas simulaciones es bajo, no superando en ningún caso las 12 horas.

Tal y como se expuso previamente, uno de los objetivos de este trabajo es la de obtener la fluctuación de temperaturas cerca de la pared. En las simulaciones con modelos RANS ($k-\varepsilon$ o el SST) se obtuvieron resultados que no variaban a lo largo del tiempo por lo que se descartaron estas simulaciones. Por ello, se efectuaron las primeras pruebas con el modelo LES y, siguiendo las recomendaciones del Manual de Modelado del Solver de CFX (Canonsburg 2009), se utilizó el esquema de subgrid WALE como primera opción.

Llegados a este punto se realizó el primer estudio de sensibilidad utilizando dos esquemas de transporte (*advection scheme*) y manteniendo constantes el resto de modelos. Comparando con los datos experimentales se llegó a la conclusión de que debía utilizarse el esquema de diferencias centrales encerrado (*bounded central difference*) de aquí en adelante. En la Figura 22 se representa la velocidad media u de los dos esquemas de transporte y del experimento en una línea vertical a $1.6D$ del origen. Puede observarse que, aunque las dos simulaciones se acercan al comportamiento real, en la zona de valores de z entre 0.02 y 0.06 m la simulación *High Resolution* tiene un desfase aproximado de 0.1 m/s. Dado que el resto de modelos utilizados, mallado, paso de tiempo, etc. no se han variado, la diferencia es debida al amortiguamiento de la turbulencia que se produce al utilizar el esquema numérico *High Resolution*.

De la misma manera que se ha llevado a cabo esta comparativa, se ha analizado la velocidad en otros puntos de la tubería. Observando la Figura 23 puede deducirse de nuevo la misma conclusión, justificando así el uso de *Bounded Central Difference* como esquema de transporte en las sucesivas simulaciones.

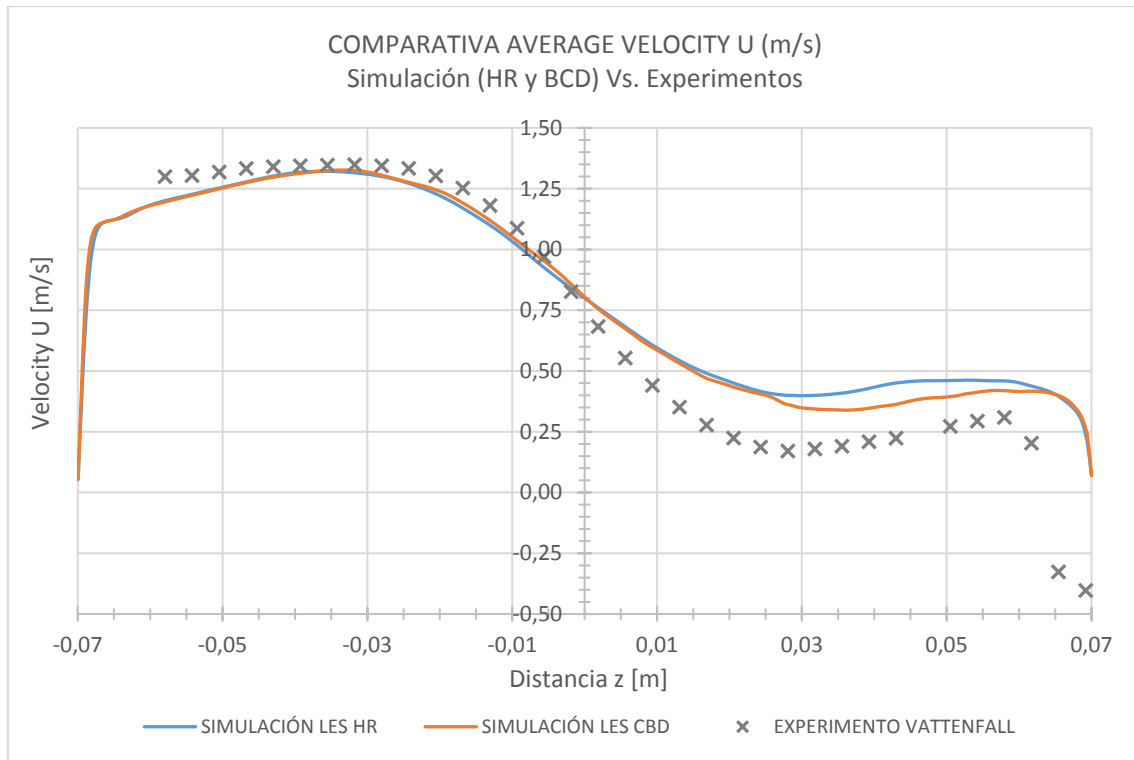


Figura 22. Comparativa entre la simulación High Resolution, Bounded Central Difference y el experimento de la velocidad media u en una línea vertical a $1.6D$ de distancia del origen.

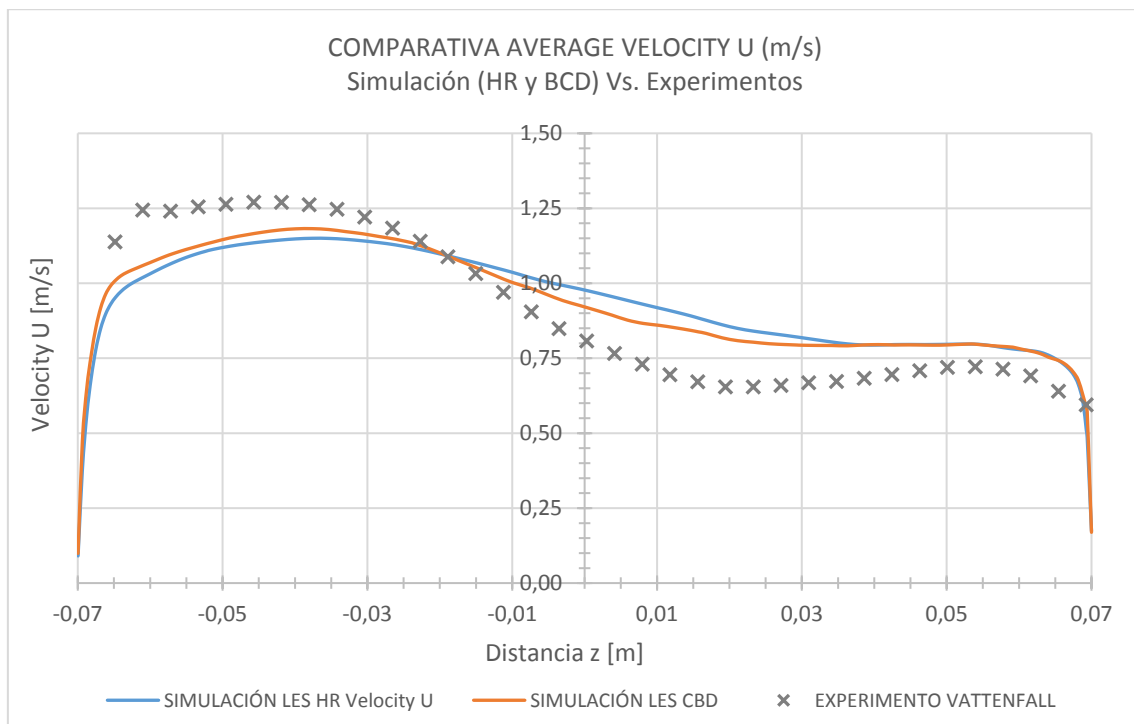


Figura 23. Comparativa entre la simulación High Resolution, Bounded Central Difference y el experimento de la velocidad media u en una línea vertical a $2.6D$ de distancia del origen.

Antes de continuar con las simulaciones de la tubería en T se recalcularon los perfiles de velocidad de los conductos de entrada (Main y Branch Inlet) incluyéndose en el cálculo la producción y disipación de turbulencia debida a la acción de la fuerza de gravedad.

A continuación, se decidió realizar una comparativa entre los tres modelos de subgrid de LES integrados en CFX: Smagorinsky, WALE y Dynamic. Tras algunas pruebas se lanzaron las tres simulaciones utilizando un mallado no muy refinado (0.8 millones de nodos) con objeto de decidir qué modelo se ajustaba mejor a los datos experimentales. Los resultados obtenidos se detallan en el Capítulo 5.

Finalmente se llevaron a cabo una serie de simulaciones para verificar las conclusiones del apartado anterior y concluir con una simulación más refinada de casi 4 millones de nodos y un paso de tiempo de 0.6 ms.

Cabe destacar la última columna de la Tabla 8 donde se recoge el tiempo de computación de las distintas simulaciones. El ordenador empleado para ejecutarlas cuenta con las características que se muestran en la Tabla 9. Mencionar que se han utilizado 7 de los 8 núcleos de los que consta el microprocesador trabajando en paralelo. Se empleó el programa de partición implementado en CFX “Intel MPI Local Parallel” con el método “MeTIS k-way”.

Tabla 9. Características del ordenador utilizado para las simulaciones.

PROCESADOR	Intel® Core™ i7-5960X CPU @ 3.00GHz	8 núcleos, 16 hilos
MEMORIA RAM	16 GB	15.6 GB utilizables

Podemos observar que, sin entrar en detalles, se requiere algo más de 2 días para una simulación de 10s. Esto quiere decir que antes de lanzar una simulación debe revisarse exhaustivamente todos los detalles del “setup” con el objetivo de evitar simulaciones fallidas y el correspondiente tiempo perdido. El cálculo de la última simulación realizada se llevó a cabo en un espacio de tiempo de aproximadamente 11 días y medio.

CAPÍTULO 5. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Tras multitud de intentos en la realización de simulaciones, finalmente se desarrolló un modelo del sistema con un comportamiento de convergencia correcto y suficientemente depurado como para comenzar las observaciones. El análisis más importante que se ha llevado a cabo corresponde con una comparativa entre los resultados obtenidos con los tres modelos diferentes de subgrid del modelo de turbulencia LES. Se han examinado los perfiles de velocidades y temperaturas en distintos puntos del dominio y se han comparado con los datos experimentales proporcionados por *Vattenfall R&D* para el benchmark internacional descrito en el Capítulo 3.

Dado que a simple vista es muy complicado observar cuál es la simulación que más se ajusta al experimento, se ha implementado una metodología para calcular de forma cuantitativa las similitudes entre modelo y experimento.

5.1. COMPARATIVA RESULTADOS MODELOS LES Y EXPERIMENTO

Siguiendo las indicaciones que se han dado en el Capítulo 4, se han llevado a cabo las tres simulaciones utilizando el modelo de turbulencia LES. En la Tabla 10 pueden observarse las características más importantes de las simulaciones.

Tabla 10. Características de los modelos utilizados en las simulaciones.

Modelo de turbulencia	Mallado	Paso de tiempo	Tiempo simulación	Tiempo de computación
LES Smagorinsky	0.8 Millones nodos	0.75 ms	10 s	2d 1h
LES WALE				2d 6h
Dynamic LES				2d 7h

Para las tres simulaciones se mantuvieron los mismos criterios de convergencia. En primer lugar, el residuo de las ecuaciones de momento y energía debe mantenerse por debajo de 10^{-4} antes de concluir las iteraciones de cada paso de tiempo.

Sin embargo, en algunos casos es posible que se obtengan residuos por debajo de 10^{-4} sin haber llegado a cumplirse los balances globales. Para asegurar que dichos balances se han conservado, es necesario agregar un criterio adicional. El "Solver" no dejará de iterar hasta que los balances

globales de las ecuaciones que rigen el movimiento de los fluidos sean menores de un valor fijado (por defecto 0.01).

Como es lógico, es preciso indicar al código el sentido y valor de las fuerzas gravitatorias. En este caso el valor se ha tomado de la base de datos de CFX (con una precisión de 16 cifras significativas) y el sentido se ha fijado en $-z$.

Dado que el fluido está formado por dos componentes, agua fría y agua caliente, debe definirse una sustancia de mezcla de proporción variable. El modelado de las componentes se realizará calculando una de ellas y fijando la otra como dependiente de la primera. En este caso se calculará la fracción de agua fría y a partir de ésta la de agua caliente.

El número de iteraciones para una solución transitoria de 11 segundos asciende a 55000. Dado que almacenar la información de todas las variables en los 800000 nodos en cada iteración es imposible, deben seleccionarse los parámetros indispensables para el análisis posterior y descartar el resto de información. Las variables más importantes en este estudio corresponden a la velocidad y la temperatura. Ambos parámetros se guardarán cada dos pasos de tiempo y se llevará un registro que permita calcular la velocidad y temperatura media en cada nodo al terminar la simulación. Para este promedio se han descartado los resultados obtenidos durante el primer segundo con objeto de esperar a que la turbulencia se haya extendido y desarrollado completamente a lo largo de la tubería.

5.1.1. DISTRIBUCIÓN DE VELOCIDADES

La forma más eficaz de analizar las velocidades es tomar la velocidad media obtenida a lo largo de los 9 segundos de simulación en los mismos puntos en los que se ha medido en el experimento. Tal y como se mencionaba previamente en el apartado 4.4.2.1. Modelos de turbulencia RANS, para un flujo homogéneo e incompresible la velocidad puede separarse en dos partes, una componente media y otra fluctuante.

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad i = x, y, z \quad [36]$$

Por comodidad se referirá a ellas como $\bar{u}_x = u$, $\bar{u}_y = v$, $\bar{u}_z = w$. Así, la componente media se le denotará simplemente por la letra correspondiente a la de la dirección de la velocidad: “u” en el eje X, “v” en el eje Y, “w” en el eje Z.

La parte fluctuante hace referencia a la velocidad con que varía dicha componente y suele estar asociada al cálculo de las tensiones de esfuerzo de Reynolds (τ_{xx} , τ_{yy} , τ_{zz} y las correspondientes tensiones combinadas, para más detalles regresar a la página 38).

$$\tau_{xx} = -\rho \overline{u'^2} = uu \quad \tau_{yy} = -\rho \overline{v'^2} = vv \quad \tau_{zz} = -\rho \overline{w'^2} = ww \quad [37]$$

De nuevo, estas tensiones se denotarán de una manera distinta, utilizando el mismo formato que el usado en los trabajos realizados por *Vattenfall R&D*: “uu” para τ_{xx} , “vv” para τ_{yy} y “ww” para τ_{zz} . Las dimensiones de estas variables son las del cuadrado de la velocidad (m^2/s^2).

