

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL  
FACULTAD REGIONAL DE LA PLATA

---

**Simulación del transporte de  
agente de sostén en estimulación  
hidráulica**

---

*Autor:*

Mauro BALDINI

*Director:*

Luis Ariel PUGNALONI

*Co-director:*

Martín SÁNCHEZ

*Tesis presentada para optar por el grado de Doctor en Ingeniería,  
Mención Materiales de la Universidad Tecnológica Nacional*

1 de julio de 2020

# Declaración de propiedad

---

Este trabajo de tesis titulado “Simulación del transporte de agente de sostén en estimulación hidráulica” es presentado para optar por el grado de Doctor en Ingeniería, Mención Materiales de la Universidad Tecnológica Nacional. El trabajo de investigación fue realizado en el Grupo de Materiales Granulares del Departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad Tecnológica Nacional-Facultad Regional de La Plata, bajo el financiamiento de YPF Tecnología y el CONICET.

---

*“In god we trust, all others must bring data.”*

William Edwards Deming

*A mi familia*

## Agradecimientos

Quiero agradecer a mi familia por haberme apoyado siempre en las decisiones que he tomado, particularmente en el soporte que me brindaron al tomar la decisión abandonar la actividad privada y encarar mis estudios doctorales. Los cuales, no hubieron podido realizarse sin la ayuda y el apoyo de mis directores Luis y Martín, a quienes conocí ya hace unos cuantos años atrás cuando realicé mis primeros pasos en el mundo de la ciencia durante el final de mi carrera de grado. También quiero agradecer a Manuel por la ayuda concreta en el desarrollo de esta tesis y además por ser un *fundamentalista* y *predicador* del código libre y del mundo GNU. No quiero olvidarme de mis compañeros del laboratorio que me han acompañado a lo largo de estos años, haciendo más ameno el trabajo en el laboratorio. También, quiero agradecer tanto a la Universidad Tecnológica Nacional como al Departamento de Ingeniería Mecánica por el apoyo institucional, y al CONICET e Y-TEC por el apoyo económico. También quiero agradecer a mi novia Virginia, que me ha soportado y apoyado durante todos estos años, especialmente en esos momentos donde las dificultades eran cada vez mayores y el camino parecía cada vez más largo.

## Resumen

En los reservorios convencionales el hidrocarburo se encuentra embebido en rocas que poseen alta porosidad y permeabilidad, por ello puede fluir con relativa facilidad a través de la matriz porosa. Por este motivo la explotación de este tipo de reservorios se realiza, a grandes rasgos, generando una perforación (pozo) en el reservorio para que el hidrocarburo fluya desde la formación hacia el pozo y luego hacia la superficie. El flujo desde la formación hacia el pozo se origina normalmente debido a la denominada presión de reservorio, que es simplemente la presión que poseen los fluidos en la formación. Luego, el hidrocarburo se eleva a superficie mediante un equipo de bombeo. Aunque es muy poco frecuente, debemos mencionar que en algunos reservorios convencionales, debido a una presión de reservorio alta, puede prescindirse de un equipo de bombeo.

En contrapartida, en los reservorios no convencionales (NoC), el petróleo se encuentra embebido en rocas de muy baja porosidad y permeabilidad. Consecuentemente el flujo de hidrocarburo a través de la matriz porosa es sumamente lento. Esto vuelve inviable la explotación de reservorios NoC, al menos mediante técnicas tradicionales. Para revertir tal situación se utilizan varias técnicas que tienen como fin estimular los niveles de producción del reservorio. Entre ellas se encuentra la técnica de estimulación por fracturamiento hidráulico (EH), la cual ha tomado gran importancia en la industria del petróleo en Argentina desde el descubrimiento del yacimiento Vaca Muerta ubicado en la Cuenca Neuquina. Dicha técnica consiste básicamente en el bombeo de fluido, junto con material particulado, a presiones elevadas dentro de la formación. Durante el bombeo, la presión crece hasta llegar a una instancia en la que se produce una fractura que se propagará dentro del reservorio en la medida que el bombeo persista. Al cesar el bombeo, la fractura generada tenderá a cerrarse dado que el reservorio intentará recuperar su estado inicial, pero ello es impedido por el material particulado que fue bombeado junto con el fluido. Por tal razón, a este material particulado se lo denomina agente de sostén (AS) o *proppant*<sup>1</sup>. Hay muchos tipos de AS, el mismo puede ser arena tamizada, recubierta o no por resinas poliméricas, partículas cerámicas, partículas poliméricas e incluso cáscara de nuez molida. Para la implementación exitosa de la EH resulta de suma importancia maximizar el volumen efectivamente estimulado, entendiendo como tal a aquel volumen fracturado y que se encuentra apuntalado por AS luego de

---

<sup>1</sup>El término *proppant* se originó en la industria petrolera debido a la combinación de las palabras *propping agent*.

la liberación de presión. De este modo, el transporte y la distribución de AS a lo largo de la fractura resulta de vital importancia.

Desde el punto de vista fluidodinámico el flujo de partículas en el seno de un fluido se considera como un caso particular de flujo multifásico, en el que la fase dispersada es sólida. Para el modelado de este tipo de problemas existen varios esquemas numéricos disponibles, en líneas generales podemos decir que hay dos grandes enfoques, los de tipo Euler-Euler y Euler-Lagrange. En el enfoque Euler-Euler se considera a las dos fases como dos materiales continuos, de modo que la fase sólida se describe de forma promediada. En cambio, en el enfoque Euler-Lagrange se considera a las partículas de forma individual. El esquema CFD-DEM es uno de los esquemas Euler-Lagrange más populares, dado que con un costo computacional aceptable modela adecuadamente la interacción fluido-partícula y partícula-partícula. El mismo combina el Método de Volúmenes Finitos (FVM) junto con el Método de los Elementos Discretos (DEM), vinculando ambas fases a través del intercambio de momento lineal.

En esta tesis doctoral se presentan resultados obtenidos por medio de simulación numérica empleando un esquema CFD-DEM sobre el transporte del agente de sostén en un modelo de fractura hidráulica plana, obtenido mediante escalado de una fractura real. Se considera la inyección de distintos tipos de AS siguiendo distintos protocolos de inyección, modificando la posición y el orden en el cual el AS es inyectado en la celda que modela una fractura plana. Se determina el impacto que dichas variantes tienen sobre la distribución y mezcla del AS en la celda, midiendo el perfil de la duna y el grado de mezcla del AS una vez que le mismo se ha decantado por completo. Esto último es posible dado que el esquema CFD-DEM modela individualmente a las partículas. Dado que el modelo de estudio ha sido escalado de una fractura real, se espera poder aportar nuevo conocimiento para las operaciones de campo mediante una extrapolación de los resultados y conclusiones obtenidas.

Se mostró que inyectando AS en la parte superior de la celda, se obtiene una duna plana. En cambio, inyectando en la zona media o inferior se obtiene una duna centrada o cercana a los puntos de inyección, respectivamente. La práctica usual de inyectar AS de baja densidad, seguido de un agente de sostén más denso y de mayor diámetro produce una capa uniforme de partículas más livianas en la base de la celda sobre la cual se deposita una segunda capa de partículas más pesadas. La inyección simultánea de dos tipos distintos de AS genera una duna mezclada, mientras que la inyección en etapas

produce una duna segregada. Sin embargo, pese a las diferencias producidas por los diferentes protocolos de inyección, aproximadamente se obtiene el mismo perfil de duna.

# Índice general

<b>Declaración de propiedad</b>	<b>i</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>iv</b>
<b>Resumen</b>	<b>v</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 Motivación . . . . .	1
1.1.1 Sistema petrolero . . . . .	1
1.1.2 Estimulación hidráulica . . . . .	4
Fluido de fractura . . . . .	10
Agente de sostén . . . . .	11
1.1.3 Reservorios no convencionales en Argentina . . . . .	12
1.2 Estado del arte . . . . .	14
1.3 Alcances y objetivos . . . . .	18
1.4 Estructura de la tesis . . . . .	19
<b>2 Marco teórico</b>	<b>21</b>
2.1 Simulación numérica . . . . .	21
2.2 Fluidodinámica Computacional – CFD . . . . .	21
2.2.1 Ecuaciones de Gobierno . . . . .	21
2.2.2 Método de los Volúmenes Finitos . . . . .	30
2.2.3 Tratamiento de las ecuaciones de Navier–Stokes . . . . .	38
2.2.4 Algoritmo PISO . . . . .	40
2.3 Método de los Elementos Discretos – DEM . . . . .	42
Interacción . . . . .	43
2.4 Esquema CFD–DEM . . . . .	45
2.4.1 Ecuaciones VANS . . . . .	45
2.4.2 Acople . . . . .	46
2.4.3 Modelos de arrastre . . . . .	47
2.5 Herramientas de software utilizadas . . . . .	48
2.5.1 CFDEM . . . . .	48

2.5.2	OpenFOAM . . . . .	48
2.5.3	LIGGGHTS . . . . .	48
<b>3</b>	<b>Validaciones Numéricas</b>	<b>50</b>
3.1	Decantación de una partícula en un recinto . . . . .	50
3.2	Fluidización de una cama granular . . . . .	52
3.3	Reproducción de resultados de transporte de AS de otros autores	57
<b>4</b>	<b>Transporte de agente de sostén en una celda plana</b>	<b>63</b>
4.1	Modelo numérico . . . . .	63
4.2	Análisis dimensional . . . . .	67
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>70</b>
5.1	Parámetros del modelo numérico . . . . .	70
5.1.1	Celda de estudio . . . . .	70
5.1.2	Condiciones de contorno . . . . .	71
5.1.3	Discretización del dominio . . . . .	71
5.1.4	Parámetros del fluido . . . . .	72
5.1.5	Parámetros del acople . . . . .	73
5.1.6	Parámetros de las partículas . . . . .	73
5.1.7	Protocolos de inyección . . . . .	74
5.2	Análisis de sensibilidad . . . . .	75
5.3	Efecto de la velocidad de inyección . . . . .	77
5.4	Efecto de la viscosidad del fluido . . . . .	79
5.5	Efecto de la posición de los <i>clusters</i> de inyección . . . . .	80
5.6	Inyección de mezclas . . . . .	85
5.7	Discusión de los resultados . . . . .	91
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>93</b>
6.1	Conclusiones y perspectivas . . . . .	93
6.2	Trabajos futuros . . . . .	94
<b>A</b>	<b>Perfiles de duna</b>	<b>96</b>
<b>B</b>	<b>Entropía de mezcla</b>	<b>98</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>100</b>

# Abreviaciones

<b>CFD</b>	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
<b>CFD-DEM</b>	<i>Computational Fluid Dynamics – Discrete Element Method</i>
<b>CI</b>	<i>Coupling Interval</i>
<b>CM</b>	<i>Concentration Model</i>
<b>COT</b>	<b>Carbono Orgánico Total</b>
<b>DEM</b>	<i>Discrete Element Method</i>
<b>DNS</b>	<i>Direct Numerical Simulation</i>
<b>EH</b>	<b>Estimulación Hidráulica</b>
<b>FVM</b>	<i>Finite Volume Method</i>
<b>HVFR</b>	<i>High Viscosity Friction Reducer</i>
<b>MP-PIC</b>	<i>Multi Phase – Particle In Cell</i>
<b>NoC</b>	<b>No Convencional</b>
<b>N-S</b>	<i>Navier Stokes</i>
<b>PISO</b>	<i>Pressure Implicit with Splitting of Operators</i>
<b>RANS</b>	<i>Reynolds Averaged Navier–Stokes</i>
<b>SIMPLE</b>	<i>Semi – Implicit Method for Pressure – Linked Equations</i>
<b>SIMPLEC</b>	<b>SIMPLE</b> <i>Corrected</i>
<b>SIMPLER</b>	<b>SIMPLE</b> <i>Revised</i>
<b>TFM</b>	<i>Two Fluid Model</i>
<b>UDS</b>	<i>Upwind Differencing Scheme</i>
<b>VANS</b>	<i>Volume Averaged Navier Stokes</i>
<b>VC</b>	<b>Volumen de Control</b>

# Símbolos

$\kappa$	permeabilidad	D
$\mu_f$	viscosidad dinámica del fluido	cP
$\nu_f$	viscosidad cinemática del fluido	m <sup>2</sup> /s
$\tau$	tensor de estrés viscoso	Pa
$\tau^R$	tensor de estrés Reynolds	Pa
$\rho_f$	densidad del fluido	kg/m <sup>3</sup>
$\nu_t$	viscosidad turbulenta	m <sup>2</sup> /s
$k$	energía cinética turbulenta	J/kg
$\epsilon$	disipación de energía cinética turbulenta	J/kg·s
$I_T$	intensidad de turbulencia	%
$\tau_w$	tensión en la pared	Pa
$\rho_p$	densidad de las partículas	kg/m <sup>3</sup>
$\mathcal{M}$	coeficiente de fricción	-
$\mathcal{V}$	coeficiente de Poisson	-

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1 Motivación

Los hidrocarburos se encuentran presentes en la naturaleza bajo distintas formas, ya sea en reservorios convencionales, no convencionales y naturalmente fracturados. Cada reservorio posee características particulares que hace que su explotación sea sustancialmente diferente en cada caso.

La geología se encarga de la exploración y explotación de este tipo de recursos, y clasifica a los reservorios haciendo uso de un concepto denominado **sistema petrolero**.

#### 1.1.1 Sistema petrolero

De acuerdo a Magoon y Dow [1], **sistema** hace referencia a la interdependencia entre una serie de elementos esenciales y procesos.

- Los elementos esenciales: roca madre (o roca generadora), roca reservorio, roca sello y carga geoestática.
- Los procesos: formación de la trampa, generación, migración y acumulación de hidrocarburos.

Por otro lado, **petrolero** hace referencia a la concentración de hidrocarburos en este tipo de sistemas, ya sea en reservorios convencionales, no convencionales o naturalmente fracturados. Podemos ver un esquema de un sistema petrolero en la Fig. 1.1.

En la actualidad se acepta el hecho de que los hidrocarburos se formaron hace millones de años por la acción combinada de organismos vivientes y por la alteración térmica de la materia orgánica en las rocas sedimentarias, siendo el plancton marino y la biota lacustre los componentes primordiales para la generación [2].