Con objeto de realizar un análisis bastante detallado, se estudiarán dos componentes medias y dos fluctuantes:

- Velocidad media en la dirección del flujo: "Velocidad u"
- Velocidad media en la dirección transversal al flujo: "Velocidad w"
- Fluctuación de la velocidad en la dirección del flujo: "Velocidad uu"
- Fluctuación de la velocidad en la dirección transversal al flujo: "Velocidad ww"

En el experimento, las mediciones de cada una de estas variables se han realizado en 4 bandas dispuestas verticalmente (eje Y) a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6 diámetros hidráulicos de longitud del punto central de mezclado aguas abajo (ver Figura 24). Dentro de cada banda los autores seleccionaron 34 puntos sobre los que medir las componentes de la velocidad.

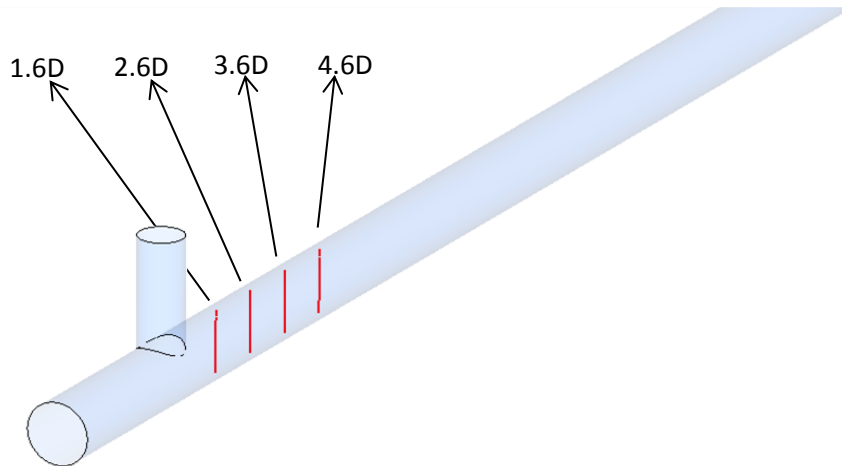


Figura 24. Líneas (en rojo) sobre las que se ha medido la velocidad media y fluctuante.

En el caso de las tres simulaciones, las mediciones se han realizado en las mismas bandas, pero en cada una de ellas se han tomado 59 puntos (equivalentes a los nodos que pasan por ella). En la Figura 25 se muestran cuatro planos situados a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6 diámetros hidráulicos de longitud del punto central de mezclado sobre los que se ha representado el módulo del vector velocidad.

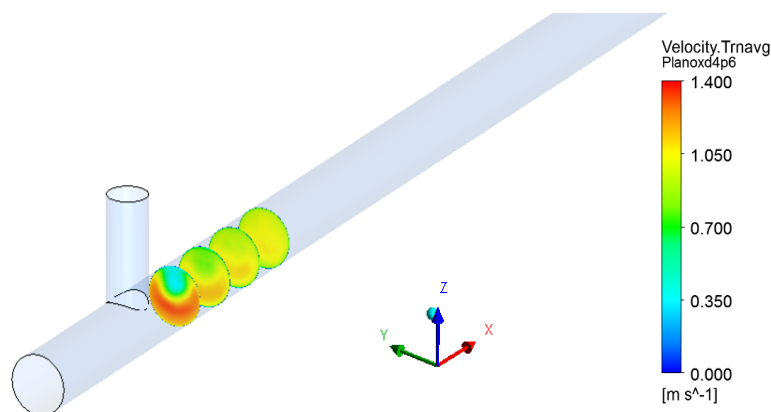


Figura 25. Líneas (en rojo) sobre las que se ha medido la velocidad media y fluctuante.

Los resultados obtenidos se han recogido en los distintos gráficos de la Figura 26, Figura 27, Figura 28 y Figura 29. En el encabezado de cada gráfico se recoge la variable que se ha representado y la distancia al origen de la banda sobre la que se ha medido.

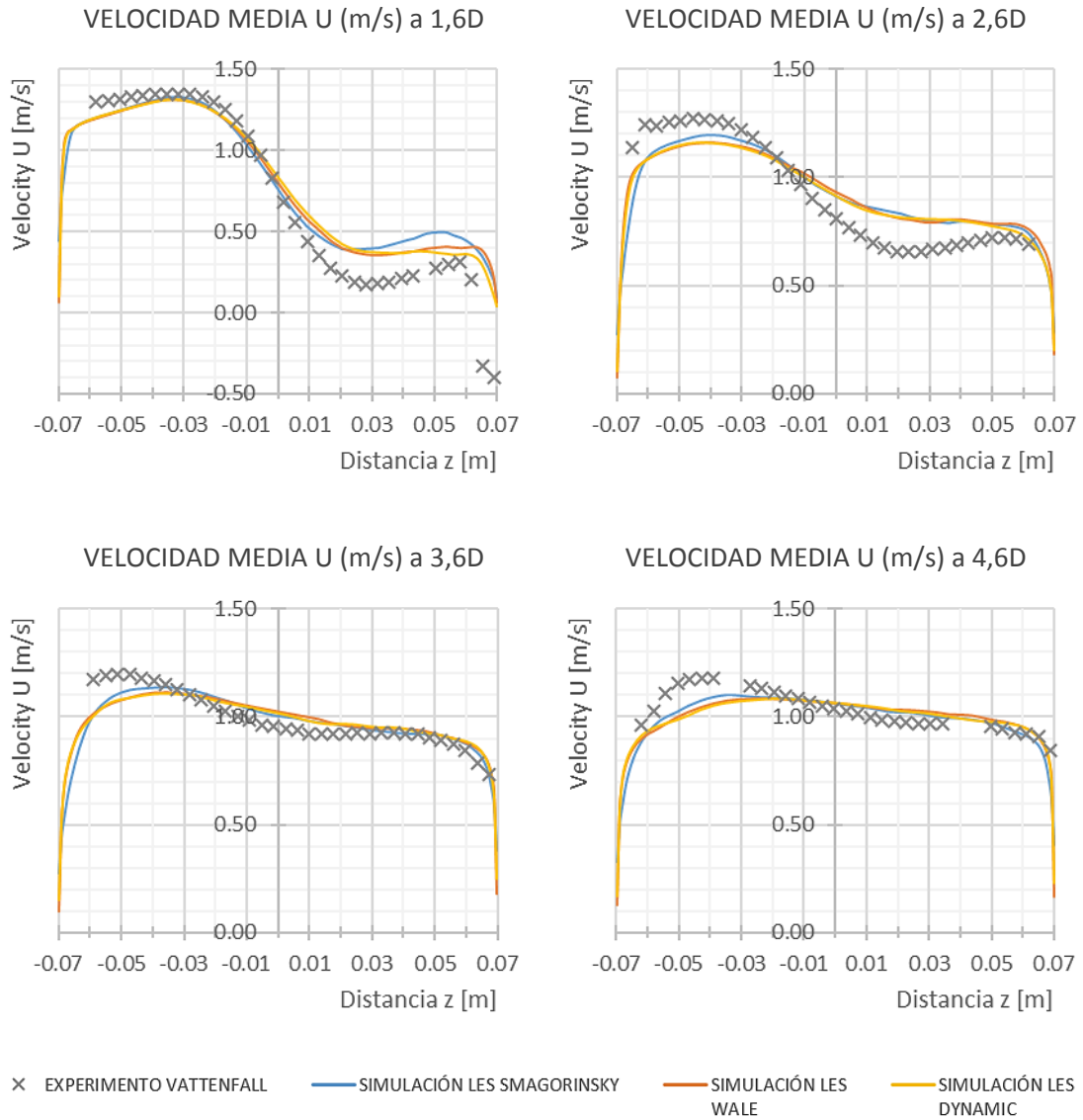
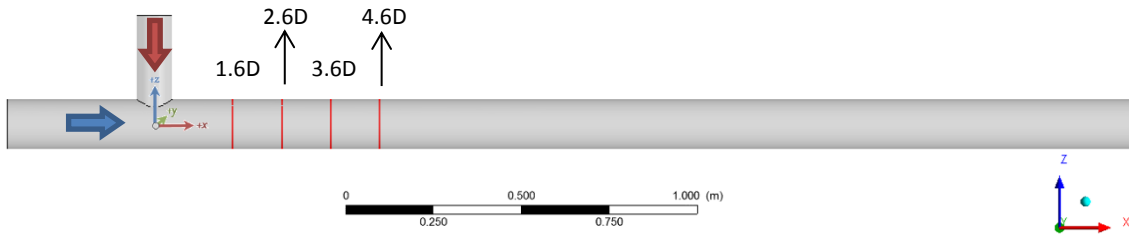


Figura 26. Gráficos con la comparativa de la velocidad media u entre los 3 modelos LES (Smagorinsky, WALE y Dynamic) y el experimento en 4 bandas a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6D.

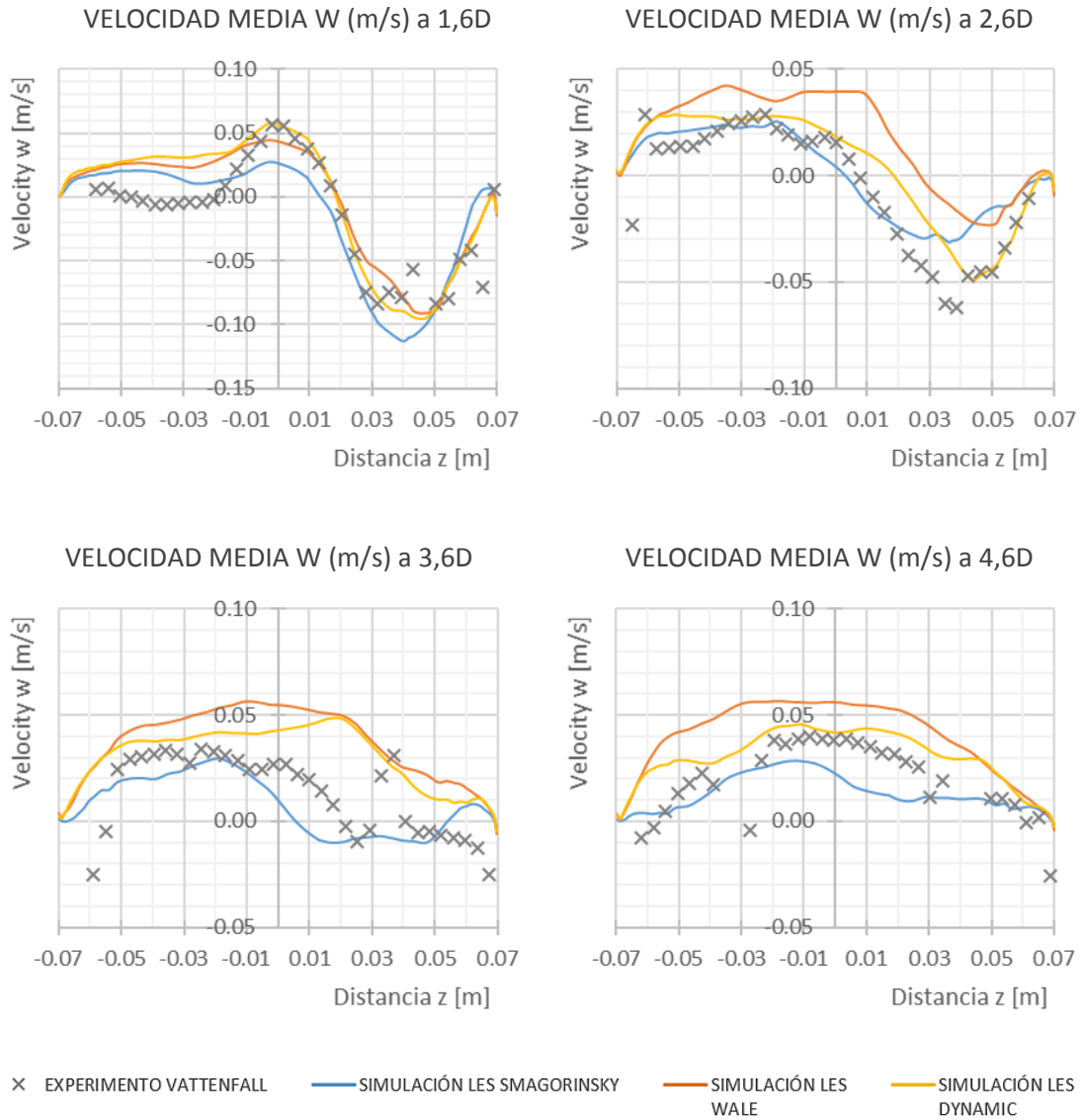
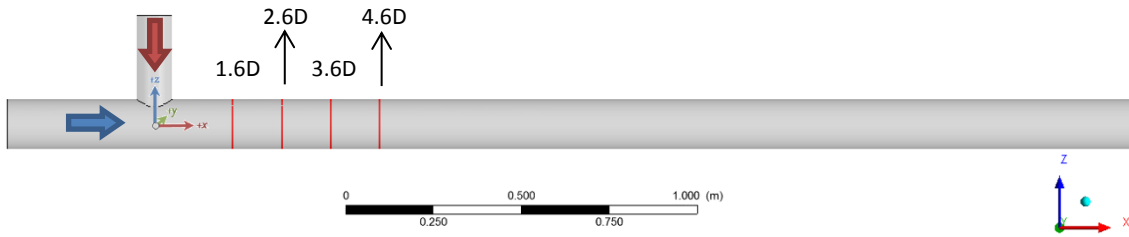


Figura 27. Gráficos con la comparativa de la velocidad media w entre los 3 modelos LES (Smagorinsky, WALE y Dynamic) y el experimento en 4 bandas a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6D.

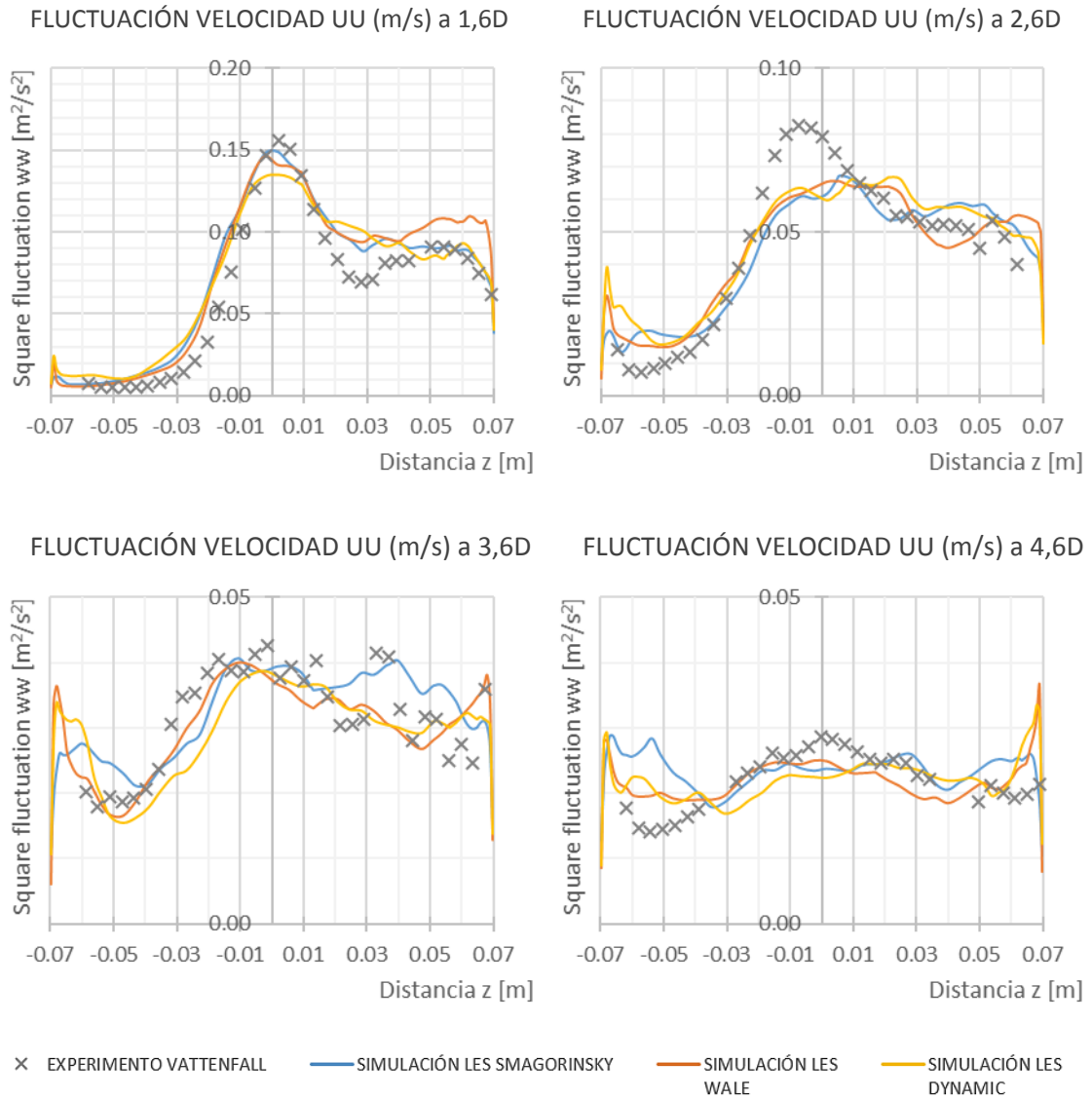
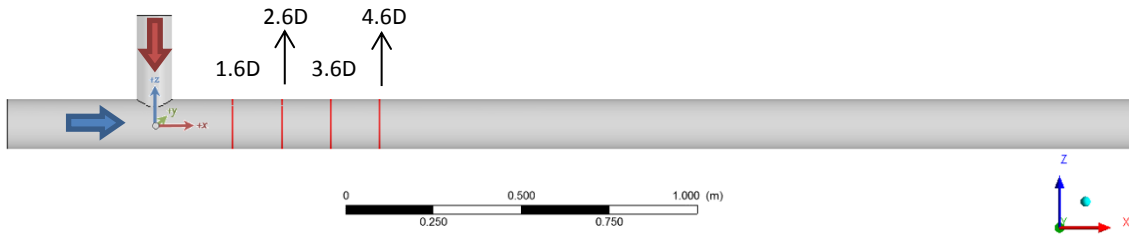


Figura 28. Gráficos con la comparativa de la fluctuación de velocidad uu entre los 3 modelos LES (Smagorinsky, WALE y Dynamic) y el experimento en 4 bandas a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6D.

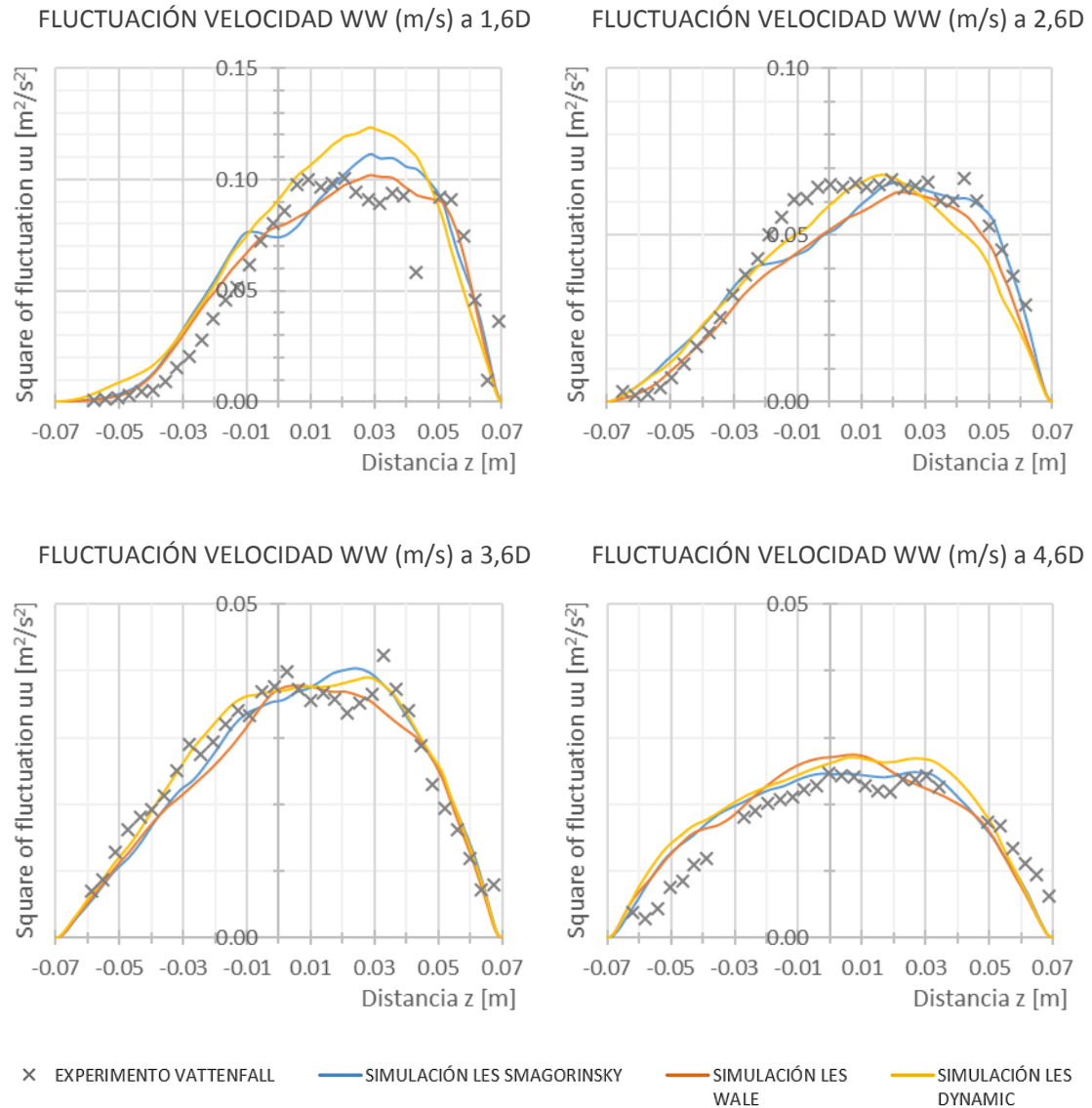
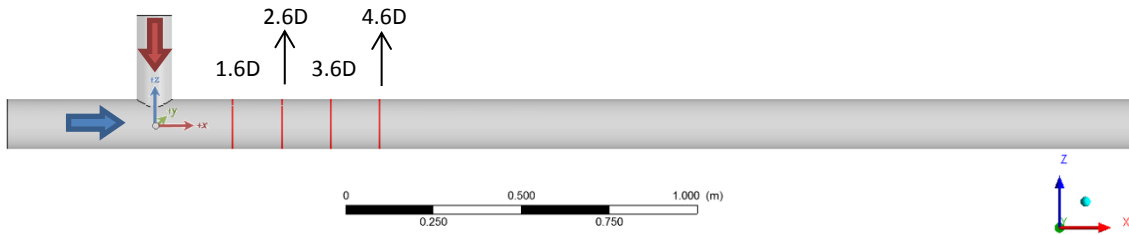


Figura 29. Gráficos con la comparativa de la fluctuación de velocidad ww entre los 3 modelos LES (Smagorinsky, WALE y Dynamic) y el experimento en 4 bandas a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6D.

La primera conclusión que puede extraerse tras observar por primera vez los gráficos es que las tres simulaciones predicen bastante bien el comportamiento real del fluido tanto en términos de velocidad promedio como de fluctuación de velocidad. Es necesario mencionar que se esta predicción se ha logrado con un mallado de 0.8 millones de nodos (se puede decir que 0.8 millones de nodos es un mallado poco refinado para los medios actuales) por lo que para una valoración cualitativa esta cifra es suficiente para estudiar el fenómeno.

En segundo lugar, analizando los gráficos con mayor detalle, observamos:

- La velocidad media u (principal componente de la velocidad ya que es la de la dirección del flujo).
 - Tiene un comportamiento similar pero no llega a captar todos los fenómenos turbulentos. Esto puede observarse fácilmente si comparamos los valores de las simulaciones y del experimento en la zona donde se producen los remolinos más importantes (“z” comprendido entre 0.01 y 0.07 m). En las simulaciones se observan velocidades mayores que pueden ser debidas a un amortiguamiento indebido de la turbulencia.
 - Analizando la evolución, en términos generales, de las simulaciones y del experimento desde 1.6D hasta 4.6D puede observarse que las simulaciones alcanzan un “flujo desarrollado” antes que el experimento. Esto se observa claramente en el gráfico 4.6D donde el perfil de velocidad de la simulación está muy cerca de adquirir el conocido perfil en “D”, propio de flujos turbulentos en tubería, mientras que el experimento aún presenta diferencias notables entre la parte superior e inferior de la tubería.
 - Los resultados obtenidos en los tres modelos son bastante similares entre sí. Para 2.6, 3.6 y 4.6D los resultados son prácticamente idénticos. A 1.6D se observa un ligero incremento de la velocidad en el modelo LES Smagorinsky, alejándose, aún más que el resto de modelos, de los datos experimentales.

- La velocidad media w (componente de la velocidad transversal a la dirección del flujo):
 - Probablemente, los resultados obtenidos para esta componente son los que peor se ajustan a los datos experimentales a pesar de que cualitativamente son bastante parecidos. La velocidad w en el plano 1.6D es la más similar entre simulaciones y experimento, mientras que la del plano 3.6D la más desigual.
 - En esta zona, la componente transversal de la velocidad experimenta grandes variaciones en el sentido de movimiento debido a los remolinos que se forman. Esto se traduce en una alta variabilidad del signo de la velocidad w . Quizás estos desajustes pueden reducirse aumentando el tiempo de simulación con objeto de recoger una mayor cantidad de datos.
 - En este caso sí se observa una mayor discrepancia entre los tres modelos LES. En general el modelo LES Smagorinsky tiende a captar la velocidad w por debajo de la correspondiente experimental mientras que los otros dos modelos (LES WALE y Dynamic LES) obtienen resultados ligeramente superiores respecto a la medida real.

- La fluctuación de velocidad uu (similar al Tensor de esfuerzo de Reynolds τ_{xx}):
 - Los resultados son bastante parecidos para los tres modelos LES simulados y es muy complicado distinguir el modelo que mejor reproduce el comportamiento real.
 - Debe mencionarse la diferencia que se observa en el gráfico 2.6D en el pico $z=-0.01$, donde puede observarse una importante reducción de la fluctuación de velocidad en las simulaciones (aproximadamente un 20% de desvío).
 - Hay que destacar también el comportamiento que adopta esta componente fluctuante de la velocidad en las simulaciones cerca de la pared. En prácticamente los cuatro gráficos se observa un incremento brusco de la fluctuación en las zonas próximas a la pared. Adicionalmente se observa que este aumento es mayor en los modelos LES WALE y Dynamic LES. Esto puede ser debido al comportamiento de estos modelos de subgrid en las cercanías de la pared, donde tratan de simular la transición entre laminar y turbulento a través de estrategias de cálculo complejas.
 - Si observamos las cuatro gráficas en su conjunto puede verse un claro descenso de la fluctuación de velocidad uu (desde $1.5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ a 1.6D hasta $0.3 \text{ m}^2/\text{s}^2$ a 4.6D). Esto quiere decir que a medida que nos separamos de la zona donde se juntan ambos fluidos, la mezcla va siendo cada vez menos variable en la dirección de movimiento del flujo.
- La fluctuación de velocidad ww (similar al Tensor de esfuerzo de Reynolds τ_{zz}):
 - Las simulaciones han conseguido reproducir de forma satisfactoria la fluctuación de velocidad uu .
 - Al igual que sucedía con la fluctuación de la velocidad uu , la variación de la velocidad en la dirección transversal al flujo va siendo cada vez menor a medida que nos alejamos de la zona de mezclado.

Inicialmente, este análisis detallado de la distribución de velocidades estaba encaminado a seleccionar el modelo LES que mejor reprodujera el comportamiento real. Sin embargo, observando a simple vista es muy complicado diferenciar qué modelo se ajusta mejor a los valores experimentales. Dos conclusiones finales que pueden extraerse tras este análisis son:

1. Los tres modelos de subgrid Smagorinsky, WALE y Dynamic son capaces de simular el comportamiento real del experimento. En ningún caso se han obtenido exactamente los mismos valores por lo que sería interesante analizar los resultados junto con un estudio de incertidumbre (como por ejemplo utilizando la metodología Wilks o el Caos Polinómico).
2. Con objeto de profundizar aún más en este fenómeno, es necesario seleccionar uno de los tres modelos para realizar una simulación con mayor número de nodos, menor paso de tiempo y mayor tiempo de simulación. Por ello, se decidió realizar un análisis cuantitativo mediante métodos estadísticos que nos permita obtener el modelo más ajustado en términos de distribución de velocidades.