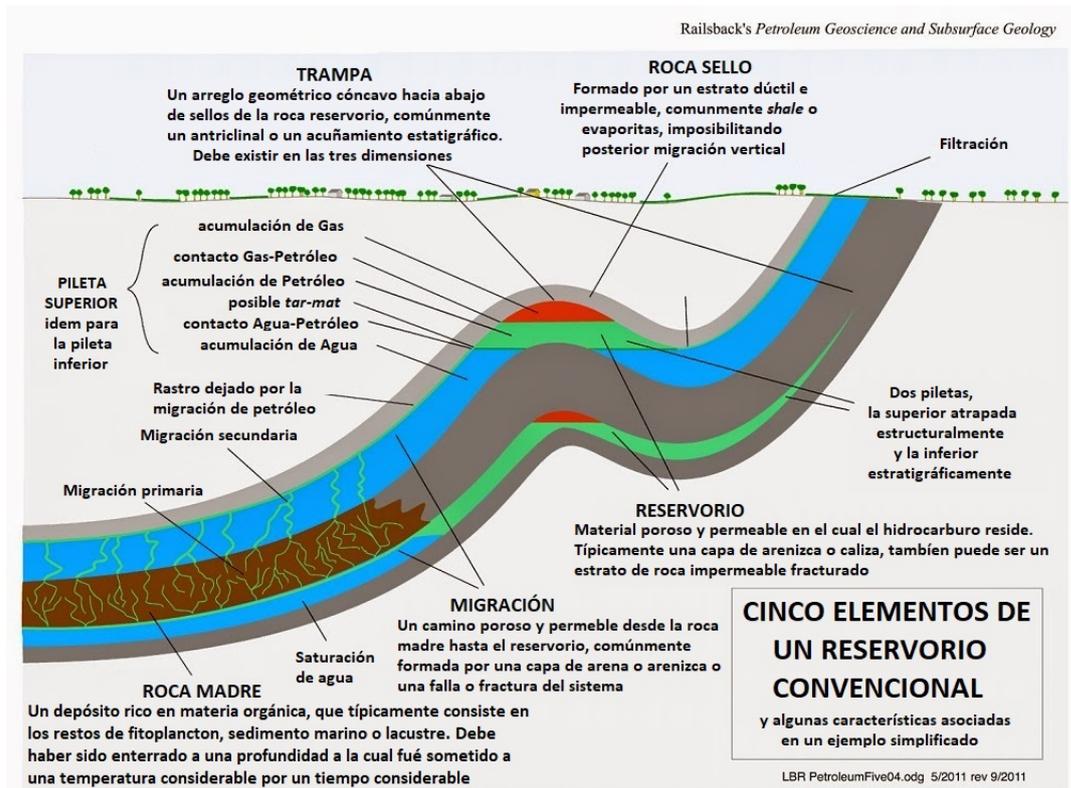


Figura 1.1: Representación esquemática de un sistema petrolero, tomado y adaptado de GeologyIn (<http://www.geologyin.com>).

Describiremos brevemente los elementos y procesos que componen a un sistema petrolero.

- **Roca generadora:** Está conformada por rocas sedimentarias con tamaño de grano fino con alto contenido de carbonatos y materia orgánica. La cantidad de materia orgánica se mide mediante el contenido total de carbono orgánico (COT), el que se expresa como un porcentaje en peso. Concentraciones mayores a 1 o 2 % resultan de interés para la industria petrolera. El rápido soterramiento de sedimentos con alto contenido de materia orgánica permite la preservación de la misma y facilita los cambios fisicoquímicos resultando en diversos productos, tales como el kerógeno, el bitúmen e hidrocarburos. La acumulación de hidrocarburos debido a la generación y acumulación, produce un aumento de presión interna en la roca que lo contiene, generando microfracturas que permiten el movimiento de los hidrocarburos. En estas condiciones, la roca madre tiende a expulsar a los hidrocarburos, posibilitando la migración y acumulación de los mismos en otra roca (roca reservorio).

En el caso de los reservorios no convencionales del tipo *shale*, la migración es prácticamente nula o inexistente, y los hidrocarburos se acumulan en la misma roca generadora.

- **Roca reservorio:** Está conformada por un medio poroso y permeable de modo que los hidrocarburos pueden almacenarse en los espacios porales (porosidad) y a su vez fluir (permeabilidad) dentro del reservorio [3].
- **Roca sello:** Es una roca que, debido a sus características de baja permeabilidad, conforma un límite para la migración de hidrocarburos. Esto impide que los hidrocarburos sean liberados a la atmósfera.
- **Carga geoestática:** Está conformada por el peso del volumen de roca ubicado sobre la roca madre, reservorio y sello. Provee la presión y temperaturas necesarias para que la materia orgánica presente en la roca generadora evolucione hacia hidrocarburos.
- **Formación de la trampa:** Es un arreglo geométrico de rocas que permite la acumulación de hidrocarburos en el subsuelo. La trampa está formada por la roca reservorio, el sello, los fluidos involucrados y el arreglo geométrico que posibilita tal acumulación (ver Fig. 1.1).
- **Generación:** Es la transformación de la materia orgánica presente en la roca bajo la acción de la presión y temperatura, en un ambiente anaeróbico. Dicho proceso de transformación, eventualmente produce kerógeno, bitúmen, hidrocarburos y material residual. Este proceso de transformación es conocido como **Maduración**.
- **Migración:** Los hidrocarburos se desplazan desde la roca generadora a la roca reservorio. Para que el petróleo migre deben existir gradientes de presión y cambios de volumen en las rocas involucradas. Además, la roca generadora debe tener las características apropiadas para que el hidrocarburo sea capaz de migrar hacia la roca reservorio, por ejemplo en las formaciones tipo *shale* esta migración es posible pero el proceso es sumamente lento.
- **Acumulación:** Corresponde al estado final de la migración de los hidrocarburos, y ocurre en las rocas reservorio convencionales, en los reservorios no convencionales y en los naturalmente fracturados. Dicha acumulación debe preservarse en el tiempo para que luego puedan ser explotados.

Habiendo definido brevemente los conceptos que conforman el marco teórico de sistema petrolero estamos en condiciones de definir los distintos tipos de reservorios. Los reservorios que poseen la totalidad de los elementos y procesos de un sistema petrolero conforman los denominados **reservorios convencionales**. Por otro lado, en los reservorios **no convencionales**, no se verifican la totalidad de los elementos y/o procesos que conforman a un sistema petrolero. Las características principales de un reservorio no convencional tipo *shale* son

- La roca generadora posee muy baja permeabilidad.
- La migración es inexistente o virtualmente nula, en comparación a los tiempos de producción.
- El proceso de acumulación se verifica en la misma roca madre.

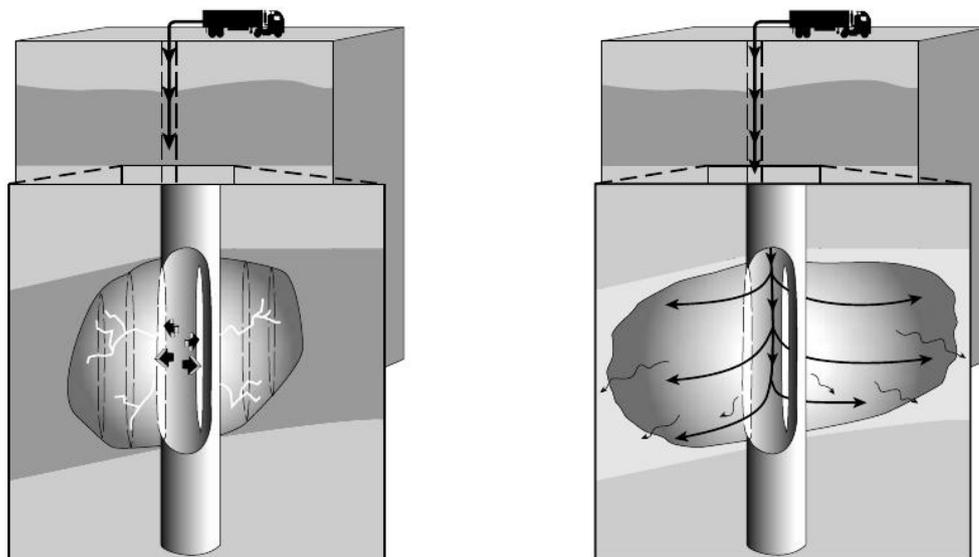
Algunos autores definen a los reservorios convencionales como aquellos en los cuales no hay que aplicar procesos especiales para producir volúmenes comerciales [4]. Es así que se identifica a los reservorios no convencionales, como aquellos que debido a su baja permeabilidad, requieren estimulaciones para producir hidrocarburos. Quedan fuera de esta clasificación los reservorios naturalmente fracturados que poseen complejidades propias. Los mismos se caracterizan generalmente en función de la interacción entre la roca y las fracturas naturales (ver por ejemplo [5]).

### 1.1.2 Estimulación hidráulica

En la sección 1.1 ya adelantamos que sobre los reservorios no convencionales debe realizarse algún proceso (estimulación hidráulica) para posibilitar la explotación económica. En este sentido es necesario realizar algún procedimiento que incremente la permeabilidad de los reservorios a fin de poder extraer el hidrocarburo presente en los mismos.

La técnica de estimulación hidráulica ha sido utilizada desde la década del '40, pero su concepto ha evolucionado a lo largo del tiempo. Inicialmente fue utilizada para solucionar problemas de daño en formación causado por el fluido de perforación, luego para estimular masivamente reservorios y finalmente para tratamientos del tipo *tip-screenout*. Más allá de esta evolución, los principios físicos de la estimulación hidráulica son los mismos [6].

Si un fluido es bombeado dentro de un pozo, a una tasa mayor a la tasa que el fluido puede escapar hacia la formación (suponiendo que se verifica pérdida de fluido a la formación), indefectiblemente la presión aumentará



(a) Inicio de una fractura en el reservorio debido al incremento de presión interna generado por el bombeo de fluido.

(b) Propagación de la fractura debido al subsiguiente bombeo de fluido a una tasa superior a la de *leak-off*<sup>1</sup>.

Figura 1.2: Representación esquemática de proceso de estimulación hidráulica, y su posterior propagación. Tomado de [7].

hasta que alguno de los elementos del sistema perforación-reservorio fallen de modo que la presión se libere. Dado que las propiedades mecánicas de la roca son considerablemente inferiores a las del acero que conforma la camisa (*casing*) de la perforación, el reservorio se fracturará. Podemos ver una representación de este proceso en la Fig 1.2a.

Para comprender el proceso de iniciación y propagación de fracturas, debemos comprender como es el estado tensional presente en la corteza terrestre. En la misma se verifican tres esfuerzos, cada uno actuando en tres direcciones distintas. Dichas direcciones además coinciden con las direcciones principales del sistema, es decir, son las direcciones en las cuales se verifican los esfuerzos máximos. En primer lugar se encuentra la carga geostática ( $S_v$ ) (*overburden*) en la dirección vertical principal; en un plano perpendicular a dicha dirección se encuentran dos esfuerzos horizontales debidos principalmente a las deformaciones tectónicas. En el caso más general, habrá un esfuerzo horizontal máximo ( $S_{h_{max}}$ ) y otro mínimo ( $S_{h_{min}}$ ). Debemos mencionar que la existencia de estos tres esfuerzos se verifica en condiciones determinadas y a la profundidad de explotación de los hidrocarburos. En la Fig. 1.3 hemos representado esquemáticamente estos esfuerzos.

<sup>1</sup>Se denomina *leak-off* a la pérdida de fluido de fractura hacia la formación

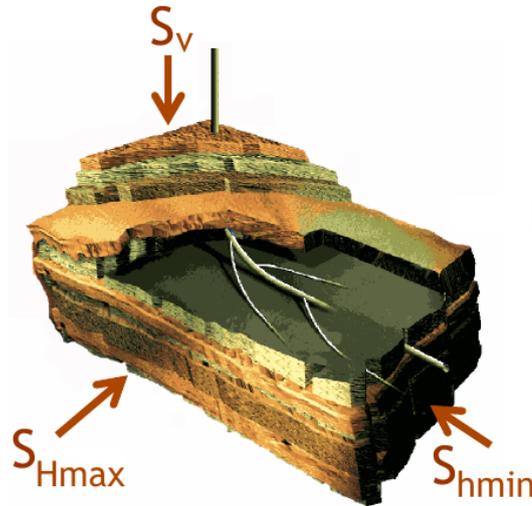


Figura 1.3: Representación esquemática de los esfuerzos presentes en el subsuelo. Tomado de Zoback [7]

De la relación entre las magnitudes relativas de los tres esfuerzos principales, se definen los tres modos de falla posibles de la corteza terrestre<sup>2</sup>

- normal  $\Rightarrow S_v > S_{h_{max}} > S_{h_{min}}$
- transcurrente  $\Rightarrow S_{h_{max}} > S_v > S_{h_{min}}$
- inverso  $\Rightarrow S_{h_{max}} > S_{h_{min}} > S_v$

Esta clasificación, basada en las magnitudes relativas de los esfuerzos principales, se la conoce como clasificación de Anderson [8], y permite de una forma sencilla caracterizar los modos de falla de la corteza terrestre dado el estado tensional de la misma. En la Fig. 1.4 vemos la representación esquemática de los distintos modos de falla, las pequeñas flechas indican los movimientos relativos a través de los cuales se producirá la falla.

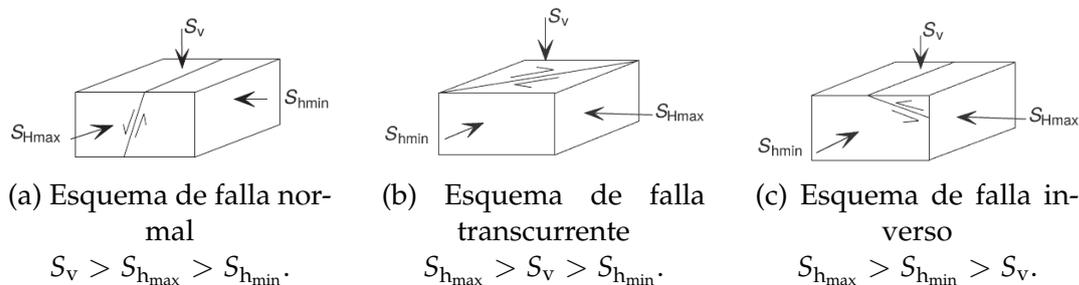


Figura 1.4: Representación esquemática de los distintos mecanismos de falla. Tomado de [7]

<sup>2</sup>En la bibliografía se estos tres modos de falla se denominan *normal*, *strike-slip* y *reverse faulting* respectivamente.