5.1.2. METODOLOGÍAS CUANTITATIVAS DE COMPARACIÓN

Para realizar el estudio cuantitativo, mencionado en el punto 2 de las conclusiones del apartado anterior, se han analizado las siguientes metodologías:

- Correlation Coefficient: Este método determina la relación entre dos propiedades representadas como dos columnas de valores. La correlación se analiza punto a punto mediante expresión [38].

$$CC = \frac{\sum[(x - \bar{x})(y - \bar{y})]}{\sqrt{\sum(x - \bar{x})^2 \cdot \sum(y - \bar{y})^2}} \quad [38]$$

Esta metodología destaca por su facilidad de implementación (una línea de código en Microsoft Excel) pero está más ligada a comparar las similitudes en la evolución de dos variables.

- Fréchet Distance: Es una medida de acoplamiento entre dos polilíneas P y Q en las que las filas representan los puntos de datos y las columnas las dimensiones. La medida de este parámetro es 0 cuando P y Q son iguales y crece positivamente a medida que las curvas van diferenciándose. Utiliza la norma L2 (también conocida como *Euclidean Norm*) para calcular la distancia entre puntos, aunque puede definirse la función que se desee para tal fin.

$$Norma L2 = \|x_1 - x_2\| = \sqrt{\sum (x_{1i} - x_{2i})^2} \quad [39]$$

Esta metodología utiliza una serie de pasos implementados en un programa de Matlab. La correlación no analiza punto a punto cada columna, sino que detecta los valores más próximos entre sí y sobre ellos aplica la norma L2.

- Mean Square Error: Se traduce al español como el error cuadrático medio. Existe una expresión en Matlab "GoodnessOfFit" que tiene integrado este cálculo [40].

$$MSE = \frac{\|x - x_{ref}\|^2}{N_s} \quad [40]$$

En esta expresión la doble barra hace referencia a la norma L2 detallada en [39] y N_s al número de muestras. El método MSE es muy utilizado en aquellas aplicaciones en las que es necesario calcular la similaridad, calidad o correlación entre dos señales. Cuanto más pequeño es el error más se parecen las curvas y viceversa.

- Normalized Mean Square Error: Es una expresión muy parecida a la anterior, pero está normalizada lo que facilita la comparación entre distintos conjuntos de puntos [41].

$$NMSE = 1 - \left\| \frac{x_{ref} - x}{x_{ref} - (\bar{x}_{ref})} \right\|^2 \quad [41]$$

- Normalized Root Mean Square Error: De nuevo, otra variante del cálculo del error. La expresión es muy próxima a la anterior, variando ligeramente la forma de calcular el numerador y el denominador.

$$NRMSE = 1 - \frac{\|x_{ref} - x\|}{\|x_{ref} - mean(x_{ref})\|} \quad [42]$$

- Dynamic Time Warping: Esta técnica es la más compleja de todas. Para su cálculo se aplica un algoritmo que trata de alinear los dos sets de puntos (en este caso el de la simulación y el del experimento) de forma que las curvas se aproximen lo máximo posible. El programa concluye con la alineación cuando la distancia euclídea se hace mínima.

En la Tabla 11 se recogen todas estas metodologías junto con los valores de cada método que indican el grado de ajuste de los resultados simulados con el experimento.

Tabla 11. Metodologías cuantitativas para comparar los resultados.

METODOLOGÍA	PROGRAMA DE CÁLCULO	VALOR MÁS DESAJUSTADO	VALOR MÁS AJUSTADO
CORRELATION COEFFICIENT	Microsoft Excel	0	1
FRÉCHET DISTANCE	Matlab	∞	0
MEAN SQUARE ERROR (MSE)	Matlab	∞	0
NORMALIZED MEAN SQUARE ERROR (NMSE)	Matlab	$-\infty$	1
NORMALIZED ROOT MEAN SQUARE ERROR (NRMSE)	Matlab	$-\infty$	1
DYNAMIC TIME WARPING	Matlab	∞	0

Todas estas metodologías han de aplicarse a dos sets de puntos por lo que obtendremos una gran cantidad de resultados ya que se deben comparar tres simulaciones (por separado) con los datos experimentales para cada uno de las bandas de velocidad estudiadas.

El procedimiento que se ha seguido se explica a continuación. Para ejemplificarlo se ha utilizado la metodología *Mean Square Error* por ser una de las más fáciles de aplicar y de entender. En primer lugar, se calcula el valor MSE para cada simulación, variable y banda Tabla 12

Tabla 12. Valores del error cuadrático medio MSE para cada simulación, variable y banda.

ERROR CUADRÁTICO MEDIO				
	Plano x/D	Smagorinsky	WALE	Dynamic
Velocity U	1.6	0.04143513	0.03833725	0.032237517
	2.6	0.012835644	0.012868088	0.012169979
	3.6	0.002943551	0.004254572	0.004053809
	4.6	0.004633197	0.005212317	0.005466278

Velocity W	1.6	0.000642516	0.000457313	0.000546516
	2.6	0.000218885	0.000822346	0.000232327
	3.6	0.000881805	0.000898679	0.000618894
	4.6	0.000196714	0.000667317	0.000247857
Fluctuación uu	1.6	0.000204245	0.000277432	0.000253178
	2.6	0.000105655	8.03048E-05	9.97921E-05
	3.6	2.72667E-05	1.83673E-05	3.15058E-05
	4.6	2.88521E-05	1.09945E-05	1.78897E-05
Fluctuación ww	1.6	0.000247751	0.000139059	0.000375924
	2.6	5.21039E-05	6.17888E-05	5.58312E-05
	3.6	1.02812E-05	1.09642E-05	6.11273E-06
	4.6	1.10952E-05	1.45507E-05	1.90921E-05

A continuación, se debe analizar la forma de agrupar los valores. En el caso de MSE, las puntuaciones obtenidas en cada comparación no están normalizadas por lo que el siguiente paso consiste en establecer un método de normalización. Para ello se ha obtenido el valor medio de la velocidad o fluctuación de la velocidad en cada comparativa y se ha dividido la puntuación obtenida entre este valor. De esta manera obtendremos un valor de error en velocidad normalizado (Tabla 13).

Tabla 13. Valores MSE ya normalizados para cada simulación, variable y banda.

ERROR CUADRÁTICO MEDIO - NORMALIZADO				
	Plano x/D	Smagorinsky	WALE	Dynamic
Velocity U	1.6	0.058798255	0.054402228	0.045746441
	2.6	0.01412062	0.014156312	0.013388315
	3.6	0.002972083	0.004295812	0.004093103
	4.6	0.004500872	0.005063451	0.005310159
Velocity W	1.6	0.051302808	0.036514958	0.043637501
	2.6	0.040044739	0.15044756	0.042504019
	3.6	0.06885335	0.070170906	0.048324661
	4.6	0.010139922	0.034397796	0.012776129
Fluctuación uu	1.6	0.00300802	0.004085884	0.003728683
	2.6	0.002281962	0.001734446	0.002155337
	3.6	0.000857442	0.000577587	0.000990747
	4.6	0.001311458	0.000499749	0.000813166
Fluctuación ww	1.6	0.004463975	0.002505569	0.00677341
	2.6	0.001223097	0.001450441	0.001310592
	3.6	0.000385064	0.000410646	0.000228941
	4.6	0.000664382	0.000871299	0.001143238
PUNTUACIÓN POR MEDIA		0.016558003	0.02384904	0.014557778

Finalmente, se aplicará una media aritmética para obtener el modelo LES que mejor ajusta los datos al experimento. En la Tabla 13 puede observarse que, una vez normalizados los resultados, el modelo que más se aproxima al experimento de media es el modelo Dynamic.

Este proceso se ha realizado para todas las metodologías anteriormente mencionadas y los resultados obtenidos son los siguientes. La metodología *Correlation Coefficient* se ha descartado por no ajustarse correctamente a las necesidades de este escenario.

Tabla 14. Valores finales obtenidos tras la aplicación de las metodologías para cada simulación.

	SMAGORINSKY	WALE	DYNAMIC	MEJOR AJUSTE
FRÉCHET DISTANCE	1.0135	0.7779	0.7417	0
MEAN SQUARE ERROR	0.0165	0.0238	0.0145	0
NORMALIZED MEAN SQUARE ERROR	0.6463	0.4182	0.6635	1
NORMALIZED ROOT MEAN SQUARE ERROR	0.4450	0.3386	0.4434	1
DYNAMIC TIME WARPING	0.3424	0.3790	0.3399	0

En la Tabla 14 puede observarse que 4 de las 5 metodologías utilizadas muestran que el Modelo Dynamic LES es el que más se ha ajustado a los datos. En la revisión bibliográfica llevada a cabo en el Capítulo 2 se muestra que en la publicación de Kuhn et al. (2010) se llega a esta misma conclusión, afirmando que Dynamic LES se ajustaba mejor a los datos que el modelo LES Smagorinsky.

Debe mencionarse una vez más que los tres modelos representan con bastante precisión el comportamiento real, no obstante, en las sucesivas simulaciones se utilizará preferentemente el modelo de turbulencia Dynamic LES.

5.1.3. DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURAS

Se han obtenido las temperaturas medias de los nodos correspondientes a los puntos donde se colocaron los termopares en el experimento. En total se estudiaron 16 puntos de medida situados a lo largo de cuatro planos a 2, 4, 6 y 8D de distancia aguas abajo del origen (zona donde se juntan las corrientes de agua fría y caliente). En la Figura 30 se muestran los 4 puntos de medida situados en el plano a 2D. Siguiendo la misma filosofía se consideran el resto de puntos en el punto de corte de las líneas longitudinales de 0°, 90°, 180° y 270° con los planos 4, 6 y 8D.

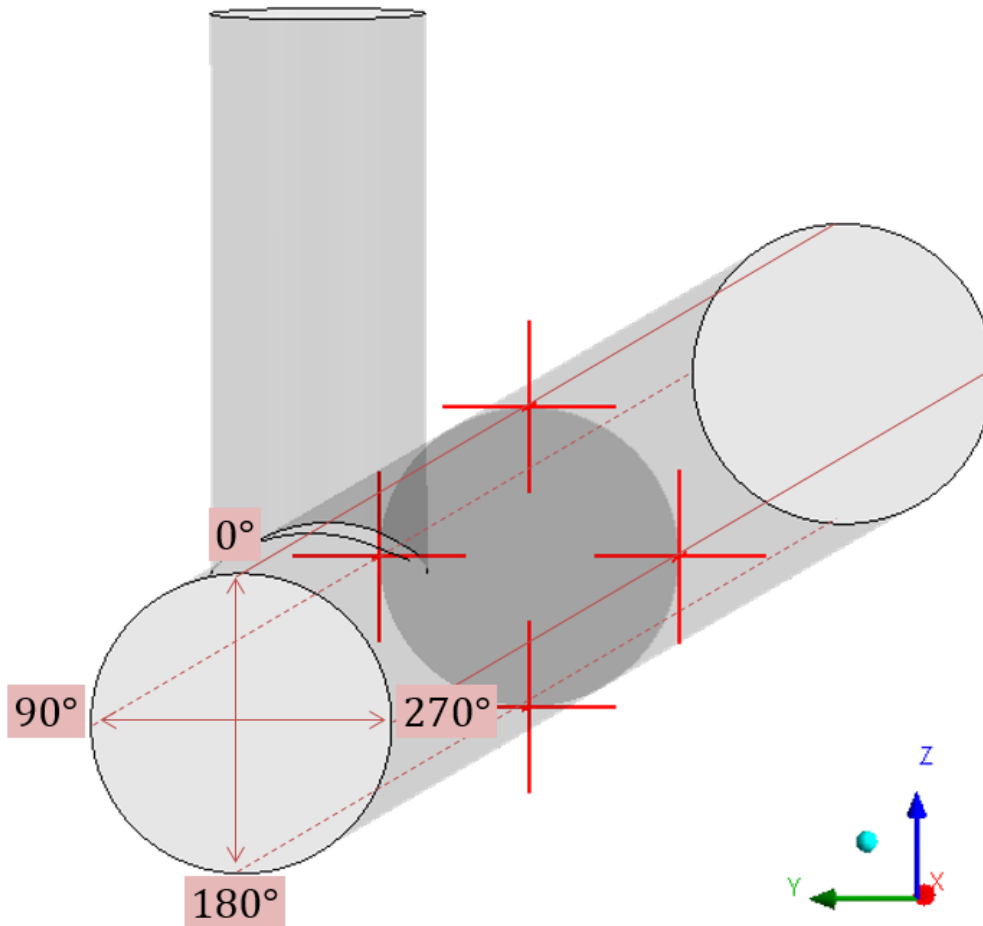


Figura 30. Situación de los 4 puntos de medida de temperatura del plano 2D.

Los estudios relacionados con las temperaturas que se consideran más importantes son:

- Análisis de la temperatura promedio en los puntos de medida (comparativas simulaciones vs experimento).
- Estudio del espectro de temperaturas para detectar las frecuencias predominantes.

Para una mejor comprensión de los resultados obtenidos, en todas las comparativas que se muestren en este trabajo se hará uso de una temperatura normalizada [43].

$$T^* = \frac{T - T_{Fría}}{T_{Caliente} - T_{Fría}} \quad [43]$$

En esta expresión T representa la temperatura en un instante de tiempo determinado y $T_{Fría}$ y $T_{Caliente}$ las temperaturas de entrada de ambos flujos. Nótese que la temperatura normalizada T^* tomará valores entre únicamente entre 0 y 1, siendo 0 cuando coincide con el foco frío y 1 cuando coincide con el caliente.

Los resultados obtenidos en la comparativa de la temperatura media en los puntos de medida se muestran en la Figura 31. Nótese que en las comparativas de 90° y 270° faltan una de las medidas experimentales, aunque puede intuirse dicha temperatura por la forma que adquiere la curva.