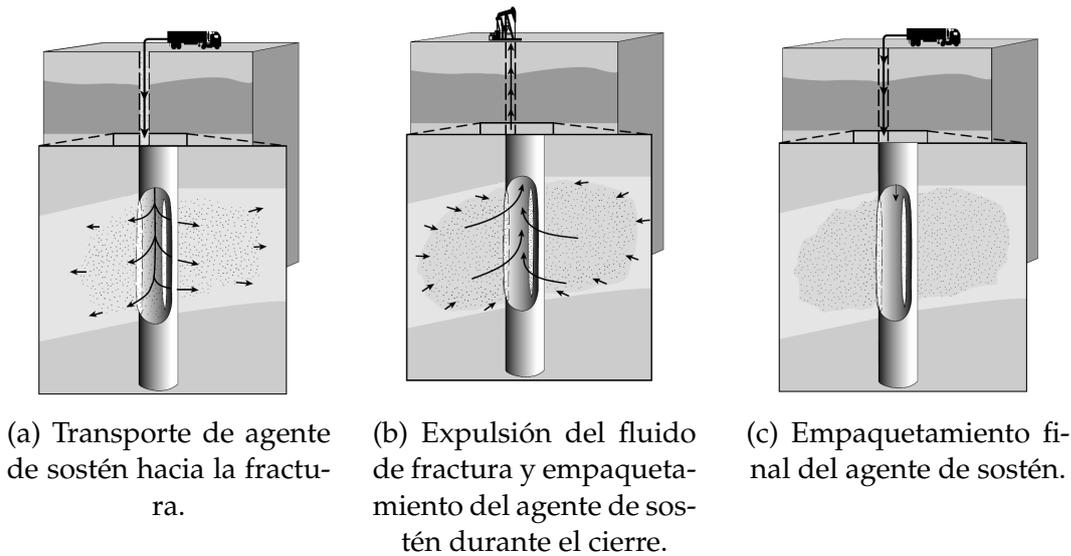


Figura 1.5: Representación esquemática del transporte y empaquetamiento de agente de sostén durante el proceso de estimulación hidráulica. Tomado de Zoback [7]

En la mayoría de los casos, la corteza terrestre presenta un modo de falla normal. En estas condiciones, la dirección de menor esfuerzo se encuentra sobre el plano horizontal. Por lo tanto, la iniciación de la fractura se verificará sobre un plano cuya perpendicular coincide con la dirección de menor esfuerzo. Ahora bien, en la medida que la tasa de inyección de fluido sea mayor que la tasa a la cual el fluido perméa dentro de la formación (*leak-off*) la fractura crecerá y se propagará. Siempre sobre el plano cuya perpendicular es la dirección de menor esfuerzo principal. Representamos esquemáticamente este proceso en la Fig. 1.2b.

Una vez generada la fractura, si la presión es retirada, la misma se cerrará debido a los esfuerzos presentes en la corteza terrestre. Por ese motivo, junto con el fluido, se bombea *proppant* (*propping-agent*) o agente de sostén (AS). El AS es básicamente material granular que, al ser bombeado junto con el fluido, ingresa en la fractura y cuando la presión es liberada permanece dentro de la misma impidiendo su cierre. Una vez cerrada la fractura, el agente de sostén provee canales de alta permeabilidad a través de los cuales el hidrocarburo presente en el reservorio puede fluir [6]. En la Fig. 1.5 representamos esquemáticamente este proceso. En la Fig. 1.5a vemos como el AS ingresa en la fractura junto con el fluido de fractura, en la Fig. 1.5b se aprecia como el fluido es expulsado durante la etapa de cierre y en la Fig. 1.5c vemos como el empaquetamiento de agente de sostén, una vez que la fractura se ha cerrado completamente, provee un medio poroso de alta permeabilidad a través del

cual el hidrocarburo puede fluir hacia el pozo. En estas condiciones, el flujo del hidrocarburo durante la producción se encuentra dominado por la ley de Darcy (flujo en medios porosos). La misma establece que el flujo  $Q$  [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] de un fluido de viscosidad dinámica  $\mu$  [ $\text{Pa}\cdot\text{s}$ ] en un medio poroso de permeabilidad  $\kappa$  [ $\text{m}^2$ ] sometido a un gradiente de presión  $\nabla p$  [ $\text{Pa}/\text{m}$ ], se encuentra dado por:

$$Q = -\frac{\kappa A}{\mu} \nabla p, \quad (1.1)$$

siendo  $A$  [ $\text{m}^2$ ] el área a través de la cual se verifica el flujo.

Pese a que la permeabilidad  $\kappa$  tiene unidades de área, en la industria del petróleo normalmente se la expresa en Darcy [D]. Un medio poroso con una permeabilidad de 1 D permite un flujo de  $1 \text{ cm}^3/\text{s}$  de un fluido con una viscosidad de 1 cP bajo un gradiente de presión de 1 atm/cm actuando sobre una superficie de  $1 \text{ cm}^2$ . Dado que  $\kappa$  dimensionalmente corresponde a un área, vale mencionar que  $1\text{D} = 9,87 \times 10^{-13} \text{ m}^2$ .

Si ahora consideramos la permeabilidad que posee la roca que conforma un reservorio, podemos comprender porqué es necesario realizar el proceso de estimulación por fractura hidráulica en los reservorios no convencionales tipo *shale*. Típicamente, la permeabilidad de una roca convencional se encuentran en el orden de los mD, mientras que en una roca NoC tipo *shale* en el orden de los nD =  $10^{-6}$  mD. Vemos una diferencia de 6 órdenes de magnitud entre la permeabilidad de un reservorio convencional y uno no convencional.

Luego de la liberación de presión, cualquier zona que no haya sido correctamente fracturada y apuntalada con agente de sostén, disminuirá dramáticamente la permeabilidad de toda la fractura [9]. Por tal motivo, el transporte y distribución de agente de sostén es uno de los factores críticos que determina los subsecuentes niveles de producción de los pozos.

Los pozos pueden ser verticales u horizontales de acuerdo a su trayectoria, en el caso de reservorios convencionales los hay de los dos tipos. En cambio, para reservorios no convencionales, los pozos utilizados para producción en general son horizontales, solo los pozos destinados a exploración son verticales. Un pozo horizontal se inicia como un pozo vertical hasta que se llega a la profundidad deseada y luego se lo desvía para desplazarse horizontalmente por objetivo. El beneficio de realizar pozos horizontales reside en el hecho de que los reservorios poseen una extensión lateral (arrial) varios

órdenes de magnitud superior al espesor vertical. Entonces en un pozo horizontal pueden ejecutarse varias EH con una determinada separación a lo largo de la trayectoria del pozo para estimular el mayor volumen posible de reservorio.

Los pozos se realizan perforando el subsuelo mediante un trépano. Luego en dicha perforación se introduce un tubo de menor diámetro denominado *casing* o camisa. Una vez encamisado el pozo, se bombea cemento desde la superficie por el diámetro interior de la camisa, el mismo llega hasta el final del pozo y vuelve hacia la superficie por el espacio anular entre la camisa y la perforación. Luego se baja el trépano nuevamente y se elimina el cemento del interior de la camisa. Para realizar una estimulación hidráulica se baja en el pozo una herramienta que posee pequeñas cargas explosivas que proyectan una serie de esferas perforando la camisa y el cemento llegando hasta la formación. Este procedimiento se conoce con el nombre de punzado, y las perforaciones realizadas son de alrededor de 8 mm de diámetro. Luego se aísla la zona sobre la cual se han generado las perforaciones y se bombea el fluido junto con el AS, el cuál toma contacto con el reservorio gracias a las perforaciones generadas durante el punzado.

Anteriormente mencionamos el efecto nocivo de la falta de apuntalamiento. Sumado a este problema se distinguen las siguientes problemáticas que dificultan la EH;

- Arenamiento (*screen-out*): Se produce cuando el AS se atasca cerca del inicio de la fractura, lo cual impide el subsiguiente avance del mismo hacia el interior de la fractura [10].
- Producción de arena (*flowback*): Este efecto se da durante la producción del pozo, dado que el flujo de hidrocarburo se produce en el sentido opuesto al que se desarrolló durante la fractura. Si el flujo es lo suficientemente intenso, puede llegar a desestabilizar el empaquetamiento de AS dañando la EH. Para evitar este problema, la producción del pozo se restringe utilizando orificios calibrados (*choke*) en la boca de pozo [11].
- Producción de finos (*crushing*): Luego de la liberación de la presión de bombeo, las paredes de la fractura tienden a cerrarse. Si la presión de cierre de la fractura es superior a la resistencia mecánica del AS, este se fragmentará, lo cual conllevará a una generación de finos que se depositarán en el espacio poral, lo cual se reflejará en una pérdida de conductividad en la fractura [12].

- Empotramiento (*embedment*): Si la formación es dúctil, el AS no podrá apuntalar la fractura dado que el mismo se empotrará en las paredes de la roca. Esto reducirá el espesor de la fractura, y por lo tanto, disminuirá la conductividad de la misma [13].
- *Spalling*: Si la formación es frágil, la presión generada por el AS sobre la superficie de la FH producirá rupturas de esta superficie. Esto conllevará a una generación de finos, que al igual que en el *crushing* redundará en un detrimento de la conductividad de la FH [14].

### Fluido de fractura

Propiedades del fluido de fractura tales como viscosidad y densidad afectan la capacidad de transporte del AS. Los fluidos de fractura se conforman con una base acuosa sobre la cual se agrega una serie de aditivos. Se distinguen los fluidos de baja (*slickwater*), media (gel lineal) y alta viscosidad (gel *cross-linked*). Los primeros poseen una viscosidad de alrededor de 2 o 3 cP y se forman con una base acuosa sobre la cual se agrega un reductor de fricción. Los geles lineales poseen una viscosidad de entre 20 y 50 cP, y se obtienen agregando un agente gelificante al agua de baja salinidad. Por último, los geles “croslinkados” poseen una viscosidad de entre 100 y 2000 cP y se obtienen mediante el agregado de un *cross-linker* sobre la base de agua y gel lineal. Este agente entrecruza las moléculas del gel lineal incrementando significativamente la viscosidad y además modificando el comportamiento del fluido el cual pasa a ser no-newtoniano. No puede establecerse una regla general sobre cuando usar uno u otro fluido de fractura, pero generalmente fluidos de mayor viscosidad son empleados cuando se utiliza AS de mayor diámetro y densidad alta. Los fluidos de fractura de alta viscosidad (gel *cross-linked*) han sido desarrollados para incrementar la capacidad de transporte de AS. Sin embargo, desde hace unos años, en las operaciones se ha migrado al uso de *slickwater*. Pese a la menor capacidad de transporte de estos fluidos, su uso presenta tanto ventajas económicas, como de menor daño en la formación, mayor volumen de reservorio estimulado (*Stimulated Reservoir Volume*) e inclusive, la capacidad de generar fracturas complejas en el reservorio [15].

Recientemente, con el objeto de reducir las pérdidas de carga durante la operación de FH, se ha comenzado a utilizar reductores de fricción en los fluidos de fractura. Los reductores de fricción son polímeros de alto peso molecular, generalmente polyacrilamidas de cadena larga (PAM), que modifican el comportamiento del fluido. Las moléculas del polímero interactúan con

los vórtices de turbulencia disipando energía y cambiando el régimen de turbulento a laminar [16]. Gracias a ese cambio de régimen, puede lograrse una reducción del 80% en las pérdidas por fricción [17]. Más recientemente, se han desarrollado reductores de fricción con los que se obtienen fluidos de mayor viscosidad, denominados HVFR (*High Viscosity Friction Reducers*). Debido a su mayor viscosidad, los fluidos HVFR poseen mayor capacidad de transporte de AS [17, 18].

Cada tipo de agente de sostén deberá ser bombeado junto con un fluido de fractura apropiado, no hay una regla general, pero por ejemplo, se ha demostrado que cuando se emplean fluidos de baja viscosidad el agente de sostén decanta rápidamente formando una duna en la parte inferior de la fractura [19]. En líneas generales, en las operaciones de campo, se suele bombear con fluidos de baja viscosidad a los agentes de sostén de menor densidad y menor tamaño de grano. En cambio, cuando se bombean agentes de sostén de mayor tamaño de grano y alta densidad suelen utilizarse fluidos de alta viscosidad.

### **Agente de sostén**

Existen varios tipos de agentes de sostén. Pueden ser de distintos materiales tales como arena, cerámica e incluso poliméricos. Los distintos tipos de agente de sostén deben reunir ciertas condiciones para que sean apropiados para su aplicación en EH, por ejemplo podemos mencionar:

- **Tamaño:** Para caracterizar los distintos tamaños de AS se utiliza el tamizado con mallas calibradas. Esta clasificación define al tamaño de las partículas según si las mismas son o no retenidas por mallas metálicas de distinto tamaño. Estas mallas se encuentran normalizadas y se especifican según la cantidad de orificios que presentan por cada pulgada cuadrada de superficie.
- **Esfericidad y redondez:** La esfericidad representa cuan similar es la partícula de AS a una esfera perfecta y la redondez la rugosidad superficial de la partícula respecto de una superficie lisa. Para la determinación de estas dos características se utiliza una escala visual de referencia sobre la cual se realiza una comparación visual.
- **Resistencia a la rotura:** Se evalúa el grado de formación de finos cuando el AS es sometido a un esfuerzo de compresión, dependiendo la magnitud del mismo del tipo y tamaño de AS.

- Conductividad: Se evalúa la capacidad que posee un empaquetamiento de AS para permitir el paso de un fluido. Esta propiedad se evalúa colocando AS dentro de un contenedor, sometiéndolo a un determinado confinamiento y luego aplicando un flujo a través del mismo.

Para la evaluación de las anteriores se siguen las prácticas recomendadas API RP 19C (propiedades geométricas y de resistencia del AS) [20] y API RP 19D [21] (permeabilidad).

### 1.1.3 Reservorios no convencionales en Argentina

Para comprender la importancia de los recursos no convencionales en la Argentina podemos remitirnos al informe de fuentes de hidrocarburos no convencionales elaborado por el departamento de energía de los Estados Unidos [22]. En dicho informe se presenta un revelamiento sobre las reservas de hidrocarburos no convencionales *shale gas* y *shale oil* llevada a cabo en 41 países. Dentro de este grupo de países se encuentra Argentina, en poder de la tercer reserva *shale gas* y la cuarta *shale oil* más importantes del mundo, detrás de potencias como Estados Unidos y Rusia. Debe notarse que los únicos países que se encuentran liderando ambos rankings (*shale gas* y *shale oil*) son Estados Unidos, China y Argentina.

Ahora, si observamos los niveles de producción de petróleo y gas en Argentina, vemos que la producción de petróleo ha disminuido sin cesar a partir de 1998 y la producción de gas a partir de 2004 (ver Fig. 1.7a). Por otro lado, la oferta interna (que es un reflejo de la demanda) no ha mostrado el mismo comportamiento, por el contrario, la misma se ha incrementado paulatinamente hasta el año 2008 donde se ha alcanzado una meseta (ver Fig. 1.7b). Si bien no se pretende realizar un análisis exhaustivo de la matriz energética de Argentina, a simple vista se detecta un incremento en la oferta interna (un reflejo de la demanda) y una disminución en la producción de gas y petróleo. Debe tenerse en cuenta que la oferta interna está compuesta por la producción nacional y las importaciones. En estas condiciones, resulta razonable que un país que cuenta con recursos no convencionales de importancia a nivel global oriente sus esfuerzos al desarrollo y explotación de los mismos en búsqueda de la soberanía en el abastecimiento energético.

Los datos de la Fig. 1.7a fueron tomados del Ministerio de Energía y Minería <sup>3</sup> y del Instituto Argentino del Petróleo y del Gas <sup>4</sup>. Los datos de la

<sup>3</sup>[www.argentina.gob.ar/energia/hidrocarburos/produccion-de-petroleo-y-gas](http://www.argentina.gob.ar/energia/hidrocarburos/produccion-de-petroleo-y-gas)

<sup>4</sup>[www.iapg.org.ar/web\\_iapg/sectores/estadisticas/productos/listados/listado\\_todos\\_los\\_productos.htm](http://www.iapg.org.ar/web_iapg/sectores/estadisticas/productos/listados/listado_todos_los_productos.htm)

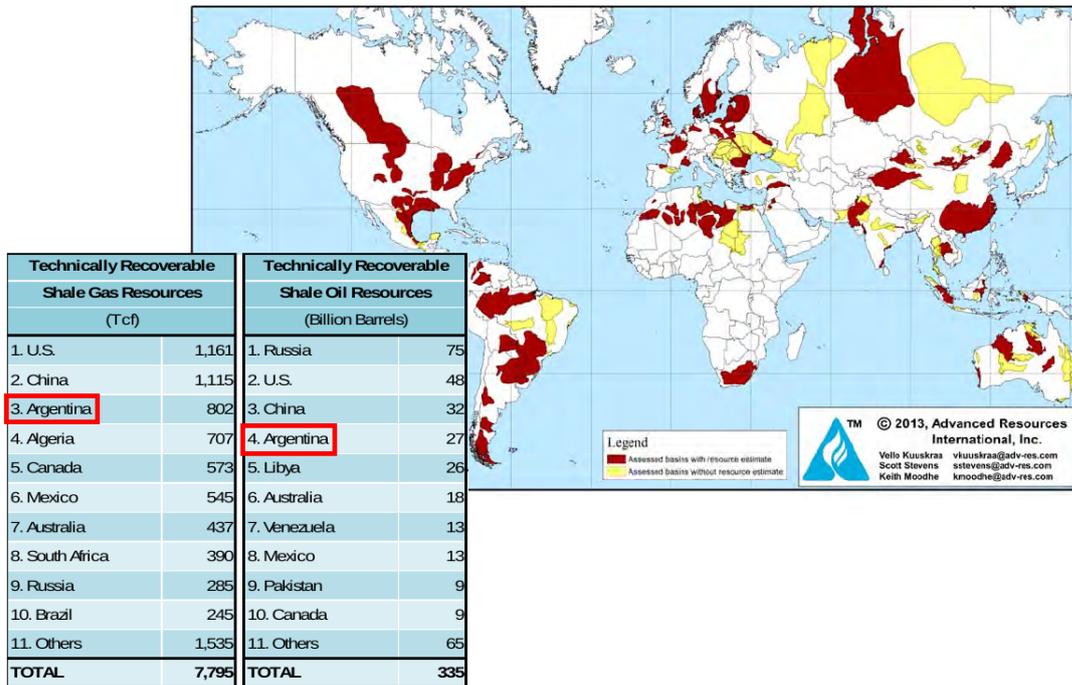
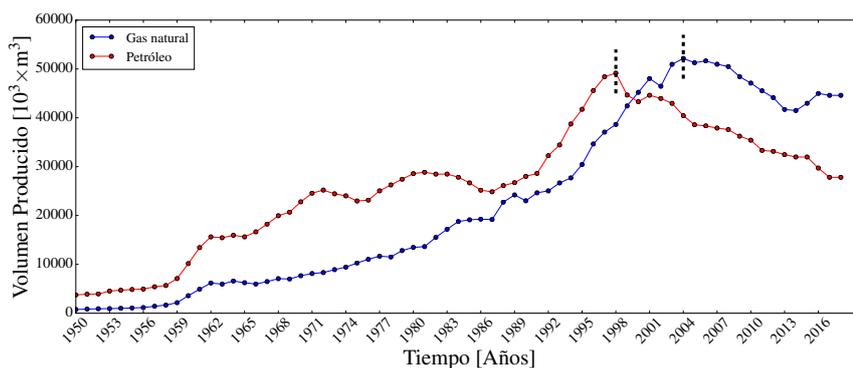
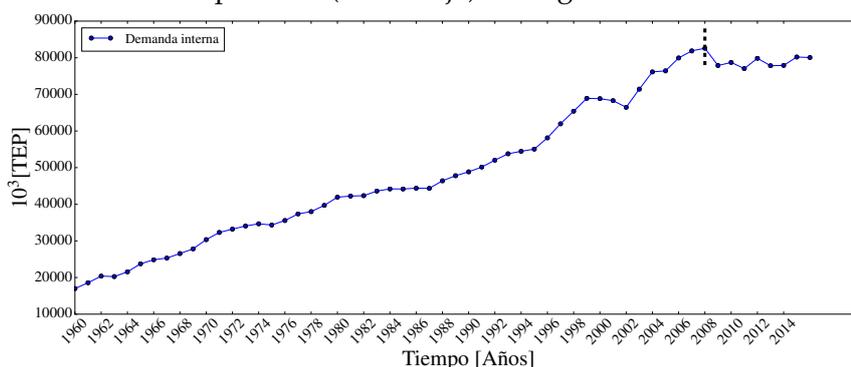


Figura 1.6: Mapa con las reservas no convencionales incluidas en el estudio, en rojo se muestran las cuencas evaluadas con estimación de recursos y en amarillo las evaluadas sin estimación de recursos. Tomado de [22]

Fig. 1.7b también fueron tomados del Ministerio de Energía y Minería.



(a) Evolución de la producción de gas natural (curva azul) y evolución de la producción de petróleo (curva roja) en Argentina en  $m^3$ .



(b) Evolución de la oferta interna medida en Toneladas Equivalentes de Petróleo (TEP)

Figura 1.7: Producción de gas natural y petróleo en Argentina y evolución de la oferta interna.

## 1.2 Estado del arte

Uno de los primeros estudios sobre transporte de agente fue realizado por Kern *et al.* [23]. Se trata de un trabajo experimental sobre una celda a escala en la cual se inyecta un fluido de baja viscosidad (*slickwater*) junto con arena (agente de sostén). Bajo dichas condiciones, el agente de sostén se sedimenta conformando una duna tal como puede verse en Fig. 1.8a. Ahora bien, si la tasa de bombeo es muy elevada, el agente de sostén puede ser completamente barrido de la celda. Sin embargo, a tasas de bombeo moderadas, las partículas de arena pueden depositarse en la celda y con el paso del tiempo la duna crece en altura. En consecuencia, el espacio libre entre la parte superior de la duna y el límite de la celda se ve reducido. En estas condiciones, si se mantiene constante el caudal de bombeo, resulta en un incremento en la velocidad del fluido de acuerdo al principio de continuidad. Este incremento en la velocidad, aumenta la capacidad de transporte del fluido y por consiguiente el agente de sostén es transportado hacia el interior de la celda y la

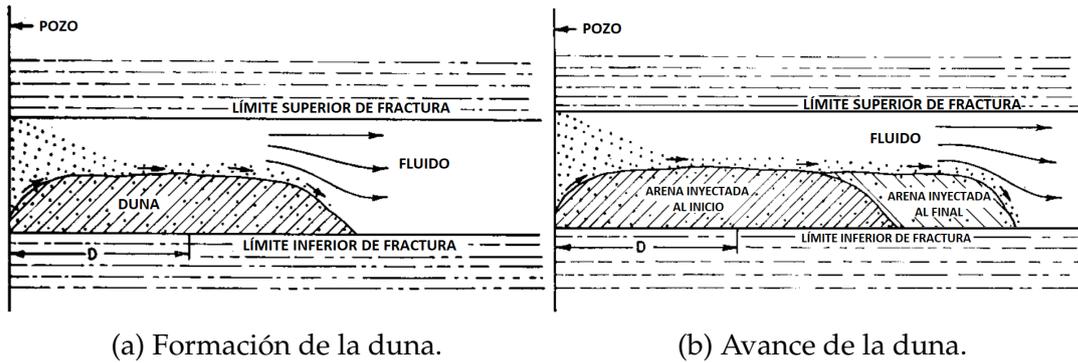


Figura 1.8: Representación esquemática del transporte de agente sostén en un modelo de celda plana. Tomado y adaptado de [23].

duna crece en ancho. En estas condiciones, el transporte de agente de sostén se encuentra dominado por los mecanismos de saltación (*saltation*) y arrastre (*creep*)<sup>5</sup> [19, 24]. Eventualmente este incremento en la altura de la duna llega a un punto de equilibrio, obteniéndose una *traction carpet* en la cual el agente de sostén es transportado en una sección pequeña en la parte superior de la duna [23, 25]. El resultado más relevante de este efecto, es que el agente de sostén inyectado en las últimas etapas sobrepasa la duna inicial y es transportado hacia el interior de la celda. Podemos ver un esquema de este efecto en la Fig. 1.8b. Más recientemente, otros autores han reportado resultados similares [25-28]. Sin embargo, Medlin y Zumwalt cuestionan el hecho de que tal vez este efecto de *traction carpet* nunca es alcanzado en operaciones de campo simplemente porque es muy difícil de generar un llenado tal de la fractura con agente de sostén a modo de reducir considerablemente el espacio libre y así incrementar la velocidad del fluido [29].

También se han utilizado simulaciones numéricas para intentar predecir el transporte de agente de sostén y determinar su distribución en las fracturas. El flujo de partículas en el seno de un fluido se considera como un flujo multifásico, una fase fluida correspondiente al fluido de transporte y otra

<sup>5</sup>Cuando una corriente de fluido se desplaza sobre una superficie de material granular a baja velocidad, el material suelto rueda aguas abajo, manteniéndose en contacto con la superficie. Este mecanismo se denomina arrastre (*creep*) y se caracteriza por una baja fuerza de interacción fluido-partícula solo suficiente para hacer rodar a las partículas sobre la superficie. Si se incrementa la velocidad de la corriente, la intensidad de la turbulencia puede suspender a las partículas de la superficie para que luego la corriente las transporte horizontalmente. Este mecanismo se conoce como saltación (*saltation*), dado que las partículas se desplazan describiendo pequeños saltos a lo largo de la superficie. Para velocidades de corriente aún mayores, la fuerza de interacción fluido-partícula es capaz de suspender por completo a las partículas y transportarlas junto con el fluido. Este mecanismo se conoce como transporte eólico (*aeolian*).

sólida correspondiente a las partículas. Básicamente hay dos grupos de métodos para resolver flujos multifásicos (fluido-partícula): los enfoques Euler-Euler y Euler-Lagrange. En los métodos del tipo Euler-Euler, tanto la fase fluida como la fase sólida son resueltas usando mallas Eulerianas, es decir grillas fijas sobre las cuales se describen las variables a determinar (velocidad, presión, etc.). Dos métodos populares son el *Two Fluid Model* (TFM) [30] y el *Concentration Model* (CM) [31]. El método TFM trata tanto a la fase sólida como a la fase fluida como dos fluidos interpenetrantes acoplados a través del intercambio de momento lineal. El mayor desafío de este tipo de enfoques es definir las propiedades constitutivas equivalentes para la fase sólida [32]. En el CM, el transporte de la fase sólida es descrito a través de un campo escalar (concentración). Por ejemplo, Dontsov y Peirce [33, 34] presentaron un modelo que incluye decantación por gravedad y polidispersidad, y obtuvieron una distribución de proppant en la fractura.

En términos generales, podemos decir que los enfoques del tipo Euler-Euler requieren recursos computacionales menores debido al hecho de que las partículas son tratadas como una fase continua de forma promediada, y los detalles de la interacción partícula-partícula son ignorados. En los flujos tipo *slurry* (flujos con alta concentración volumétrica de partículas, tipo lodo) las interacciones partícula-partícula se vuelven importantes, con lo cual una descripción a nivel micromecánico es valiosa.

En los esquemas del tipo Euler-Lagrange la fase fluida es resuelta en una grilla Euleriana mientras que la fase sólida es resuelta en un sistema Lagrangiano, resolviendo las ecuaciones de Newton para cada partícula sólida. Debido a que se trata cada partícula individualmente, los esquemas Euler-Lagrange proveen información muy detallada. Dos métodos populares para simulaciones de gran escala son el MP-PIC (*Multi Phase-Particle in Cell*) [35] y el CFD-DEM (*Computational Fluid Dynamic-Discrete Element Method*) [32, 36, 37]. Patankar y Joseph introdujeron el método MP-PIC para modelar sedimentación y fluidización [38]. Fueron capaces de replicar resultados experimentales, sin embargo los autores mencionan que para flujos con alta concentración de partículas, la fase sólida debe resolverse mediante DEM. Luego Tsai *et al.* [39] empleó el método MP-PIC para investigar el transporte de AS en una fractura hidráulica de dimensiones de campo. Demostraron que el transporte y deposición de AS es fuertemente afectado por la densidad y tamaño de las partículas, y por los caudales de inyección.

En años recientes, el método CFD-DEM ha ganado popularidad para modelar transporte de agente de sostén debido principalmente a que además de

obtener la posición y velocidad de cada partícula, se captura con gran detalle las fuerzas de interacción entre partículas [36]. Sin embargo, como se requieren mayores recursos computacionales, generalmente se modelan sistemas de pequeña escala. Zhang *et al.* [40] empleó este método para modelar la distribución de agente de sostén en fracturas verticales, ellos encontraron que las partículas grandes de AS tienden a depositarse rápidamente cerca del pozo mientras que las partículas de AS más livianas pueden ser transportadas una distancia mayor hacia el interior de la fractura. Si el agente de sostén es inyectado con una tasa de bombeo baja, se deposita cerca del pozo y la distancia de transporte es pequeña. También obtuvieron dunas más suaves al mover el punto de inyección desde una posición baja a una posición más alta respecto a la base inferior de la fractura vertical.