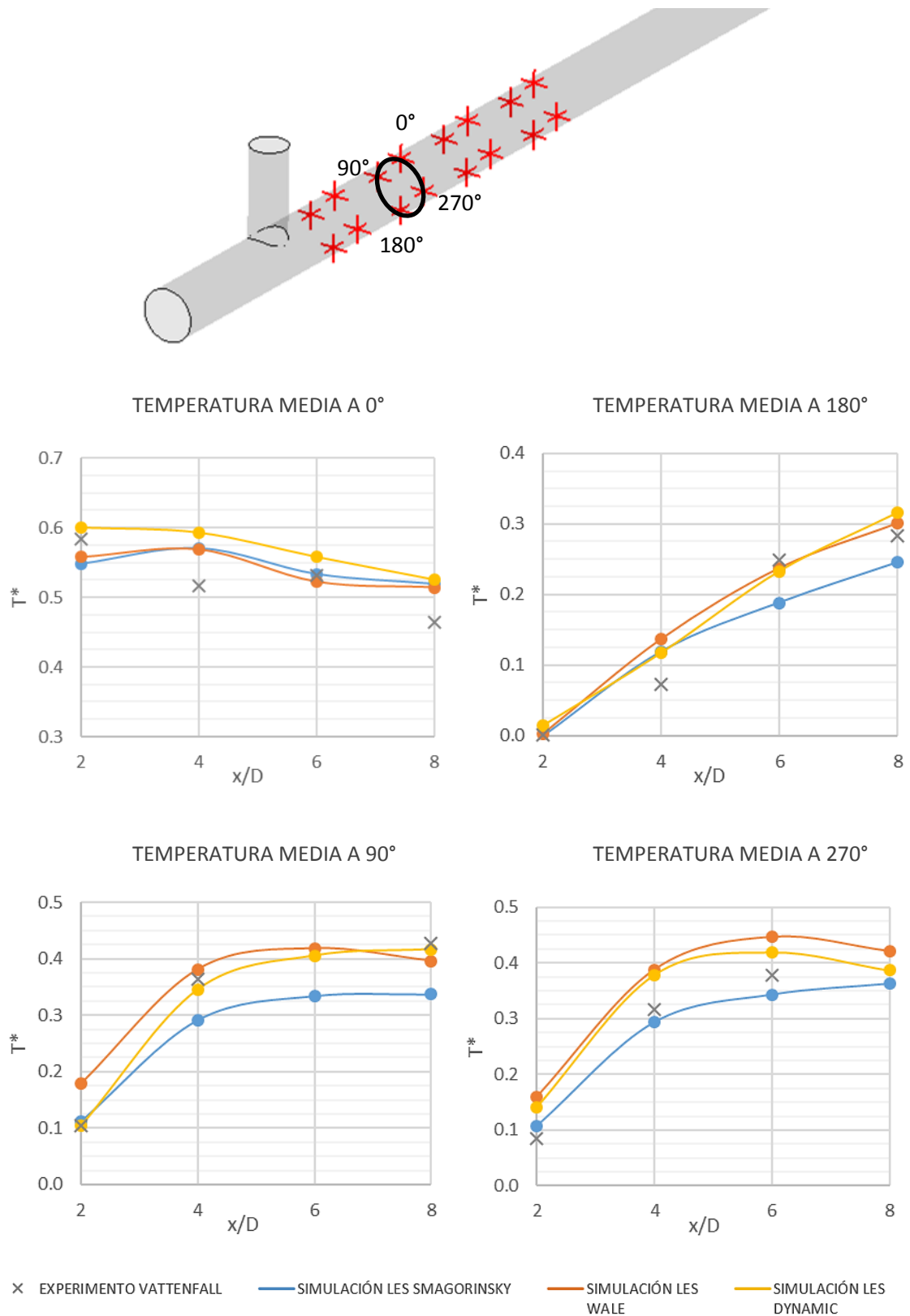


Figura 31. Temperatura normalizada de las tres simulaciones LES (Smagorinsky, WALE y Dynamic) y del experimento en los diferentes puntos de medida.

La predicción de temperaturas por parte de las simulaciones es bastante buena, aunque en algunas zonas encontramos discrepancias. De los tres modelos, ninguno parece ajustar mejor los resultados. En el primer gráfico a 0° (parte superior de la tubería) observamos diferencias de casi 0.08 en la temperatura a 4D de distancia del origen y de 0.04 a 8D. El modelo Dynamic LES (que tal y como se vio en el apartado 5.1.2. es el que mejor ajustaba los datos al experimento) parece ser en esta ocasión el más alejado de los tres. Sin embargo, observando el gráfico a 180° (temperaturas en la parte inferior de la tubería) esta diferencia se disminuye y el modelo Smagorinsky es el más desajustado.

En las temperaturas en los laterales de la tubería (90° y 270°) sucede algo notable. A 90° el modelo Dynamic predice las cuatro temperaturas con mucha exactitud mientras que el Smagorinsky se queda por debajo con una diferencia de casi 0.08 a 8D del origen. Sin embargo, a 270° el modelo Dynamic parece alejarse más de los resultados siendo el Smagorinsky el más ajustado.

Se puede decir que los tres modelos predicen las temperaturas con bastante fidelidad, pero en ningún caso se obtienen los resultados con alta precisión. Al igual que se comentó en las conclusiones de la comparativa de velocidades, el siguiente paso consistiría en realizar un estudio de incertidumbres para dar los resultados con su banda de error correspondiente. El cálculo de las variables cerca de la pared es un trabajo bastante complicado para éstos modelos por lo que realizar una simulación con un mallado más refinado podría también mejorar la predicción de dichas temperaturas.

5.1.4. ESPECTRO DE TEMPERATURAS

Otra forma de enfocar el análisis de las temperaturas cerca de la pared es a través del espectro de temperaturas. El estudio de la distribución de frecuencias de las fluctuaciones de temperatura nos proporciona información significativa para las investigaciones en el fenómeno de fatiga térmica. El método que se emplea para tratar la señal transitoria de velocidad es la Transformada Rápida de Fourier (*Fast Fourier Transform*) que permite obtener la Densidad Espectral de Potencia (*Power Spectral Density* o simplemente PSD) a partir de la señal principal $T(t)$.

Para un conjunto de N puntos de temperatura, la transformada rápida de Fourier expresa la señal como una serie trigonométrica finita [44].

$$\varphi_k = \sum_{n=0}^{N-1} \hat{T}_n e^{-2\pi i k n / N} \quad k = 0, 1, 2, \dots, (N - 1) \quad [44]$$

Se debe tener en cuenta algunas consideraciones adicionales antes de presentar los resultados.

- Paso de tiempo: Aunque se ha utilizado en las simulaciones un paso de tiempo de 0.75 milisegundos, la grabación de resultados ha sido del doble 1.5 ms.
- La tasa de muestreo es el inverso al paso de tiempo [45].

$$TM = 1/T = 1/0.0015 = 666.67 \text{ Hz} \quad [45]$$

- Dado que el tiempo observado es de 10 segundos, podrán observarse frecuencias hasta $1/10s = 0.1 \text{ Hz}$.
- La cantidad de datos muestreados es $N = 10s/0.0015s = 666.67 \text{ Hz} \cdot 10s = 6666.7$
- La resolución de frecuencias viene dada por una relación entre la tasa de muestreo y la longitud FFT (número de datos a analizar) [46].

$$\text{Resolución Frecuencia} = \frac{TM}{N} = \frac{666.67}{6666.7} = 0.1 \text{ Hz} \quad [46]$$

- Se ha utilizado una ventana Hamming para evitar discontinuidades al inicio y al final de los bloques analizados. La ventana no es más que una función determinada (en este caso la función Hamming) [47] y [48] que se multiplica por la señal T(t).

$$V_{\text{Hamming}} = \alpha - \beta \cos\left(\frac{2\pi n}{N-1}\right) \quad [47]$$

$$\alpha = 0.53836 \quad \beta = 0.46164 \quad [48]$$

- Según el Teorema de Nyquist-Shannon, la frecuencia más alta contenida en una señal analógica F_{Max} será aquella que cumpla $TM \geq 2F_{Max}$. Es decir, sólo se podrán obtener densidades de poder espectral hasta la mitad de la frecuencia de muestreo [49].

$$F_{Max} = \frac{F_{Muestreo}}{2} = \frac{666.67 \text{ Hz}}{2} = 333.34 \text{ Hz} \quad [49]$$

- El rango de frecuencias más perjudicial en términos de fatiga térmica para las tuberías es de 0.1 a 10 Hz. Aunque podemos obtener PSD hasta 333.34 Hz, solo atenderemos a la frecuencia contenida en dicha banda.

El objetivo de este apartado es por tanto analizar si el espectro exhibe una frecuencia dominante en el rango 0.1 – 10 Hz y, adicionalmente, comparar el espectro de temperaturas de la simulación LES Dynamic con las medidas experimentales. La parte inferior de la tubería (180°) corresponde con la zona donde menores fluctuaciones de temperatura aparecen (ver Figura 32). Las zonas donde se aprecian mayores fluctuaciones son los laterales (90° y 180°) y la parte de arriba (0°); siendo esta última en la que mayor diferencia de temperaturas se observa.

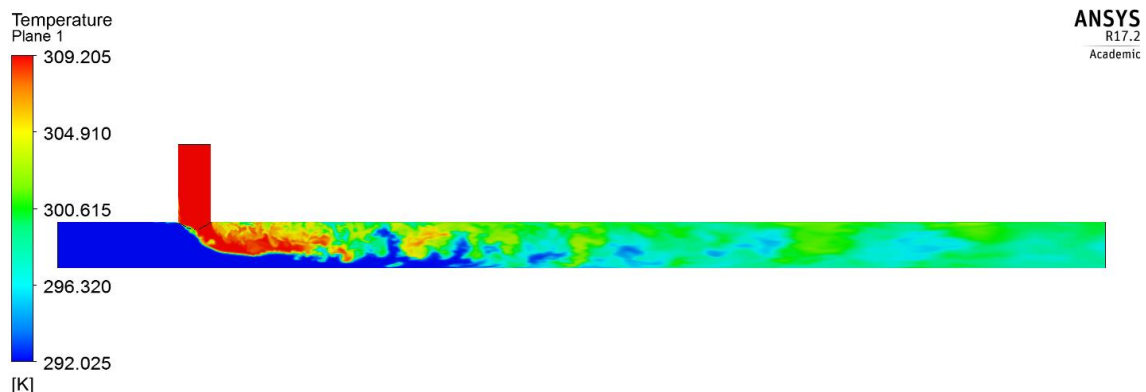


Figura 32. Representación de la Temperatura en un plano longitudinal en el segundo 8 de simulación.

Dado que las conclusiones son las mismas para todas estas zonas, se muestran los resultados obtenidos para la parte superior (0°) por ser la más afectada por este fenómeno (ver Figura 33).

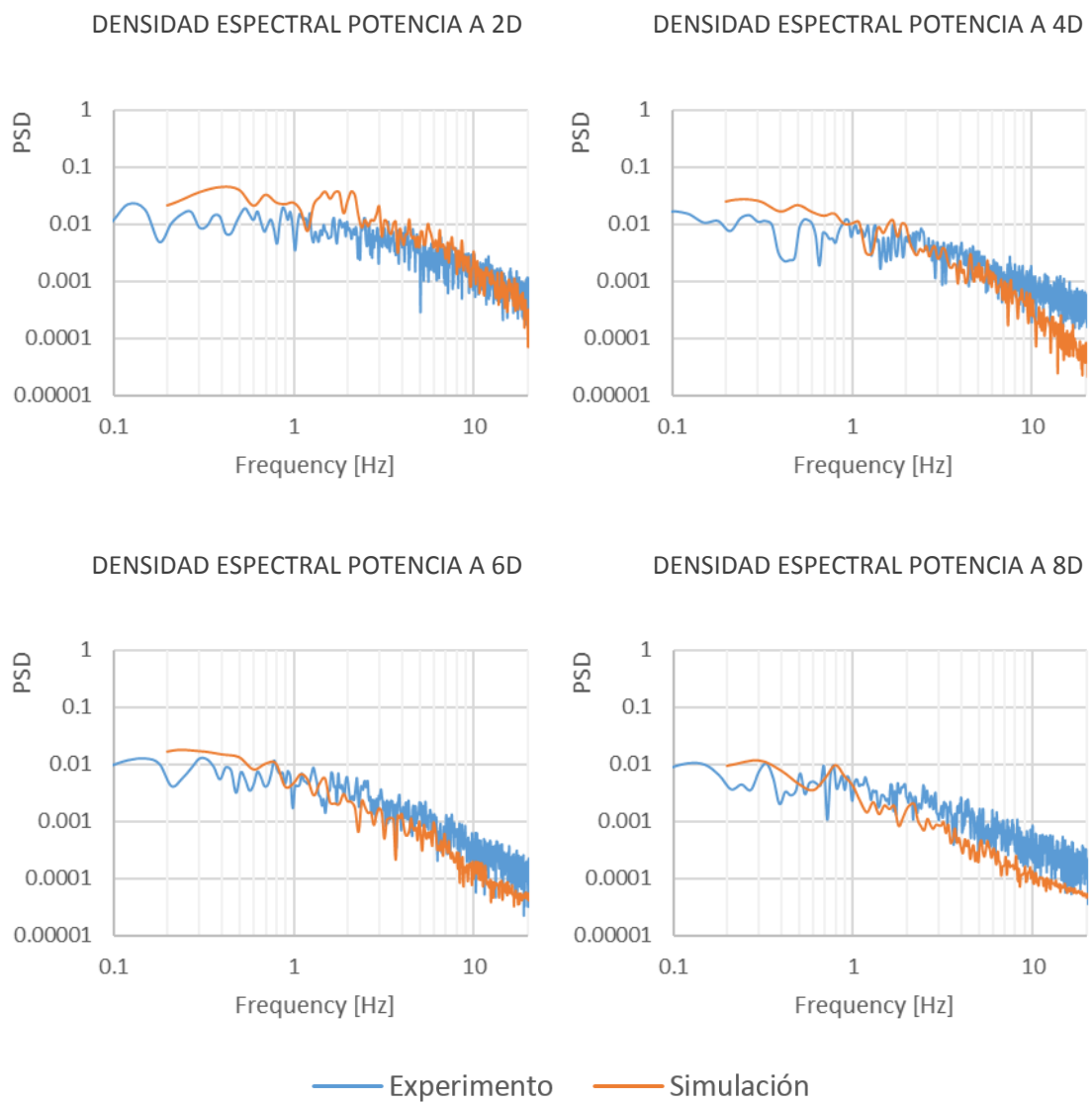
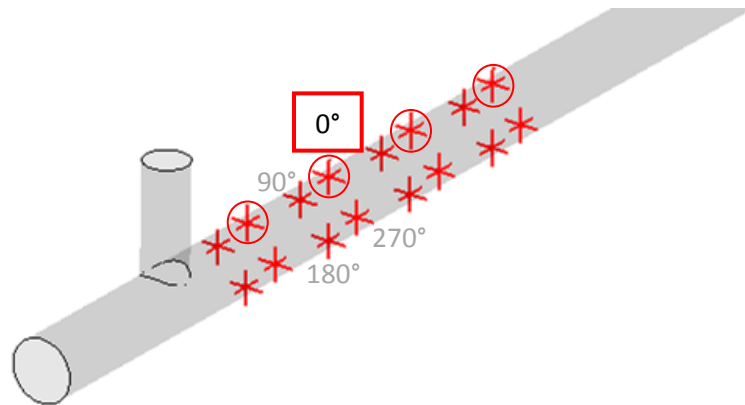


Figura 33. PSD de las fluctuaciones de temperatura a 0°

En la Figura 33 se observa la Densidad Espectral de Potencia de las fluctuaciones de temperatura cerca de la pared superior a 2, 4, 6 y 8 diámetros de distancia del origen. Las conclusiones más importantes que podemos exponer son:

- El espectro tiene forma de cascada, es decir, la energía es transferida sucesivamente desde los grandes remolinos (de baja frecuencia) hacia los pequeños remolinos (de alta frecuencia).
- No se observa ninguna frecuencia dominante de fluctuación de temperatura en el rango observado de 0.1 a 10 Hz. Para poder hablar de una frecuencia dominante debería aparecer algún pico importante en el espectro.
- El contenido energético de las fluctuaciones está concentrado principalmente en el intervalo 0.1 a 4 Hz. A partir de esta frecuencia se puede observar una tendencia decreciente.
- Los resultados de la simulación (Dynamic LES) en todos los casos adoptan la misma tendencia que la exhibida por los datos experimentales.

5.2. RESULTADOS MODELO FINAL

Previo a la finalización del trabajo, se realizó una última simulación utilizando el modelo de turbulencia LES Dynamic con un mallado de 3.8 millones de nodos. Se simularon 11 segundos de mezclado con un paso de tiempo de 0.6 ms. El tiempo de computación ascendió a un total de 11 días y 13 horas.

De forma similar a las comparativas de los apartados 5.1.1. y 5.1.3. anteriores, en este caso se compararon los resultados obtenidos en esta simulación LES Dynamic de 3.8 millones de nodos con los resultados antiguos de la simulación LES Dynamic de 0.8 millones de nodos y con el experimento.

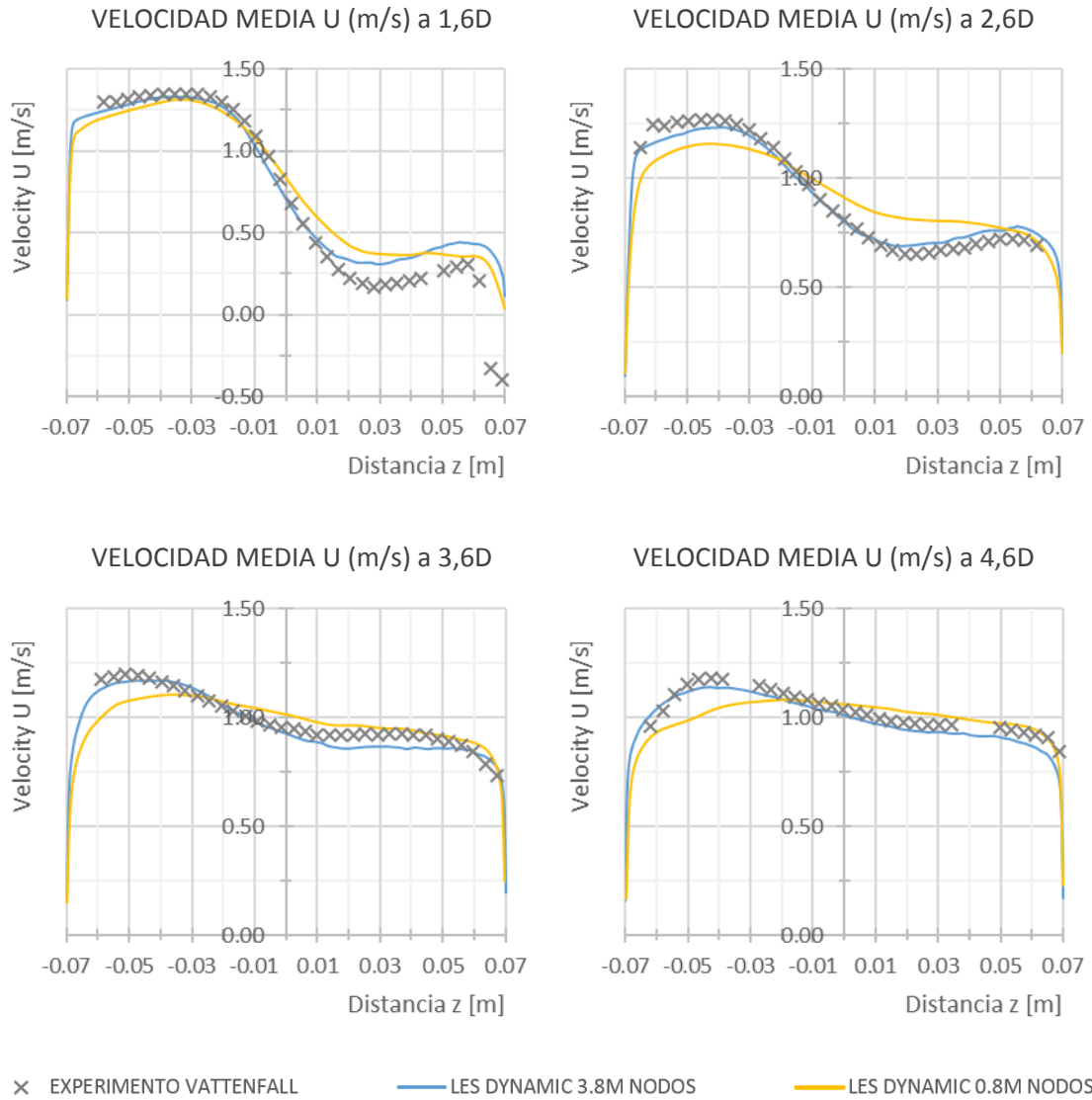
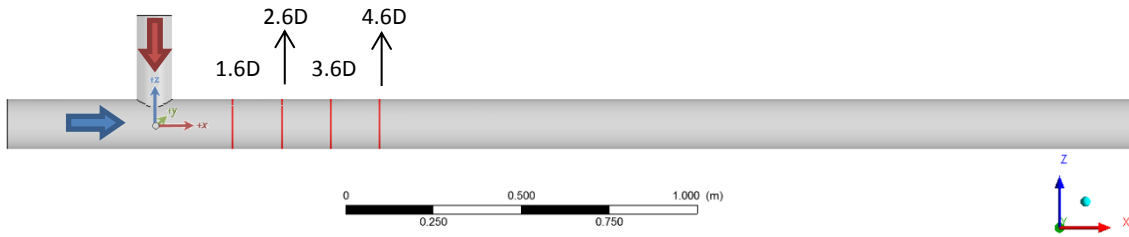


Figura 34. Gráficos con la comparativa de la velocidad media u entre los dos modelos Dynamic LES 0.8 y 3.8 millones de nodos y el experimento en 4 bandas a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6D.

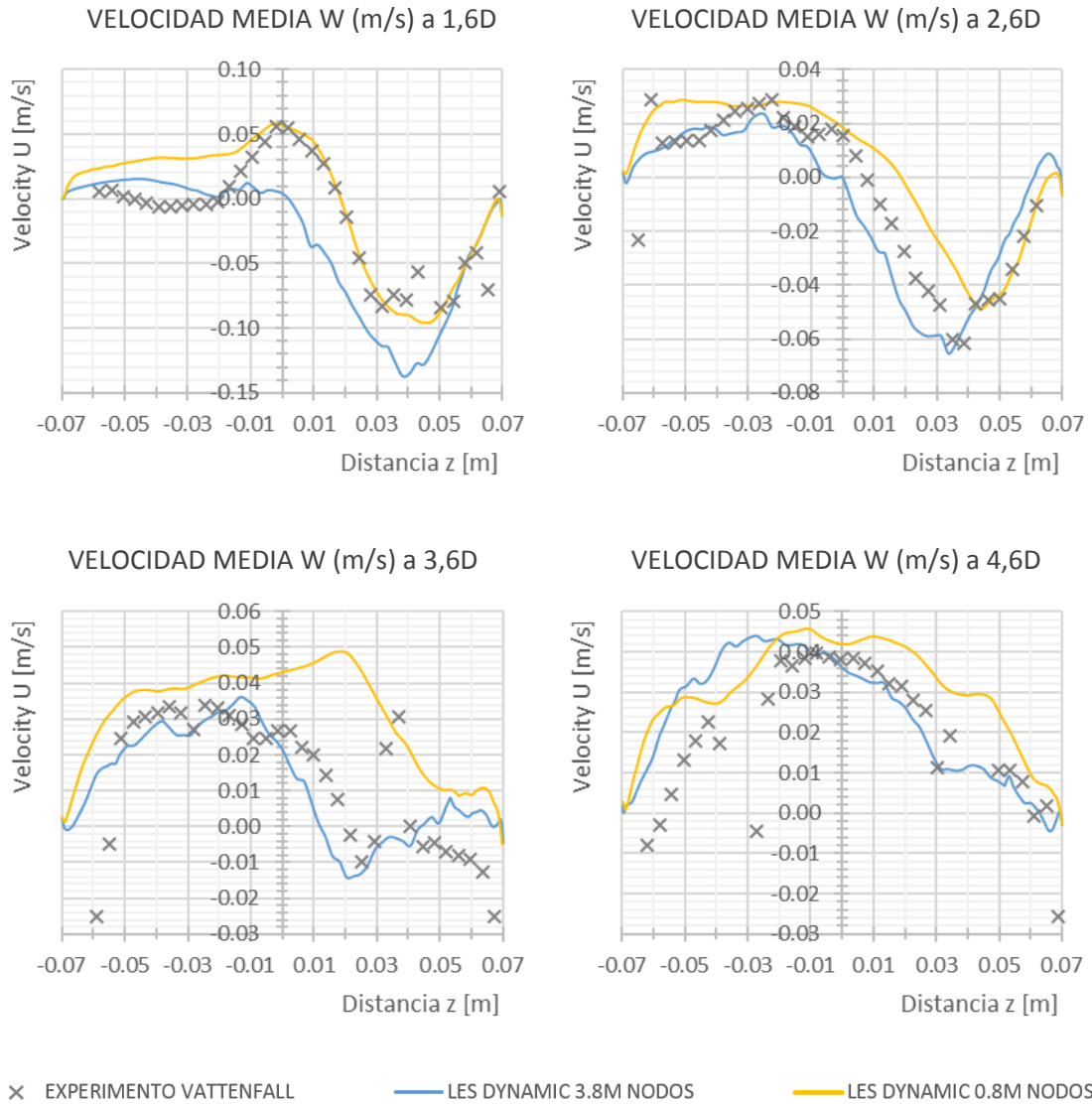
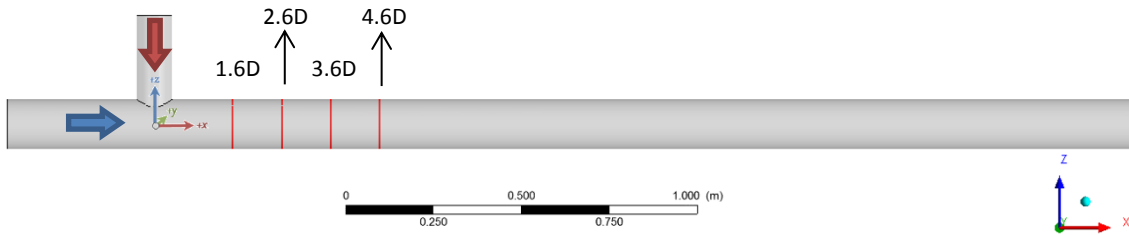
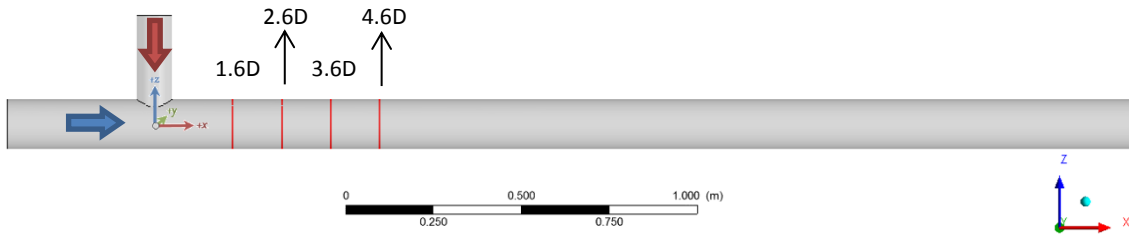
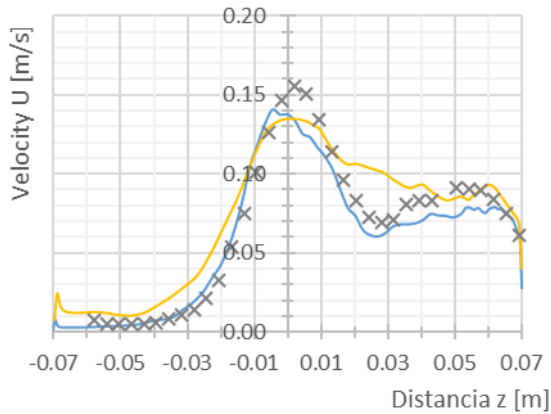


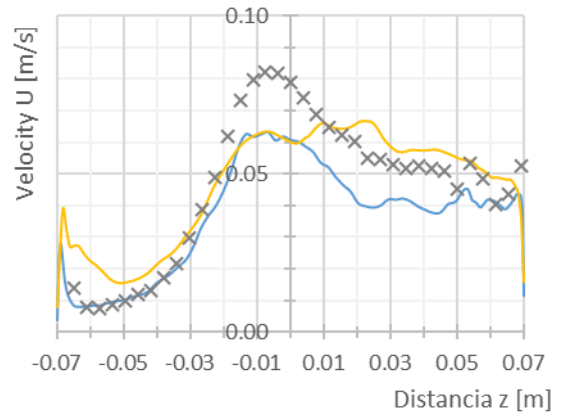
Figura 35. Gráficos con la comparativa de la velocidad media w entre los dos modelos Dynamic LES 0.8 y 3.8 millones de nodos y el experimento en 4 bandas a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6D.