Zhang *et al.* modelaron la micromecánica del transporte de AS en fracturas hidráulicas [41]. Encontraron que la forma de la duna puede ser considerablemente afectada si se utiliza en las partículas una rigidez muy baja, esto es debido a que en tales condiciones la fuerza tangencial admisible es consecuentemente baja. El coeficiente de fricción partícula-partícula también tiene un efecto considerable en la forma de la duna y el ángulo de reposo. Un coeficiente de fricción partícula-partícula bajo produce una duna secundaria generada por la avalancha de partículas.

Tomac y Gutierrez [42] también estudiaron la micromecánica del transporte de agente de sostén en una fractura hidráulica estrecha, incluyendo un modelo de lubricación para reproducir problemas tales como la formación de empaquetamientos y el atascamiento de agente de sostén. Encontraron que una alta concentración de partículas da lugar a interacciones partícula-partícula más frecuentes, y como consecuencia, el efecto de lubricación se vuelve importante generando un incremento en la aglomeración de partículas. Este efecto es aún más pronunciado en fluidos de alta viscosidad y en condiciones de bajo arrastre sobre las partículas. Tomac y Gutierrez [42] también mostraron que estas aglomeraciones dificultan la predicción del transporte en función de la caída de presión a lo largo del canal para altas concentraciones de partículas.

En otro trabajo Zhang *et al.* [9] analizaron el transporte de una distribución de tamaños de AS en pozos verticales. Explicaron cómo las tres etapas de transporte de AS se desarrollan, la primera (formación de la duna) está gobernada por decantación y arrastre de fluido, la segunda (desarrollo de la duna) gobernada por fluidización y la tercera (formación del banco) gobernada por la erosión debido a la alta velocidad de la *traction carpet*.

Blyton *et al.* [43] usaron el método CFD-DEM para ajustar un software comercial de fracturamiento hidráulico en tres dimensiones a través de correlaciones. Encontraron que la velocidad promedio del AS es generalmente menor que la de la fase fluida y que la velocidad de decantación del AS puede ser mayor o menor que la velocidad predicha por la ley de Stokes, con una dependencia adicional de la relación entre el diámetro de AS y el ancho de la celda, la concentración de AS y el número de Reynolds. Si se aplica una técnica de *upscaling*<sup>6</sup>, el método CFD-DEM puede ser también aplicado para modelar fracturas de escala real, tal como puede verse en el trabajo de Zeng *et al.* [44]. El efecto de *traction carpet*, inicialmente descrito por Kern [23], fue observado a través de simulaciones CFD-DEM por varios autores [9, 40, 41, 44].

### 1.3 Alcances y objetivos

En el presente trabajo de tesis vamos a considerar el proceso de transporte de agente sostén modelando una fractura plana vertical y su llenado por un fluido Newtoniano que transporta partículas esféricas. La mayoría de los estudios de este tipo consideran la inyección de AS a través de un solo punto de inyección en uno de los lados de la celda empleada para modelar la fractura [40, 41], o alternativamente, utilizan una inyección homogénea a lo largo de la altura de la celda del lado del pozo [9, 44]. Nosotros inyectamos fluido en cuatro puntos de inyección que ubicamos en tres alturas diferentes para tratar de emular cuatro *clusters* de inyección en un pozo vertical, y el efecto que tiene sobre la duna, el posicionamiento de dichos *clusters*. Medimos el efecto sobre la duna, observando el perfil de la misma para las tres alturas distintas de inyección. Nos enfocamos en las etapas iniciales del proceso de estimulación, cuando una duna considerable se forma luego de un corto período de bombeo, pero antes de que el efecto de *traction carpet* se manifieste. La fase inicial del proceso de inyección es un aspecto importante de todo el proceso de estimulación. En particular, la inyección inicial es considerada crítica para estimular las zonas más alejadas de la fractura. Nuevas tecnologías se encuentran basadas en el flujo esperado durante esta etapa. Un ejemplo es el uso de mallas de AS de baja densidad con el objeto de mejorar el transporte inicial, antes de que se haya verificado una decantación significativa y que tenga lugar el efecto de *traction carpet*. Otro ejemplo lo conforma el uso de

---

<sup>6</sup>En este marco *upscaling* hace referencia a un proceso mediante el cual se extrapola el valor de una variable desde una escala menor a una escala mayor.

mallas de AS muy finas (entre 140 y 400), conocidos como microproppants, los cuales tienen gran capacidad de transporte y además la posibilidad de ingresar en fracturas de menor apertura. Mostramos que el posicionamiento de los *clusters* de inyección tiene un impacto en la duna formada durante la etapa inicial, la cual modifica el patrón de flujo y afecta consecuentemente la ubicación final del AS.

También consideramos la distribución de AS cuando dos materiales distintos son bombeados dentro de la fractura. Partículas de diferente densidad son inyectados en distintos órdenes. La posición y forma final de la duna y el grado de mezcla, son muy sensibles a la estrategia de inyección (ya sea modificando la posición de los *clusters* de inyección como así también el orden de inyección de cada AS). Medimos el grado de mezcla cuantitativamente usando el concepto de entropía de mezcla [45]. Esta herramienta permite un análisis más detallado en sistemas mezclados de lo que comúnmente se utiliza en estudios de transporte de AS.

Vale la pena mencionar que en la celda de simulación empleada para modelar la fractura plana, los puntos de inyección y los caudales han sido escalados tomando una fractura de campo como referencia [46]. Debido a este escalado, los caudales requeridos en el modelo son considerablemente mayores a los caudales empleados en estudios de otros autores. Esto permitiría una extrapolación relativamente realista de los resultados a escalas de campo, usualmente muy difícil de llevar a cabo con resultados de trabajos previos en el área.

## 1.4 Estructura de la tesis

En el Cap. 2 se detalla el marco teórico correspondiente a la simulación numérica bajo el método CFD-DEM. Se describe brevemente las técnicas tradicionales de CFD, DEM y su acople, detallando los distintos modelos de interacción para las fuerzas fluido-partícula.

En el Cap. 3 se presentan validaciones realizadas sobre el esquema CFD-DEM replicando problemas que tienen solución analítica y/o se cuenta con mediciones experimentales. También replicamos resultados de otros autores que usan el esquema CFD-DEM presentes en la bibliografía con el fin de verificar la confiabilidad de las herramientas numéricas utilizadas.

En el Cap. 4 se presenta el modelo numérico utilizado para modelar el transporte de agente sostén, se detalla la geometría de estudio y el escalado realizado para la definición de los parámetros de simulación.

En el Cap. 5 se presentan los resultados obtenidos sobre el transporte de agente de sostén en una celda plana, se estudia el efecto de la inyección de mezclas, el efecto de la posición de los punzados y el efecto de la velocidad de inyección. Algunos de los resultados de este capítulo han sido publicados en [47].

En el Cap. 6 se presentan las conclusiones y se listan los posibles trabajos futuros, algunos de los cuales se encuentran actualmente en desarrollo y otros que se plantean como posibles líneas futuras.

## Capítulo 2

# Marco teórico

### 2.1 Simulación numérica

De forma general podemos decir que las técnicas de simulación numérica tienen por objeto resolver las ecuaciones de gobierno de un modelo físico. Dicho modelo debe ser capaz de reproducir el fenómeno que se está estudiando. El conjunto de ecuaciones, hipótesis y simplificaciones que conforman al modelo físico debe ser expresado en términos de un modelo numérico que sea capaz de representar al modelo físico.

En nuestro caso en particular, el problema que se pretende resolver es el de flujo de partículas en el seno de un fluido. Sobre dicho problema se elabora un modelo físico que considera al fluido como un fluido newtoniano, que se encuentra en un régimen turbulento y por tanto deben considerarse los efectos de la turbulencia. En el seno de dicho fluido, se desplazan partículas que consideraremos como esféricas y que interactúan con el fluido a través de fuerzas hidrodinámicas. Los detalles de este modelo físico, junto con las técnicas numéricas empleadas serán descritos en las siguientes secciones.

### 2.2 Fluidodinámica Computacional – CFD

#### 2.2.1 Ecuaciones de Gobierno

La mecánica de los fluidos se enmarca dentro de la mecánica del continuo y para el desarrollo de la misma se plantean dos hipótesis fundamentales: la hipótesis del continuo y el concepto de partícula fluida. La primera implica considerar al fluido como un medio continuo a lo largo del dominio sin considerar la estructura molecular del mismo. Bajo la hipótesis del continuo, las propiedades del fluido son continuas en todo el dominio. La segunda hipótesis define a una partícula fluida como la porción elemental de fluido que se encuentra en un punto del espacio, porción lo suficientemente grande como

para despreciar la escala molecular y lo suficientemente pequeña como para considerar que el fluido que contiene es homogéneo. Utilizando estas dos hipótesis se plantea el cumplimiento de los principios básicos de conservación.

Las ecuaciones de gobierno de la dinámica de fluidos responden a los principios de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía. A dichas ecuaciones se las conoce como ecuaciones de Navier–Stokes (N–S). Asumiremos que el fluido es incompresible, lo cual conforma una aproximación razonable dada la baja compresibilidad de los fluidos con los que trataremos en esta tesis. Consecuentemente, la densidad del fluido  $\rho_f$  es constante y por ende puede extraerse de los operadores diferenciales en los cuales aparezca. Además, se considerará un flujo isotérmico, por lo que no será necesario plantear la conservación de la energía. En estas condiciones, solo se referirá a la conservación de la masa y de la cantidad de movimiento [48-50]. En dichas condiciones las ecuaciones de N–S toman la forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p, \quad (2.2)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \nu \left[ \nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T \right], \quad (2.3)$$

siendo  $\mathbf{U}$  la velocidad del fluido,  $\boldsymbol{\tau}$  el tensor de estrés viscoso<sup>1</sup>,  $p$  la presión del fluido y  $\nu$  la viscosidad cinemática del fluido.  $\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}$  es el producto tensorial  $\mathbf{U}$  por si mismo, que resulta en un tensor de segundo orden<sup>2</sup>.  $\boldsymbol{\tau}$  también, es un tensor de segundo orden, y por ende  $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$  y  $\nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U})$  resultan en una magnitud vectorial (ver ec. (2.2)).<sup>3</sup> La ec. (2.1) corresponde al principio de conservación de la masa, y ec. (2.2) corresponde al principio de la conservación de la cantidad de movimiento, juntas conforman las ecuaciones de N–S para un fluido incompresible.

<sup>1</sup> Si bien en español a  $\boldsymbol{\tau}$  se lo denomina normalmente tensor de tensión, aquí adoptamos el término tensor de estrés viscoso dado que es afín a la bibliografía en inglés.

<sup>2</sup> Sean  $\mathbf{a} = a_1\mathbf{i} + a_2\mathbf{j} + a_3\mathbf{k}$  y  $\mathbf{b} = b_1\mathbf{i} + b_2\mathbf{j} + b_3\mathbf{k}$  dos vectores, el producto tensorial o diádico  $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$  resulta en un tensor  $\mathbf{T} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1b_1 & a_1b_2 & a_1b_3 \\ a_2b_1 & a_2b_2 & a_2b_3 \\ a_3b_1 & a_3b_2 & a_3b_3 \end{bmatrix}$ .

<sup>3</sup> Sea  $\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix}$  un tensor de segundo orden y  $\mathbf{b} = b_1\mathbf{i} + b_2\mathbf{j} + b_3\mathbf{k}$  un vector, entonces  $\nabla \cdot \mathbf{T} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} T_{ji} \mathbf{e}_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{13}}{\partial x_3} \\ \frac{\partial T_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{23}}{\partial x_3} \\ \frac{\partial T_{31}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{32}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{33}}{\partial x_3} \end{bmatrix} = \mathbf{b}$ .

Si nos detenemos en la definición de  $\boldsymbol{\tau}$  presente en la ec. (2.3), podemos ver:

$$\boldsymbol{\tau} = \nu \left[ \nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T \right] = \nu \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (2.4)$$

siendo  $u_i$  las componentes del vector velocidad  $\mathbf{U}$  en un sistema cartesiano  $x_i$ , con  $i = 1, 2, 3$ . Normalmente se adopta la convención:  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$  y  $x_3 = z$ . Expandiendo la ec. (2.4) obtenemos las componentes del tensor de estrés viscoso

$$\boldsymbol{\tau} = \nu \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2\frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} & 2\frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

donde  $x$ ,  $y$  y  $z$  son las coordenadas cartesianas y  $u$ ,  $v$  y  $w$  las componentes de la velocidad  $\mathbf{U}$ . Debemos observar que en las expresiones anteriores para el tensor de estrés  $\boldsymbol{\tau}$  hemos empleado la viscosidad cinemática  $\nu$ , cuando normalmente se utiliza la viscosidad dinámica  $\mu$  estando las mismas vinculadas a través de la relación  $\nu = \mu/\rho_f$ . Esto es así debido a que en la ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento para un flujo incompresible, se dividen todos los términos por  $\rho_f$  al ser la misma constante. Pero la definición formal de tensor de estrés viscoso para un fluido newtoniano es  $\boldsymbol{\tau} = \mu \left[ \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{U}) \delta_{ij} \right]$ , donde  $\lambda$  es el segundo coeficiente de viscosidad y  $\delta_{ij}$  es la delta de Kronecker [51]. Normalmente, para fluidos compresibles, se adopta la hipótesis de Stokes, que propone la relación  $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$  [52, 53]. Por lo tanto, el tensor de estrés puede escribirse como  $\boldsymbol{\tau} = \mu \left[ \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \delta_{ij} \right]$ . En cambio, para fluidos incompresibles,  $\lambda$  suele despreciarse dado que  $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ . Por lo tanto, el tensor de estrés toma la forma  $\boldsymbol{\tau} = \mu \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$  [54].

La turbulencia se desarrolla como una inestabilidad sobre flujos laminares a partir de un número de Reynolds crítico. De acuerdo a la teoría de cascada de Kolmogorov [48, 55], la turbulencia se compone por vórtices de distinto tamaño, cada uno asociado a cierta cantidad de energía que depende de la dimensión de los mismos. Los vórtices de mayor tamaño se rompen transfiriendo su energía a vórtices más pequeños, los cuales en un proceso similar transfieren su energía a otros vórtices aún más pequeños. En los vórtices más pequeños la viscosidad termina disipando la energía en forma de calor. Siguiendo el concepto de cascada de Kolmogorov, la resolución directa de las

ecuaciones de N-S requerirá de resoluciones espaciales y temporales altas a fin de capturar las escalas del problema [55]. Este enfoque se denomina DNS (*Direct Numerical Simulation*) y por su costo computacional elevado no puede aplicarse en problemas industriales. En su lugar se adopta un enfoque en el cual los efectos de la turbulencia son incluidos mediante aproximaciones. El enfoque más popular para tratar la turbulencia en problemas industriales, consiste en resolver las ecuaciones RANS (*Reynolds Averaged Navier–Stokes*). La idea central del método es descomponer las variables de flujo en una componente media y sobre la cual actúa una fluctuación [48, 55]. Sea  $\phi(\mathbf{x}, t)$  una variable de flujo dependiente de la posición  $\mathbf{x}$  y del tiempo  $t$ , entonces podemos descomponerla en una contribución promedio  $\bar{\phi}(\mathbf{x}, t)$  y una fluctuación  $\phi'(\mathbf{x}, t)$  (ver Fig. 2.1)

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t), \quad (2.6)$$

donde la contribución media se determina como

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \phi(\mathbf{x}, t) dt, \quad (2.7)$$

siendo  $T$  un período de tiempo sobre el cual se producen un número importante de fluctuaciones.

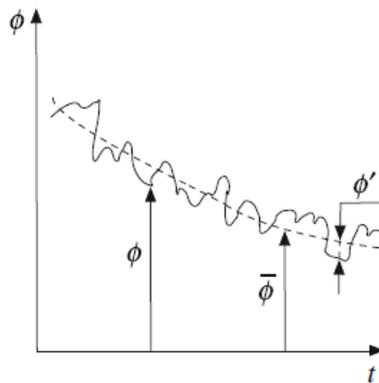


Figura 2.1: Componente media  $\bar{\phi}(\mathbf{x}, t)$  y fluctuación  $\phi'(\mathbf{x}, t)$  de la variable de flujo  $\phi(\mathbf{x}, t)$ . Tomado de [55].

Aplicando la descomposición de Reynolds sobre  $\mathbf{U}$  y  $p$  obtenemos

$$\mathbf{U} = \bar{\mathbf{U}}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{U}'(\mathbf{x}, t) = \bar{\mathbf{U}} + \mathbf{U}', \quad (2.8)$$

$$p = \bar{p}(\mathbf{x}, t) + p'(\mathbf{x}, t) = \bar{p} + p'. \quad (2.9)$$

Luego, utilizando ciertas propiedades del promediado [48, 55],<sup>4</sup> las ecuaciones de N-S toman la forma de las ecuaciones RANS (*Reynolds Averaged Navier–Stokes*).

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}} = 0, \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{U}} \otimes \bar{\mathbf{U}}) - \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}^V - \nabla \cdot (\overline{\mathbf{U}' \otimes \mathbf{U}'}) = -\frac{1}{\rho_f} \nabla \bar{p}, \quad (2.11)$$

siendo  $\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}^V$  el tensor de estrés viscoso debido a la velocidad promedio  $\bar{\mathbf{U}}$  y  $-\overline{\mathbf{U}' \otimes \mathbf{U}'}$  el tensor de estrés de Reynolds ( $\boldsymbol{\tau}^R$ ).<sup>5</sup>

$$\boldsymbol{\tau}^R = -\overline{\mathbf{U}' \otimes \mathbf{U}'} = - \begin{bmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{v'u'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{w'u'} & \overline{w'v'} & \overline{w'w'} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

La determinación de las seis componentes de  $\boldsymbol{\tau}^R$  (ver Ec. (2.12)), se conoce como problema de cierre [48]. Normalmente se adopta un modelo para expresar a dichas componentes del tensor de Reynolds en función de las variables de flujo promedio. Para ello se usa la relación de Boussinesq que por analogía con los fluidos Newtonianos establece la siguiente relación lineal [48, 56]:

$$\boldsymbol{\tau}^R = -\overline{\mathbf{U}' \otimes \mathbf{U}'} = \nu_t \left[ \nabla \bar{\mathbf{U}} + (\nabla \bar{\mathbf{U}})^T \right] - \frac{2}{3} k \mathbf{I}, \quad (2.13)$$

donde  $k = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{U}' \cdot \mathbf{U}'}$  es la energía cinética turbulenta, e  $\mathbf{I}$  es la matriz identidad. Al adoptar la relación de Boussinesq se introduce el concepto de viscosidad

<sup>4</sup>El promediado según la Ec. 2.7 goza de las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} \overline{\phi'} &= 0 \\ \overline{\bar{\phi}} &= \bar{\phi} \\ \overline{\nabla \phi} &= \nabla \bar{\phi} \\ \overline{\phi + \bar{\phi}} &= \bar{\phi} + \bar{\phi} \\ \overline{\bar{\phi} \phi} &= \bar{\phi} \bar{\phi} = \bar{\phi} \bar{\phi} \\ \overline{\bar{\phi} \phi'} &= \bar{\phi} \bar{\phi}' = 0 \\ \overline{\phi \bar{\phi}} &= \bar{\phi} \bar{\phi} + \overline{\phi' \bar{\phi}'} \end{aligned}$$

<sup>5</sup>En la bibliografía se suele definir al tensor de estrés de Reynolds como  $\boldsymbol{\tau}^R = -\rho \overline{\mathbf{U}' \otimes \mathbf{U}'}$ , pero cuando se trabaja con un fluidos incompresibles se suelen adoptar  $\boldsymbol{\tau}^R = -\overline{\mathbf{U}' \otimes \mathbf{U}'}$  dado que se toma el cociente de la conservación de la cantidad de movimiento sobre  $\rho$  (ver Ec. 2.2).

turbulenta ( $\nu_t$ ) para tener en cuenta el efecto disipativo de la turbulencia. Debemos mencionar que, a pesar de su uso difundido en el modelado de problemas industriales, la gran mayoría de los modelos consideran a la turbulencia como un fenómeno isotrópico. Esto no es correcto ya que la turbulencia es un fenómeno intrínsecamente tridimensional y por tal motivo estos modelos no son capaces de detectar flujos secundarios producidos por diferencias en las componentes normales del estrés [48-50].

Finalmente las ecuaciones de N-S toman la forma:

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}} = 0, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{U}} \otimes \bar{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^R - \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}^V = -\frac{1}{\rho_f} \nabla \bar{p}. \quad (2.15)$$

Si bien, hay muchos modelos disponibles para determinar la viscosidad turbulenta  $\nu_t$ . Normalmente se distinguen dos grandes grupos: los modelos de una ecuación (*one equation models*) y los modelos de dos ecuaciones (*two equation models*) [48]. Un modelo muy difundido en problemas industriales es el  $k - \epsilon$  que expresa a  $\nu_t$  en función de la energía cinética turbulenta  $k$  y su tasa de disipación  $\epsilon$  y que agrega dos ecuaciones de transporte, una para  $k$  y otra para  $\epsilon$ , para modelar la turbulencia [56]. Estas ecuaciones de transporte se suman a las conservación de la masa y de la cantidad de movimiento.

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (2.16)$$

$$\epsilon = -2\nu \overline{\mathbf{s}' : \mathbf{s}'}, \quad (2.17)$$

donde  $\overline{\mathbf{s}' : \mathbf{s}'}$  es el doble producto interno<sup>6</sup> del tensor de tasas de deformación de las fluctuaciones  $\mathbf{s}'$  definido como  $s'_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)$  [48].

Luego  $\nu_t$  es utilizada para determinar las componentes del tensor de estrés de Reynolds y resolver las ecuaciones RANS. En el presente trabajo adoptamos el modelo  $k - \epsilon$  debido a que es un modelo robusto y muy difundido en aplicaciones industriales. Además, el foco de este estudio no es modelar en gran detalle el fluido en sí, sino modelar el transporte del agente

<sup>6</sup>El doble producto interno entre dos tensores  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  resulta en un escalar  $\phi$  y está dado por  $\phi = \mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{11}B_{11} + A_{12}B_{12} + A_{13}B_{13} + \dots = A_{ij}B_{ij}$ .

de sostén dentro de un esquema de interacción fluido–partícula. Las ecuaciones de transporte para  $k$  y  $\epsilon$  son:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{U}}k) - \nabla \cdot \frac{\nu_t}{\sigma_k} \nabla k = P_k - \epsilon, \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{U}}\epsilon) - \nabla \cdot \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon = C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k}, \quad (2.19)$$

$$P_k = 2\nu_t |\nabla \bar{\mathbf{U}}|^2. \quad (2.20)$$

Los coeficientes del modelo  $C_{1\epsilon}$ ,  $C_{2\epsilon}$ ,  $\sigma_k$  y  $\sigma_\epsilon$  han sido determinados empíricamente para ajustarse a un amplio rango de aplicaciones, no siendo necesario su ajuste para casos generales [48, 57].

Las variables  $k$  y  $\epsilon$  se suman a las variables originales del problema, por lo que deberán definirse condiciones iniciales y de contorno, al igual que con las demás variables fluidodinámicas. Normalmente los valores iniciales para  $k$  y  $\epsilon$  se obtienen en función de la velocidad, una longitud de referencia y una determinada intensidad de turbulencia  $I_T$  [58]. Las expresiones utilizadas son:

$$k = \frac{3}{2} (UI_T)^2, \quad (2.21)$$

$$\epsilon = C_\mu^{\frac{3}{4}} \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l}, \quad (2.22)$$

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (2.23)$$

siendo  $U$  la velocidad de la corriente,  $C_\mu = 0,09$  y  $l$  la escala de la turbulencia (*turbulent length scale*) [48, 57]. Esta última puede estimarse mediante el diámetro hidráulico  $d_h$  y la relación  $l = 0,07d_h$ . El diámetro hidráulico depende del área transversal  $A_c$  y el perímetro  $P_c$  mojados por el fluido  $d_h = \frac{4A_c}{P_c}$ . Para nuestras simulaciones consideramos  $I_T = 5\%$ , lo cual representa un grado medio de turbulencia.

Otro aspecto importante a la hora de realizar simulaciones CFD es el tratamiento del efecto de las paredes. La capa límite de un fluido en movimiento, es la zona perturbada debido a la presencia de un sólido que se encuentra en contacto con el fluido. Se define como aquella zona contigua a una pared en la cual la velocidad del fluido varía desde cero hasta un 99% de la velocidad de corriente libre. La velocidad libre se define como la velocidad promedio esperada de un perfil de velocidad. Dentro de la capa límite se distinguen tres regiones, desde la pared hacia el fluido encontramos primero la subcapa viscosa (*viscous sublayer*) [48], luego la zona de transición (*buffer*) y

por último la región logarítmica. En la Fig. 2.2 podemos ver un esquema en el cual se representan estas tres regiones, las mismas se encuentran discriminadas en función el valor de la distancia adimensional hacia la pared  $y^+$  definida como:

$$y^+ = \frac{u_\tau}{\nu} y_{c1}, \quad (2.24)$$

donde  $y_{c1}$  es la distancia a la pared y  $u_\tau$  es la velocidad de fricción, la cual depende de la tensión tangencial en la pared  $u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_f}}$  [48]. La tensión en la pared está dado por:

$$\tau_w = \mu \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0}, \quad (2.25)$$

siendo  $u$  la velocidad del fluido paralela a la superficie y  $y$  la distancia a la pared, por lo que  $\left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0}$  es el gradiente de velocidad evaluado en la pared. Ahora bien en virtud del valor de  $y^+$  se distinguen dos zonas en las cuales el valor de la velocidad en la dirección paralela a la superficie sigue dos tendencias distintas. Para ello se normaliza esta velocidad con la velocidad de fricción  $u^+ = \frac{u}{u_\tau}$

$$u^+ = \begin{cases} y^+ & y^+ < 5 \\ \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + B^+ & y^+ > 30 \end{cases}, \quad (2.26)$$

siendo  $\kappa^7$  y  $B^+$  dos constantes. Para  $5 < y^+ < 30$  (zona de transición) no hay una ley definida (ver Fig. 2.2).

Durante el proceso de simulación numérica se hace uso de estas relaciones analíticas para calcular la velocidad entre la pared y el centro de la celda adyacente a dicha pared, de forma que se elimina la necesidad de tener un número elevado de celdas pequeñas en la cercanía de las paredes. Sin embargo, el tamaño de la celda adyacente a la paredes debe ser cuidadosamente elegido para que el mismo no caiga dentro de la zona de transición entre la subcapa viscosa y la región logarítmica. Cuando se usan funciones de pared logarítmicas, el valor de  $y^+$  debe ser mantenido típicamente entre 150 y 300. Valores de  $y^+$  en la zona de transición, o sea  $5 < y^+ < 30$ , deben ser evitados debido a que no existe una relación analítica para esta zona. Debemos tener en cuenta que el valor de  $y^+$  no puede ser calculado a priori, sino que debe calcularse durante o después de la simulación. Con lo cual es de esperar

<sup>7</sup>A  $\kappa$  se la conoce como constante de Von Karman.