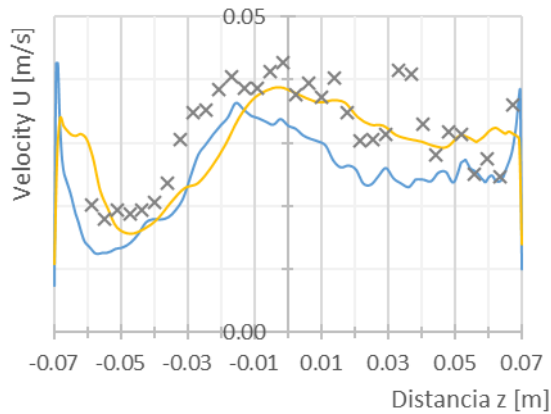
FLUCTUACIÓN VELOCIDAD UU (m/s) a 1,6D



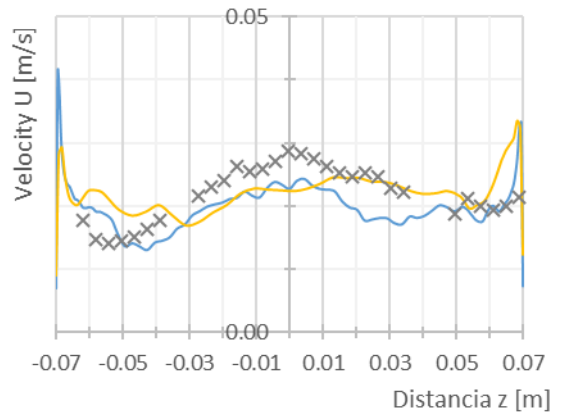
FLUCTUACIÓN VELOCIDAD UU (m/s) a 2,6D



FLUCTUACIÓN VELOCIDAD UU (m/s) a 3,6D



FLUCTUACIÓN VELOCIDAD UU (m/s) a 4,6D

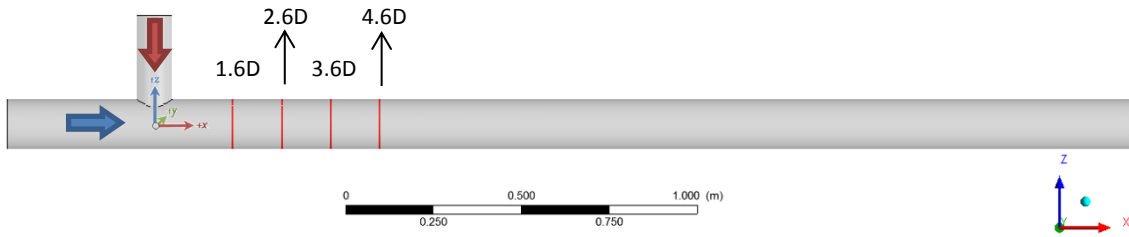


× EXPERIMENTO VATTENFALL

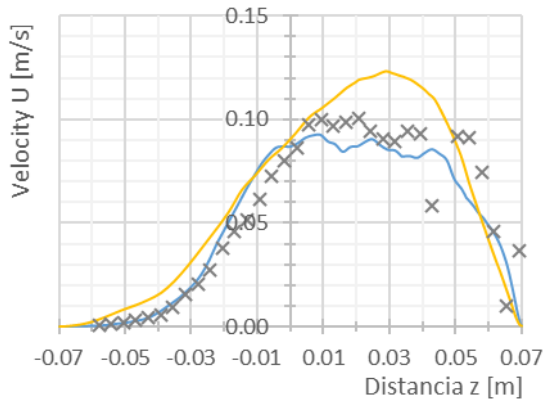
— LES DYNAMIC 3.8M NODOS

— LES DYNAMIC 0.8M NODOS

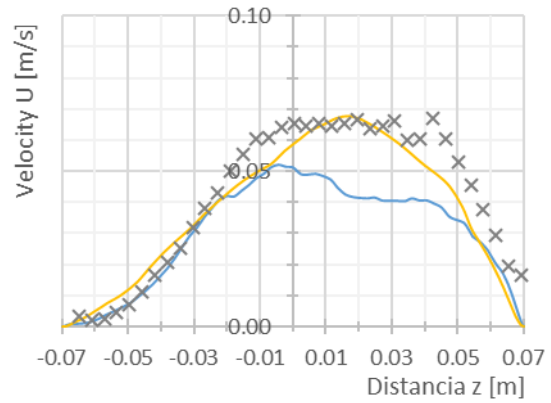
Figura 36. Gráficos con la comparativa de la fluctuación de velocidad uu entre los dos modelos Dynamic LES 0.8 y 3.8 millones de nodos y el experimento en 4 bandas a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6D.



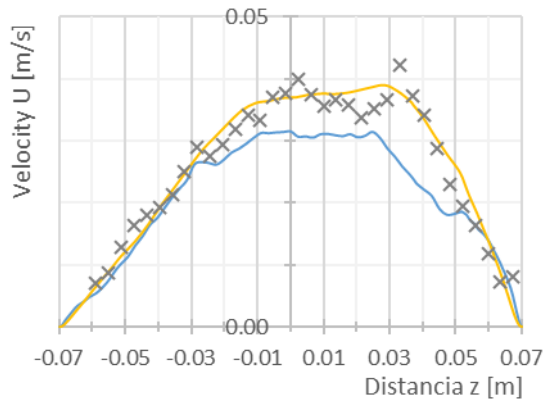
FLUCTUACIÓN VELOCIDAD WW (m/s) a 1,6D



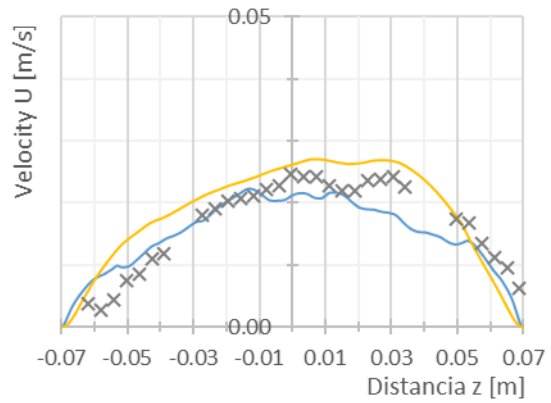
FLUCTUACIÓN VELOCIDAD WW (m/s) a 2,6D



FLUCTUACIÓN VELOCIDAD WW (m/s) a 3,6D



FLUCTUACIÓN VELOCIDAD WW (m/s) a 4,6D

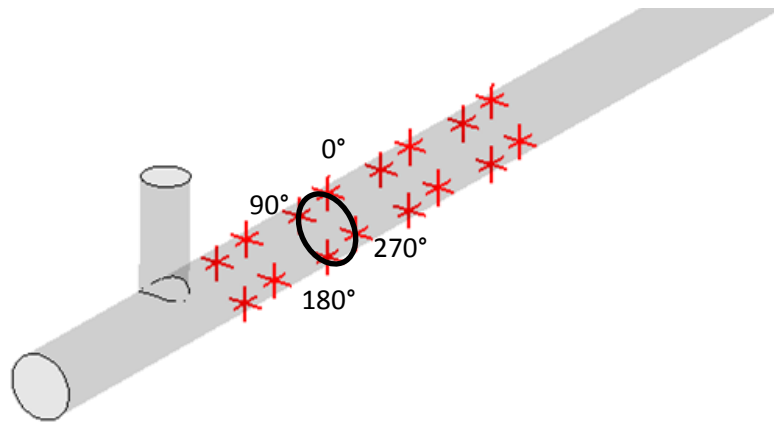


× EXPERIMENTO VATTENFALL

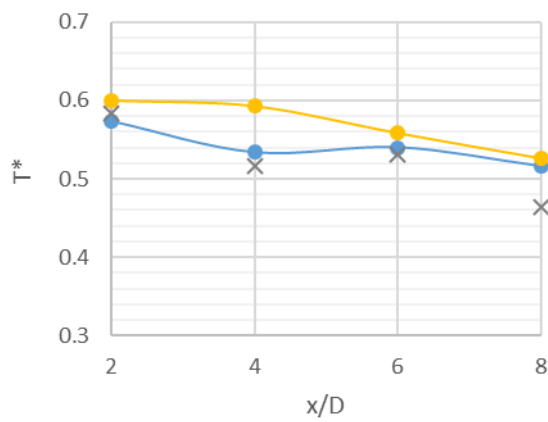
— LES DYNAMIC 3.8M NODOS

— LES DYNAMIC 0.8M NODOS

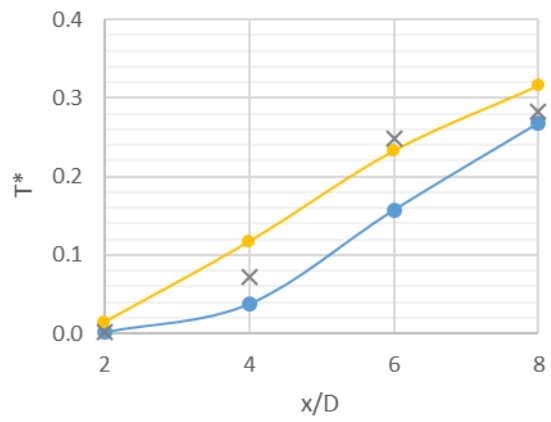
Figura 37. Gráficos con la comparativa de la fluctuación de velocidad ww entre los dos modelos Dynamic LES 0.8 y 3.8 millones de nodos y el experimento en 4 bandas a 1.6, 2.6, 3.6 y 4.6D.



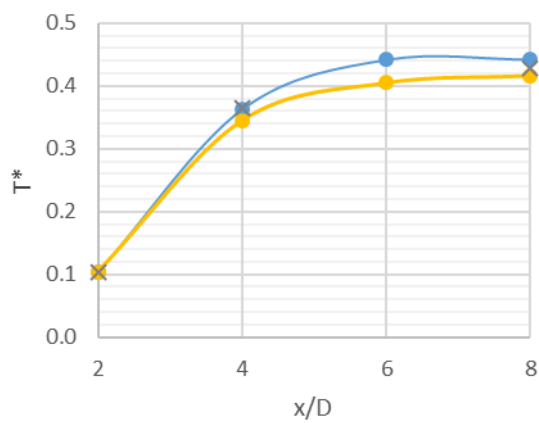
TEMPERATURA MEDIA A 0°



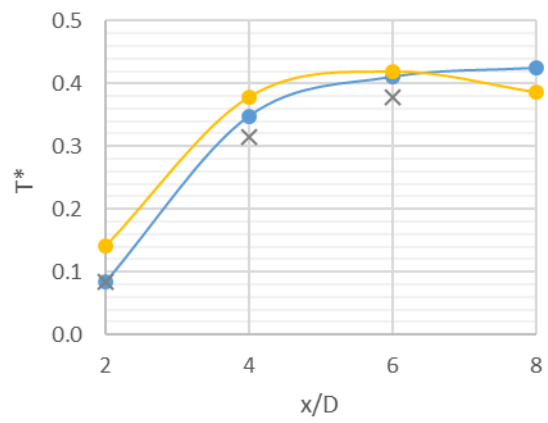
TEMPERATURA MEDIA A 180°



TEMPERATURA MEDIA A 90°



TEMPERATURA MEDIA A 270°



× EXPERIMENTO VATTENFALL

— LES DYNAMIC 3.8M NODOS

— LES DYNAMIC 0.8M NODOS

Figura 38. Temperatura normalizada de las simulaciones Dynamic LES de 0.8 y 3.8 millones de nodos y del experimento en los diferentes puntos de medida.

En las Figura 34 – 37 se muestran las distribuciones de velocidades en las diferentes zonas de la tubería. En líneas generales, puede apreciarse como el modelo de 3.8 millones de nodos (representado en azul) está más ajustado a los valores experimentales que el modelo de 0.8 millones de nodos. Nótese que, en la velocidad más importante (componente de la velocidad en el sentido del flujo o velocidad u), se predice el comportamiento real con mucha mayor precisión que en las simulaciones anteriores.

A pesar de haber reducido el tamaño de la malla, en las zonas más cercanas a la pared sigue observándose un incremento brusco de la velocidad uu . Deben hacerse más pruebas para intentar hallar el origen de este problema, aunque probablemente esté relacionado con el tratamiento que aplica el modelo al cálculo de la fluctuación de velocidad cerca de la pared.

Las temperaturas en la simulación de 3.8 millones de nodos parecen ajustarse mejor a los datos experimentales. No obstante, en la parte inferior de la tubería (180°) aún se observan desviaciones importantes.

En líneas generales podemos decir que la predicción de velocidades y temperaturas se ha mejorado con el refinado del mallado, aunque sigue habiendo determinadas zonas en la que los desvíos son notables. De nuevo, es necesario reiterar que un estudio de incertidumbres podría ser muy útil para obtener los resultados con su correspondiente banda de error, comprobando si así se ajustan los valores correctamente.

CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

Para terminar, es preciso mencionar las conclusiones más importantes del presente trabajo, así como los objetivos que pueden plantearse de cara a trabajos futuros. Una manera de comenzar este apartado es haciendo alusión a los objetivos iniciales.

La idea principal de este trabajo es la simulación con CFD de una instalación experimental PTS (*Pressure Thermal Shock*). Se ha decidido estudiar un caso de fatiga térmica producida por la fluctuación de temperatura que aparece al juntar dos fluidos a distinta temperatura. Se ha utilizado el software ANSYS® con el código CFX para tal fin, basándose en la información derivada de los trabajos experimentales de *Vattenfall Research & Development*. Los datos más importantes de la instalación real se han resumido en este trabajo, llegando al detalle únicamente en aquellos aspectos necesarios para el desarrollo del modelo del sistema.

Es importante mencionar la revisión bibliográfica que se ha recogido en el Capítulo 2, donde se ha mostrado una gran cantidad de artículos enfocados a la resolución de un problema parecido al planteado en este trabajo. Queda evidencia, por tanto, de que este campo ha sido muy estudiado por los investigadores en los últimos años dada la trascendencia que tiene en el ámbito de la seguridad nuclear.

Se ha llevado a cabo un estudio profundo de la metodología para la creación de un modelo del sistema sobre el que ejecutar las simulaciones. Para tal fin se ha creado una geometría formada por elementos de muy pequeño tamaño en los que se discretizan las ecuaciones que rigen el movimiento de los fluidos.