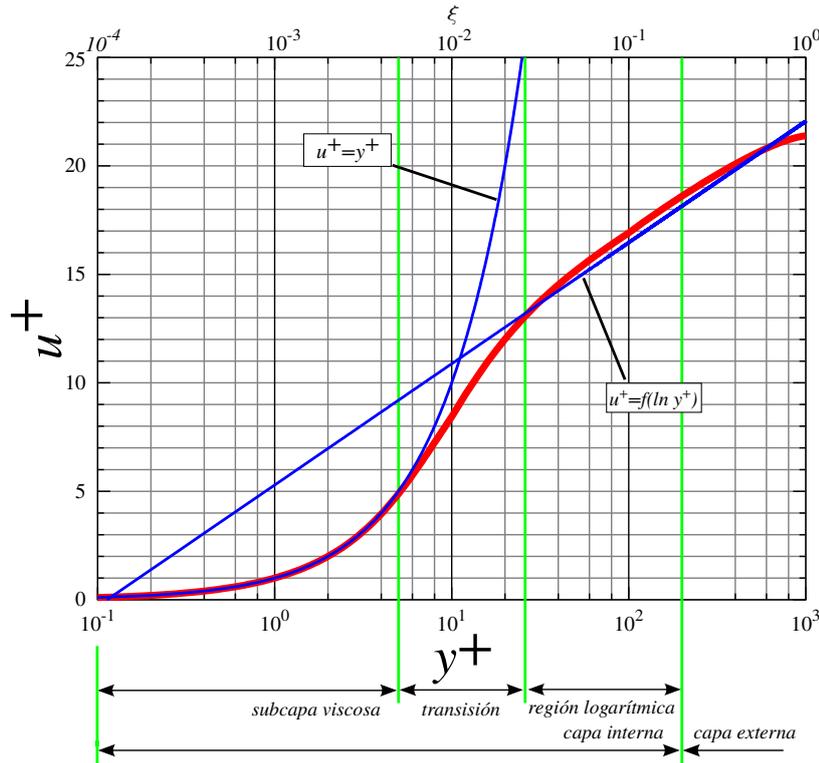


Figura 2.2: Velocidad de un fluido junto a una pared en función de la distancia adimensional (curva roja), las líneas de tendencia azules dividen los tres regímenes: subcapa viscosa, transición y región logarítmica. Tomada y adaptada de wikipedia [https://en.wikipedia.org/wiki/Law\\_of\\_the\\_wall](https://en.wikipedia.org/wiki/Law_of_the_wall).

un procesos iterativo hasta encontrar una malla que produzca el valor apropiado de  $y^+$ . En el caso de códigos de simulación fluidodinámica tales como de OpenFOAM<sup>8</sup> y Ansys Fluent, no se emplea la distancia adimensional  $y^+$  cuando se realizan simulaciones RANS. En su lugar se emplea un parámetro equivalente  $y^*$ , basado en la energía cinética turbulenta  $a$ , través de la siguiente expresión [59]:

$$y^* = \frac{C_\mu^{0,25} k^{0,5} y_{c1}}{\nu}. \quad (2.27)$$

En este caso,  $y^*$  debe ser utilizado de la misma forma que  $y^+$ . Para simulaciones siguiendo el modelo LES (*Large Eddy Simulations*), OpenFOAM utiliza la definición convencional de  $y^+$ .

<sup>8</sup><https://openfoam.org/>

### 2.2.2 Método de los Volúmenes Finitos

El método de los volúmenes finitos (FVM) es una técnica destinada a la resolución numérica de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, aplicada mayormente a problemas de fluidodinámica, aunque también en años recientes se lo ha aplicado a problemas de mecánica del sólido [60-62]. Al igual que otros métodos numéricos, la idea general es transformar un sistema de ecuaciones diferenciales (generalmente en derivadas parciales, acopladas y no-lineales) en un sistema de ecuaciones algebraicas. La solución de dicho sistema algebraico se corresponderá con la solución del sistema original en un número finito de puntos del dominio [56]. El FVM fue desarrollado entre otros por Patankar [63] y se fundamenta en aplicar la forma integral de los principios de conservación sobre pequeños sub-volúmenes (denominados volúmenes de control VC) que sumados conforman el dominio completo del problema. Hay numerosas referencias donde se desarrolla el método [48-50, 56], sin embargo a continuación daremos los lineamientos generales.

Consideremos inicialmente una propiedad escalar genérica de un fluido  $\phi$  (tal como temperatura, concentración de una especie química, etc.) y expresemos el principio de conservación en forma diferencial de dicho escalar:

$$\frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \phi \mathbf{U}) = \nabla \cdot (v \nabla \phi) + S_\phi, \quad (2.28)$$

donde  $\frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t}$  representa la tasa de cambio de  $\phi$  en el tiempo,  $\nabla \cdot (\rho_f \phi \mathbf{U})$  es el término convectivo (siendo  $\mathbf{U}$  la velocidad del fluido),  $\nabla \cdot (v \nabla \phi)$  es el término difusivo ( $v$  es el coeficiente de difusión),  $\rho_f$  es la densidad y  $S_\phi$  es un término fuente. Debemos notar que en la ec. 2.28 se ha adoptado  $v$  para el coeficiente de difusión de la magnitud escalar genérica  $\phi$ , cuando el mismo ya se ha utilizado previamente para la viscosidad cinemática. Esto se ha hecho dado que en la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (ver ec. 2.2 y 2.3),  $\nu$  está presente en el término que corresponde a la difusión de la cantidad de movimiento.

Si ahora tomamos una región  $\Omega$  en  $\mathbb{R}^3$  que permanece constante en el tiempo y cuya frontera es  $\Gamma$  (ver Fig. 2.3), podemos expresar la conservación de  $\phi$  en la región  $\Omega$  a través de la forma integral del principio de conservación.

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t} dV + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho_f \phi \mathbf{U}) dV = \int_{\Omega} \nabla \cdot (v \nabla \phi) dV + \int_{\Omega} S_\phi dV. \quad (2.29)$$

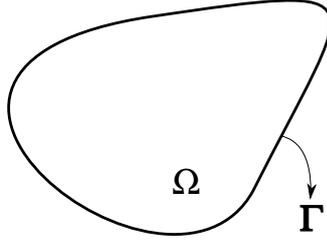


Figura 2.3: Volumen de control Ω y frontera Γ.

Aplicando el teorema de Gauss en la ec. (2.29), reemplazamos la integral sobre el volumen Ω por una sobre la superficie Γ que rodea al volumen Ω.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho_f \phi dV + \oint_{\Gamma} (\rho_f \phi \mathbf{U}) \cdot \mathbf{dS} = \oint_{\Gamma} (v \nabla \phi) \cdot \mathbf{dS} + \int_{\Omega} S_{\phi} dV. \quad (2.30)$$

El significado físico de cada término de la ec. (2.30) es el siguiente

- $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho_f \phi dV$  : tasa de cambio total de  $\phi$  en el volumen de control Ω.
- $\oint_{\Gamma} (\rho_f \phi \mathbf{U}) \cdot \mathbf{dS}$  : flujo convectivo de  $\phi$  en el volumen de control Ω a través de la frontera Γ.
- $\oint_{\Gamma} (v \nabla \phi) \cdot \mathbf{dS}$  : flujo difusivo de  $\phi$  en el volumen de control Ω a través de la frontera Γ.
- $\int_{\Omega} S_{\phi} dV$  : Creación/destrucción de  $\phi$  dentro del volumen Ω.

Normalmente se agrupan los términos volumétricos y los superficiales, de modo que la expresión (2.30) se reduce a:

$$\int_{\Omega} \left( \frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t} - S_{\phi} \right) dV - \oint_{\Gamma} (v \nabla \phi - \rho_f \phi \mathbf{U}) \cdot \mathbf{dS} = 0. \quad (2.31)$$

La ec. (2.31) debe ser discretizada, y se debe realizar un tratamiento específico para las integrales de superficie y las de volumen. En primer lugar podemos comenzar discretizando el dominio como vemos en la Fig. 2.4. La expresión (2.31) es válida para una región, o volumen de control Ω. Si particionamos Ω en  $n$  elementos  $\Omega_i$  tal que  $\Omega = \cup_{i=1}^n \Omega_i$  y  $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset^9$  (ver Fig. 2.4), podemos plantear la conservación de  $\phi$  en cada  $\Omega_i$ .

$$\sum_{i=1}^n \left[ \int_{\Omega_i} \left( \frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t} - S_{\phi} \right) dV - \oint_{\Gamma_i} (v \nabla \phi - \rho_f \phi \mathbf{U}) \cdot \mathbf{dS} \right] = 0, \quad (2.32)$$

siendo  $n$  el número de elementos en los que se particiona el dominio original Ω. Debe tenerse en cuenta que en la ec. (2.32) las integrales de volumen

<sup>9</sup>∅ es el conjunto vacío

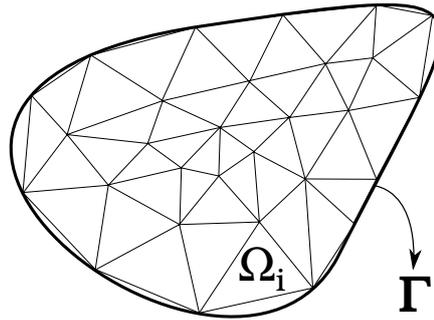


Figura 2.4: Discretización del dominio Ω en pequeños volúmenes de control (VC) Ω<sub>i</sub>

conforman la contribución de  $\phi$  en cada uno de los  $i$  elementos. Por el contrario, las integrales de superficie deberán aportar solamente la contribución en la superficie exterior o frontera  $\Gamma$ , de modo que las integrales sobre las superficies internas (entre elementos) deberán cancelarse.

Teniendo en cuenta que cada uno de los elementos  $\Omega_i$  puede ser en general un poliedro con  $m_i$  caras (ver Fig. 2.5), podemos expresar la ec. (2.32) como:

$$\sum_{i=1}^n \left\{ \int_{\Omega_i} \left( \frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t} - S_\phi \right) dV - \sum_{j=1}^{m_i} \left[ \int_{\Gamma_j} (v \nabla \phi - \rho_f \phi \mathbf{U}) \cdot d\mathbf{S} \right] \right\} = 0, \quad (2.33)$$

donde hemos pasado de una integral sobre una superficie cerrada ( $\oint_{\Gamma_i}$ ) a una sumatoria de integrales de superficie ( $\int_{\Gamma_j}$ ), verificándose  $\Gamma_i = \cup_{j=1}^{m_i} \Gamma_j$ .

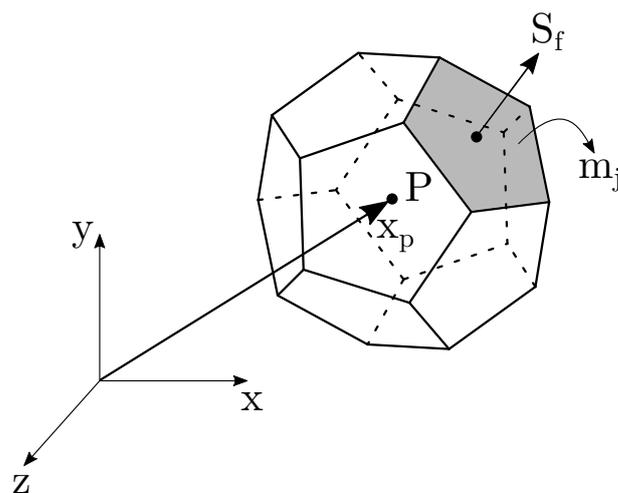


Figura 2.5: Representación esquemática de una celda de volumen  $V_i$  y centroide  $P$  con un número  $m$  de caras. Sobre la cara  $m_i$  se ha representado al vector superficie  $S_f$ .

Ahora debemos expresar los operadores diferenciales y las integrales de forma aproximada. Para ello, suponiendo que  $\phi$  varía suavemente tanto en el espacio como en el tiempo, podemos aproximar los valores de  $\phi$  en un entorno mediante series de Taylor.

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}) = & \phi_p + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \cdot (\nabla\phi)_p + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \otimes (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) : (\nabla\nabla\phi)_p + \\ & \dots + \frac{1}{n!} \underbrace{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \otimes (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \otimes (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \otimes \dots}_{n} \underbrace{\dots}_{n-1} \underbrace{(\nabla\nabla\dots\nabla\phi)_p}_n, \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta t \left( \frac{\partial\phi}{\partial t} \right)^t + \frac{1}{2}\Delta t^2 \left( \frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} \right)^t + \dots + \frac{1}{n!}\Delta t^n \left( \frac{\partial^n\phi}{\partial t^n} \right)^t, \quad (2.35)$$

donde  $\mathbf{x} - \mathbf{x}_p \otimes \mathbf{x} - \mathbf{x}_p$  es el producto tensorial entre de  $\mathbf{x} - \mathbf{x}_p$  por si mismo y  $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \otimes (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) : (\nabla\nabla\phi)_p$  es el doble producto interno de dos tensores de rango 2. El término  $n$ -ésimo de la ec. (2.34) conforma  $n$  productos tensoriales  $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \otimes (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \otimes (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \otimes \dots$  y  $n - 1$  productos internos  $:::$  de dos tensores de rango  $n$  [56].  $\mathbf{x}_p$  es la posición del centroide del VC considerado (ver Fig. 2.5),  $\mathbf{x}$  es la posición de un punto dentro del dominio  $\Omega$ ,  $t$  es un instante de tiempo arbitrario y  $\Delta t$  es el paso de tiempo para la expansión temporal. De este modo  $\phi_p = \phi(\mathbf{x}_p)$  y  $\phi^t = \phi(t)$ .

De las expansiones en series de Taylor, vemos que suponer una variación lineal de  $\phi$  implica un error de segundo orden en  $\Delta t$  o  $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)$  según corresponda.

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi_p + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \cdot (\nabla\phi)_p + \mathcal{O}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_p|)^2, \quad (2.36)$$

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta t \left( \frac{\partial\phi}{\partial t} \right)^t + \mathcal{O}(\Delta t)^2. \quad (2.37)$$

Con estas aproximaciones podemos expresar las derivadas y calcular las integrales presentes en la ec. (2.33). Supongamos que deseamos calcular la integral de  $\phi(\mathbf{x})$  sobre  $\Omega_i$ . Usando la aproximación de la ec. (2.36) tenemos,

$$\int_{\Omega_i} \phi(\mathbf{x}) dV \approx \int_{\Omega_i} \left[ \phi_p + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \cdot (\nabla\phi)_p \right] dV. \quad (2.38)$$

Ahora bien, de la definición de centroide sabemos que  $\int_{\Omega_i} \mathbf{x} dV = V_i \mathbf{x}_p$ , siendo  $\mathbf{x}_p$  la posición del centroide, entonces podemos plantear

$$\int_{\Omega_i} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) dV = \int_{\Omega_i} \mathbf{x} dV - \mathbf{x}_p \int_{\Omega_i} dV = \mathbf{x}_p V_i - \mathbf{x}_p V_i = 0, \quad (2.39)$$

Consecuentemente la ec. (2.38) se simplifica según

$$\int_{\Omega_i} \phi(\mathbf{x}) dV \approx \int_{\Omega_i} \phi_p dV + \underbrace{\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \cdot (\nabla \phi)_p dV}_{=0}, \quad (2.40)$$

$$\int_{\Omega_i} \phi(\mathbf{x}) dV \approx \phi_p V_i, \quad (2.41)$$

siendo  $\phi_p$  la variable evaluada en el centroide de la celda de volumen  $V_p$ . La ec. (2.41) conforma una aproximación de segundo orden en  $\mathbf{x} - \mathbf{x}_p$ , siendo este vector una representación del paso de malla.<sup>10</sup>

De forma similar puede obtenerse una aproximación para las integrales sobre las superficies  $\Gamma_j$  que rodean a  $\Omega_i$  de la forma  $\int_{\Gamma_j} (\nabla \phi) \cdot \mathbf{dS}$  (ver ec. 2.33).

$$\int_{\Gamma_j} (\nabla \phi) \cdot \mathbf{dS} \approx (\nabla \phi)_j \cdot \mathbf{S}_j = (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f, \quad (2.42)$$

siendo  $(\nabla \phi)_f$  el gradiente de  $\phi$  evaluado en la cara de la celda y  $\mathbf{S}_f$  el vector normal a la cara o vector superficie. En lo siguiente, el subíndice  $f$  hace referencia a un parámetro o variable evaluada en la cara de una celda. Hemos obtenido una aproximación para integrales de superficie de la forma  $\int_{\Gamma_j} (\nabla \phi) \cdot \mathbf{dS}$ , pero lo mismo puede extenderse para integrales de superficie de escalares  $\int_{\Gamma_j} \phi dS = \int_{\Gamma_j} \phi(\mathbf{x}) dS \approx \phi_f S_f$  [49].