Con el objetivo de servir de guía para futuros trabajos se ha estudiado en detalle los modelos de turbulencia. La turbulencia tiene un papel fundamental en las simulaciones y es preciso conocer las características de las técnicas que se utilizan para calcularla. Se ha realizado un estudio de mayor profundidad del modelo *Large Eddy Simulation*, que utiliza una técnica capaz de simular las grandes escalas de remolinos y modelar las pequeñas escalas. Este cálculo de pequeños remolinos se realiza a partir de los modelos de subgrid. Se han estudiado tres modelos, Smagorinsky, WALE y Dynamic viendo el funcionamiento interno de cada uno de ellos.

Con toda la información recogida tanto en la revisión bibliográfica como en el desarrollo de la metodología de cálculo se procedió a la simulación del escenario planteado. Se han mantenido constantes las características del flujo empleadas en el experimento de *Vattenfall R&D*:

- $T_{Fría} = 19^{\circ}\text{C}$ $Q_{Fría} = 9 \text{ l/s}$ $D_{Fría} = D_{Mezcla} = 140 \text{ mm}$
- $T_{caliente} = 36^{\circ}\text{C}$ $Q_{caliente} = 6 \text{ l/s}$ $D_{caliente} = 100 \text{ mm}$
- $P = 1 \text{ atm}$

Se han realizado múltiples simulaciones, siendo las más importantes las realizadas en transitorio ya que nos permiten calcular la fluctuación de temperaturas. Se comprobó que el modelo de turbulencia más óptimo para este cálculo es *Large Eddy Simulations*. De todas las simulaciones realizadas se recogieron los tiempos de computación con objeto de servir de guía en futuros cálculos. Las características del ordenador empleado se recogen en la Tabla 9.

Se ha llevado a cabo un estudio comparativo de tres simulaciones que emplean distinto modelo de subgrid LES: Smagorinsky, WALE y Dynamic. Los resultados tanto de distribución de velocidades como de temperaturas se han comparado con los datos experimentales. A continuación, se muestra un resumen de las conclusiones más importantes:

- En líneas generales, se ha captado con bastante precisión el comportamiento de la velocidad en las áreas estudiadas, aunque algunos fenómenos turbulentos parecen mostrarse amortiguados en las simulaciones.
- La componente principal de la velocidad (Velocity u en la dirección del flujo) se reproduce correctamente, pero se observan zonas donde las diferencias con el experimento ascienden hasta un máximo de 0.2 m/s.
- Las fluctuaciones de velocidad uu (en la dirección del flujo) y ww (en dirección perpendicular al flujo) se predicen con bastante fidelidad. No obstante, hay que destacar el comportamiento que adopta la fluctuación uu cerca de la pared donde se observa un crecimiento brusco. Los datos experimentales no muestran suficiente información para comprobar si los valores son tan elevados en las proximidades de la pared, aunque este incremento puede ser debido al tratamiento que emplean los modelos de turbulencia en la transición entre laminar y turbulento.
- Los resultados obtenidos en los tres modelos fueron bastante similares entre sí por lo que se planteó una metodología cuantitativa para calcular estadísticamente el modelo más ajustado a los datos experimentales. Se calculó la proximidad entre modelo vs experimento mediante cinco métodos distintos. El resultado de este estudio mostró que el modelo Dynamic LES predijo con mayor precisión el comportamiento real de la velocidad.
- La predicción de temperaturas también fue bastante buena, pero se encontraron ligeras discrepancias en algunas zonas (por ejemplo, en la parte superior de la tubería a 4D de distancia del origen se alcanzaron máximos de diferencia de T^* de 0.08). De nuevo, ninguno de los tres modelos destaca por ajustar mejor los valores.

Adicionalmente, para comprobar si el mallado juega un papel importante en la simulación de la tubería se llevó a cabo una comparativa utilizando 3.8 millones de nodos y 0.8 millones. Los resultados mostraron una mayor predicción por parte del mallado de 3.8 millones, aunque las diferencias entre éste y el experimento todavía fueron apreciables (sobre todo en la componente de la velocidad perpendicular al sentido del flujo nombrada como velocity w).

Antes de finalizar, mencionar que se ha analizado el funcionamiento del código, ahondando en las posibilidades que ofrece para la simulación de fluidos en movimiento. Todo el conocimiento adquirido se ha resumido en forma de buenas prácticas en el uso de códigos CFD de manera que pueda servir como base para emplear todas las lecciones bien aprendidas a otro tipo de problemas en el ámbito de la seguridad nuclear.

6.1. TRABAJOS FUTUROS

El trabajo realizado es eminentemente de investigación y se puede considerar como punto de partida para investigaciones más profundas que lleven a la realización de una tesis doctoral.

Son múltiples los frentes abiertos que surgen a raíz de este trabajo. Un tema importante sería la selección de las variables que intervienen en los diferentes modelos de turbulencia que en este trabajo se ha visto que son importantes y no se ha profundizado suficientemente.

Dado que estos códigos lo suelen permitir, sería interesante estudiar e incluir nuevos modelos de turbulencia a los ya implementados en estos programas. En concreto, ANSYS® CFX permite añadir líneas de código utilizando el lenguaje distintos lenguajes de programación. Aunque tiene su propio lenguaje CCL (*CFX Command Language*) también puede usarse FORTRAN 77 y FORTRAN 90.

Otro enfoque posible sería utilizar modelos más avanzados (por ejemplo, DNS) y ver sus ventajas e inconvenientes. Para el caso de este trabajo el modelo de turbulencia LES ha resultado ser el más apropiado dadas las limitaciones de los modelos RANS. No obstante, en otros escenarios podría resultar ventajoso el uso de otros modelos de turbulencia.

Uno de los trabajos más interesantes que podrían llevarse a cabo en un futuro consistiría en la realización de experimentos en el laboratorio de termohidráulica del Instituto Universitario de Ingeniería Energética para su posterior simulación con códigos CFD.

Con los conocimientos adquiridos a raíz de este trabajo sería posible la participación en benchmarks internacionales. En estos benchmark participan expertos avanzados tanto en simulación como en experimentación lo que permite conocer el estado del arte del desarrollo de estos códigos.

Se comentó la importancia que podría tener en trabajos futuros la realización de un estudio de incertidumbre (por ejemplo, utilizando el método Wilks o el de Caos Polinómico). El objetivo de este estudio sería obtener resultados con la banda de error correspondiente y comprobar si así se ajustan los valores correctamente.

Para finalizar, mencionar que con estos trabajos futuros se tendrá un conocimiento más profundo del funcionamiento de estos códigos permitiendo mejorar las buenas prácticas en su uso.

BIBLIOGRAFÍA

- ANSYS Inc., 2015. ANSYS CFX 16.0 Solver Theory Guide. , 15317(January), pp.1–336. Available at: <http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:ANSYS+CFX-Solver+Theory+Guide#0>.
- Ayhan, H. & Sökmen, C.N., 2012. CFD modeling of thermal mixing in a T-junction geometry using LES model. *Nuclear Engineering and Design*, 253, pp.183–191.
- Brillard, O. & Edelin, D., 2009. Advanced experimental tools designed for the assessment of the thermal load applied to the mixing tee and nozzle geometries in the PWR plant. In *2009 1st International Conference on Advancements in Nuclear Instrumentation, Measurement Methods and their Applications*. IEEE, pp. 1–7. Available at: <http://ieeexplore.ieee.org/document/5503718/> [Accessed December 19, 2016].
- Canonsburg, T.D., 2009. ANSYS CFX-Solver Modeling Guide. , 15317(April), pp.724–746.
- Canonsburg, T.D., 2011a. ANSYS CFX Reference Guide. *Elements*, 15317(November), pp.724–746.
- Canonsburg, T.D., 2011b. ANSYS Meshing User s Guide. *Knowledge Creation Diffusion Utilization*, 15317(November), pp.724–746.
- Chen, M.-S. et al., 2014. Experimental observations of thermal mixing characteristics in T-junction piping. *Nuclear Engineering and Design*, 276, pp.107–114.
- Curtit, F. & Stephan, J.M., 2005. INHERPOL Thermal Fatigue Test. In *Volume 3: Design and Analysis*. ASME, pp. 331–337. Available at: <http://proceedings.asmedigitalcollection.asme.org/proceeding.aspx?articleid=1570716> [Accessed December 19, 2016].
- Le Duff, J.A. et al., 2011. High Cycle Thermal Fatigue Issues in RHRS Mixing Tees and Thermal Fatigue Test on a Representative 304 L Mixing Zone. In *ASME 2011 Pressure Vessels and Piping Conference: Volume 3*. ASME, pp. 691–699. Available at: <http://proceedings.asmedigitalcollection.asme.org/proceeding.aspx?articleid=1628117> [Accessed December 20, 2016].
- Frank, T. et al., 2010. Simulation of turbulent and thermal mixing in T-junctions using URANS and scale-resolving turbulence models in ANSYS CFX. *Nuclear Engineering and Design*, 240, pp.2313–2328.
- Hannink, M.H.C. & Blom, F.J., 2011. Numerical methods for the prediction of thermal fatigue due to turbulent mixing. *Nuclear Engineering and Design*, 241, pp.681–687.
- Höhne, T., 2014. Scale resolved simulations of the OECD/NEA–Vattenfall T-junction benchmark. *Nuclear Engineering and Design*, 269, pp.149–154.
- Hu, L.-W. & Kazimi, M.S., 2006. LES benchmark study of high cycle temperature fluctuations

- caused by thermal striping in a mixing tee. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 27(1), pp.54–64.
- Iida, K., 1992. A review of fatigue failures in LWR plants in Japan. *Nuclear Engineering and Design*, 138(3), pp.297–312.
- Jayaraju, S.T., Komen, E.M.J. & Baglietto, E., 2010. Suitability of wall-functions in Large Eddy Simulation for thermal fatigue in a T-junction. *Nuclear Engineering and Design*, 240, pp.2544–2554.
- Kamide, H. et al., 2009. Study on mixing behavior in a tee piping and numerical analyses for evaluation of thermal striping. *Nuclear Engineering and Design*, 239, pp.58–67.
- Kickhofel, J., Valori, V. & Prasser, H.M., 2014. Turbulent penetration in T-junction branch lines with leakage flow. *Nuclear Engineering and Design*, 276, pp.43–53. Available at: <http://dx.doi.org/10.1016/j.nucengdes.2014.05.002>.
- Kuczaj, A., Komen, E. & Loginov, M., 2010. Large-Eddy Simulation study of turbulent mixing in a T-junction. *Nuclear Engineering and Design*, 240, pp.2116–2122.
- Kuhn, S. et al., 2010. Computational study of conjugate heat transfer in T-junctions. *Nuclear Engineering and Design*, 240, pp.1548–1557.
- Kuschewski, M., Kulenovic, R. & Laurien, E., 2013. Experimental setup for the investigation of fluid-structure interactions in a T-junction. *Nuclear Engineering and Design*, 264, pp.223–230. Available at: <http://dx.doi.org/10.1016/j.nucengdes.2013.02.024>.
- Lee, J.I. et al., 2009. Numerical analysis of thermal striping induced high cycle thermal fatigue in a mixing tee. *Nuclear Engineering and Design*, 239, pp.833–839.
- Lin, C., Chen, M. & Ferng, Y., 2016. Investigating thermal mixing and reverse flow characteristics in a T-junction by way of experiments.
- Lu, T. et al., 2009. Large-eddy simulations (LES) of temperature fluctuations in a mixing tee with/without a porous medium. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53, pp.4458–4466.
- Lydell, B. & Riznic, J., 2008. OPDE—The international pipe failure data exchange project. *Nuclear Engineering and Design*, 238(8), pp.2115–2123.
- Mahaffy, J. et al., 2014. Best Practice Guidelines for the Use of CFD in Nuclear Reactor Safety Applications. *Nea/Csni/R(2014)11*, pp.1–176.
- Metzner, K.-J. & Wilke, U., 2005. European THERFAT project—thermal fatigue evaluation of piping system “Tee”-connections. *Nuclear Engineering and Design*, 235, pp.473–484.
- Naik-Nimbalkar, V.S. et al., 2010. Thermal mixing in T-junctions. *Chemical Engineering Science*, 65, pp.5901–5911.
- Nakamura, A., Oumaya, T. & Takenaka, N., 2009. Numerical investigation of thermal striping at a mixing tee using detached eddy simulation.
- Ndombo, J.-M. & Howard, R.J.A., 2011. Large Eddy Simulation and the effect of the turbulent inlet conditions in the mixing Tee. *Nuclear Engineering and Design*, 241(6), pp.2172–2183.

- Ogawa, H. et al., 2002. EXPERIMENTAL STUDY ON FLUID MIXING PHENOMENA IN T-PIPE JUNCTION WITH UPSTREAM ELBOW.
- Selvam, P.K., Kulenovic, R. & Laurien, E., 2016. Experimental and numerical analyses on the effect of increasing inflow temperatures on the flow mixing behavior in a T-junction. *International Journal of Heat and Fluid Flow*.
- Selvam, P.K., Kulenovic, R. & Laurien, E., 2015. Large eddy simulation on thermal mixing of fluids in a T-junction with conjugate heat transfer. *Nuclear Engineering and Design*, 284, pp.238–246.
- Simoneau, J.-P., Champigny, J. & Gelineau, O., 2010. Applications of large eddy simulations in nuclear field. *Nuclear Engineering and Design*, 240, pp.429–439.
- Smith, B.L. et al., 2011. Report of the OECD/NEA-Vattenfall T-Junction Benchmark exercise. *Nea/Csni/R(2011)5*, pp.1–92.
- Timperi, A., 2014. Conjugate heat transfer LES of thermal mixing in a T-junction. *Nuclear Engineering and Design*, 273, pp.483–496.
- Vreman, A.W., 2004. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. *Physics of Fluids*, 16(10).
- Walker, C. et al., 2009. Investigations on mixing phenomena in single-phase flow in a T-junction geometry. *Nuclear Engineering and Design*, 239, pp.116–126.
- Walker, C. et al., 2010. Steady-state RANS-simulations of the mixing in a T-junction. *Nuclear Engineering and Design*, 240, pp.2107–2115.
- Westin, J. et al., 2008. High-Cycle Thermal Fatigue in Mixing Tees: Large-Eddy Simulations Compared to a New Validation Experiment. In *Volume 2: Fuel Cycle and High Level Waste Management; Computational Fluid Dynamics, Neutronics Methods and Coupled Codes; Student Paper Competition*. ASME, pp. 515–525. Available at: <http://proceedings.asmedigitalcollection.asme.org/proceeding.aspx?articleid=1631631> [Accessed December 21, 2016].