Con las ecs. 2.41 y 2.42 podemos obtener formas aproximadas para los operadores diferenciales (divergencia y gradiente) presentes en la ecuación de conservación de  $\phi$  (ec. 2.29). Para ello planteamos las siguientes integrales sobre  $\Omega_i$

$$\int_{\Omega_i} (\nabla \cdot \phi \mathbf{U}) dV, \quad (2.43)$$

$$\int_{\Omega_i} (\nabla \phi) dV, \quad (2.44)$$

Aplicando el teorema de Gauss en la ec. (2.43) obtenemos

$$\int_{\Omega_i} (\nabla \cdot \phi \mathbf{U}) dV = \oint_{\Gamma_i} (\phi \mathbf{U}) \cdot \mathbf{dS} = \sum_{j=1}^m \int_{\Gamma_j} (\phi \mathbf{U}) \cdot \mathbf{dS}. \quad (2.45)$$

<sup>10</sup>En el caso unidimensional el vector  $\mathbf{x} - \mathbf{x}_p$  es simplemente el paso de malla  $\Delta x$ .

Aplicando en la ec. (2.45) las aproximaciones para las integrales de volumen y superficie (ecs. 2.41 y 2.42 ) obtenemos:

$$(\nabla \cdot \phi \mathbf{U}) V_i \approx \sum_{j=1}^m [(\phi \mathbf{U})_j \cdot \mathbf{S}_j], \quad (2.46)$$

$$\nabla \cdot \phi \mathbf{U} \approx \frac{1}{V_i} \sum_f (\phi \mathbf{U} \cdot \mathbf{S})_f. \quad (2.47)$$

donde  $\sum_f$  corresponde a la sumatoria sobre todas las caras del  $\Omega_i$ . De la misma forma, para la ec. (2.44) obtenemos

$$\int_{\Omega_i} (\nabla \phi) dV = \oint_{\Gamma_i} \phi d\mathbf{S} = \sum_{j=1}^m \int_{\Gamma_j} \phi d\mathbf{S} \approx \frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^m (\phi_j \mathbf{S}_j), \quad (2.48)$$

$$\nabla \phi \approx \frac{1}{V_i} \sum_f (\phi \mathbf{S})_f. \quad (2.49)$$

donde  $\sum_f$  corresponde a la sumatoria sobre todas las caras del  $\Omega_i$ . Las ecs. (2.47) y (2.49) son aproximaciones de segundo orden para  $\nabla \cdot \phi \mathbf{U}$  y  $\nabla \phi$ . Haciendo uso de estas expresiones ahora podemos aproximar la ecuación de transporte de  $\phi$  (ec. (2.30)). El término convectivo quedará:

$$\int_{\Gamma} \rho_f \phi \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_{j=1}^m (\rho_f \phi \mathbf{U})_j \cdot \mathbf{S}_j = \sum_{j=1}^m \rho_{fj} \phi_j (\mathbf{U}_j \cdot \mathbf{S}_j). \quad (2.50)$$

Al igual que antes, adoptamos la notación compacta para la sumatoria sobre las caras  $\sum_{j=1}^m = \sum_f$

$$\int_{\Gamma} \rho_f \phi \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} \approx \sum_f \rho_{ff} \phi_f (\mathbf{U} \cdot \mathbf{S})_f. \quad (2.51)$$

Debemos notar que en las expresiones anteriores aparecen algunas variables evaluadas en la **cara** del elemento de volumen ( $\rho_{ff}$ ,  $\phi_f$  y  $\mathbf{U}_f$ ). Dichos valores deben ser aproximados en función de los valores de las variables en los centroides de las celdas vecinas. Para el caso de la densidad, hemos modificado levemente la notación debido a que ya hemos utilizado  $\rho_f$  para representar la densidad del fluido. En nuestro caso, al ser un fluido incompresible,  $\rho_{ff} = \rho_f$ . Hay muchas formas de interpolación para obtener los valores de las variables en las caras del elemento en función de los valores en las celdas vecinas, solo por mencionar algunos: interpolación lineal o de diferencias centradas, *Upwind* o UDS, *Linear Upwind*, QUICK, MUSCL, etc.[49, 50]. Para

las simulaciones CFD-DEM utilizamos es esquema lineal.

Para el término difusivo (ver ec. (2.30)) tenemos:

$$\int_{\Gamma} v \nabla \phi \cdot \mathbf{dS} \approx \sum_f v (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f. \quad (2.52)$$

Al igual que con el término convectivo, vemos que en la ec. (2.52)  $(\nabla \phi)$  está valuado en la **cara** del elemento, con lo cual podríamos usar la ec. (2.49) para calcular el gradiente en los centroides de dos celdas vecinas y luego interpolar el valor en la cara. Sin embargo, este enfoque no se emplea dado que implica un estencil o molécula un poco extensa<sup>11</sup>, por el contrario se utiliza un enfoque más simple utilizando la variación de  $\phi$ .

$$(\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f \approx |\mathbf{S}_f| \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P|} = |\mathbf{S}_f| \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}_{PN}|}, \quad (2.53)$$

siendo  $\mathbf{x}_N$  y  $\mathbf{x}_P$  las posiciones de los centroides de dos celdas vecinas,  $\mathbf{S}_f$  la superficie de la cara entre las dos celdas y  $\mathbf{d}_{PN}$  la distancia entre los centroides de las celdas. Esta expresión es válida para celdas ortogonales, sin embargo en la práctica la mayoría de las mallas son no estructuradas y la ortogonalidad entre  $\mathbf{S}_f$  y  $\mathbf{d}_{PN}$  no se verifica. En tales casos el enfoque utilizado consiste en dividir  $\nabla \phi \cdot \mathbf{dS}$  en una contribución ortogonal y una no ortogonal [49].

Finalmente, la ec. (2.33) aproximada queda:

$$\left( \frac{\partial \rho_i \phi}{\partial t} - S_\phi \right) V_i - \left[ \sum_f v (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f - \sum_f \rho_f \phi_f (\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f) \right] = 0. \quad (2.54)$$

Luego de realizar las interpolaciones de  $(\nabla \phi)$ ,  $\phi_f$  y  $\mathbf{U}_f$  en las caras de los elementos en función de los valores de  $\phi$  en los centroides de celdas vecinas, se obtiene un sistema lineal de  $n$  ecuaciones con  $m$  incógnitas, donde  $n$  es el número de subdominios  $\Omega_i$  y  $m$  es el número de caras de cada elemento.

$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\phi} = \mathbf{b}, \quad (2.55)$$

siendo  $\mathbf{A}$  la matriz de los coeficientes,  $\boldsymbol{\phi}$  el vector de las incógnitas y  $\mathbf{b}$  un vector que reúne los términos independientes. Este sistema es normalmente resuelto con métodos iterativos dado el tamaño del mismo.

<sup>11</sup>Se denomina estencil o molécula a las expresiones para interpolar una variable en un punto en función de los valores que la misma posee en otros puntos.

Para el tratamiento temporal, integramos la ec. (2.54) sobre un paso de tiempo  $\Delta t$ .

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \left( \frac{\partial \rho_f \phi}{\partial t} - S_\phi \right) V_i - \left[ \sum_f v (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f - \sum_f \rho_f \phi_f (\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f) \right] \right\} dt = 0. \quad (2.56)$$

Como habíamos propuesto una variación lineal de  $\phi$  tanto en el espacio como en el tiempo, tenemos que

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi(t) dt \approx \frac{1}{2} (\phi^t + \phi^{t+\Delta t}) \Delta t, \quad (2.57)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_P \approx \frac{\phi^{t+\Delta t} - \phi^t}{\Delta t}. \quad (2.58)$$

Por lo tanto, empleando estas aproximaciones y considerando que  $v$ ,  $\rho_f$  y  $S_\phi$  no dependen del tiempo, la ec. (2.56) queda

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{t+\Delta t} - \phi^t}{\Delta t} V_i - S_\phi V_i - \frac{1}{2} \left[ \sum_f v (\nabla \phi)_f^{t+\Delta t} \cdot \mathbf{S}_f + \sum_f v (\nabla \phi)_f^t \cdot \mathbf{S}_f \right] + \\ + \frac{1}{2} \left[ \sum_f \rho_f \phi_f^{t+\Delta t} (\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f) + \sum_f \rho_f \phi_f^t (\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f) \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Este esquema presenta un error de segundo orden para la evolución temporal de  $\phi$ . Vemos que el mismo posee variables evaluadas en dos instantes de tiempo  $t$  y  $t + \Delta t$ . Este esquema se asocia a una familia de esquemas, afectando a los términos evaluados en cada instante de tiempo ( $t$  y  $t + \Delta t$ ) con un peso  $\theta$  de modo de obtener esquemas puramente explícitos o implícitos.

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{t+\Delta t} - \phi^t}{\Delta t} V_i + \theta \left[ \sum_f \rho_f \phi_f^{t+\Delta t} (\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_f v (\nabla \phi)_f^{t+\Delta t} \cdot \mathbf{S}_f \right] + \\ + (1 - \theta) \left[ \sum_f \rho_f \phi_f^t (\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_f v (\nabla \phi)_f^t \cdot \mathbf{S}_f \right] = S_\phi V_i. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Vemos que para  $\theta = 0$  se obtiene un esquema puramente explícito y para  $\theta = 1$  un esquema puramente implícito. Para  $\theta = 0,5$  se obtiene el esquema de Crank-Nicolson, que es justamente el esquema de la ec. (2.58).

### 2.2.3 Tratamiento de las ecuaciones de Navier–Stokes

Ahora vamos a aplicar lo anteriormente desarrollado para la conservación de una variable  $\phi$  para discretizar las ecuaciones de N–S ya vistas anteriormente. Repetimos debajo las ecs. 2.1 y 2.2, pero ahora detallamos el término difusivo (fuerzas viscosas)<sup>12</sup>. Dado que las ecuaciones de N–S son ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales y acopladas, la resolución de las mismas es bastante demandante. El desafío proviene del hecho de que el campo de presiones debe ser tal que responda al principio de conservación de la cantidad de movimiento y además debe estar asociado a un campo de velocidades que debe cumplir con el principio de conservación de la cantidad de movimiento y con el principio de la conservación de la masa. Esto es algo complejo, dado que en flujos incompresibles la presión no aparece en la ecuación de la conservación de la masa. Por tal motivo debe formularse una ecuación auxiliar que imponga esta restricción. Ese es el espíritu de los distintos algoritmos destinados a resolver las ecuaciones de N–S: SIMPLE, SIMPLEC, SIMPLER, PISO, etc [30, 48, 49]. En lo siguiente se detalla brevemente el algoritmo PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) ya que es el empleado por el código que utilizamos en esta tesis. No obstante, los demás algoritmos son bastante similares. Otra de las dificultades de la resolución de las ecuaciones de N–S la conforma la no-linealidad del término convectivo. Para el tratamiento del mismo normalmente se utiliza una linealización de la forma  $\mathbf{U}^{\text{new}}\mathbf{U}^{\text{old}}$ , o sea evaluado el campo de velocidad en dos pasos de tiempo distintos. Esta suposición es razonable para números de Courant pequeños (ver sec. 5.1). Escribimos nuevamente las ecuaciones de N–S.

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (2.61)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U}). \quad (2.62)$$

Ya vimos que el FVM consiste en aplicar el principio de conservación sobre un volumen de control y luego aplicar el teorema de Gauss para expresar la divergencia en función de valores en las caras de la celda. Entonces, para

<sup>12</sup>Para generar una notación más compacta hicimos  $\boldsymbol{\tau} = \nu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T) = \nu \nabla \mathbf{U}$

el término convectivo tenemos:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) dV \approx \int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{U}^{t+\Delta t} \otimes \mathbf{U}^t) dV \approx \int_{\Gamma} (\mathbf{U}^{t+\Delta t} \otimes \mathbf{U}^t) \mathbf{dS} \quad (2.63)$$

$$\approx \sum_f \mathbf{U}^t \mathbf{U}^{t+\Delta t} \cdot \mathbf{S}_f, \quad (2.64)$$

donde se ha realizado la linealización del término  $\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}$  como  $\mathbf{U}^t \mathbf{U}^{t+\Delta t}$ . Al producto  $\mathbf{U}^t \cdot \mathbf{S}_f$  se lo denomina flujo convectivo  $F$ , vemos que se determina con los valores del campo de velocidades del paso de tiempo anterior. Entonces

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) dV \approx \sum_f F^t \mathbf{U}^{t+\Delta t}, \quad (2.65)$$

$$= a_P \mathbf{U}_P + \sum_f a_N \mathbf{U}_N, \quad (2.66)$$

siendo  $a_P$  la matriz diagonal que contiene los coeficientes resultantes de la discretización y  $a_N$  la matriz no diagonal que posee los coeficientes resultantes de la discretización.

Discretizando los términos convectivos y difusivos de la ec. (2.62) en su forma integral, y no discretizando  $\nabla p$ , se obtiene la denominada forma semi-discretizada de la conservación de la cantidad de movimiento [56] [64].

$$a_P \mathbf{U}_p = \mathbf{H}(\mathbf{U}) - \nabla p. \quad (2.67)$$

La derivación completa de la ec. 2.67 puede verse en [55]. El operador  $\mathbf{H}$  reúne los términos convectivos, difusivos y transientes

$$\mathbf{H}(\mathbf{U}) = - \sum_f a_N \mathbf{U}_N + \frac{\mathbf{U}^t}{\Delta t}. \quad (2.68)$$

Haciendo uso de la ec. 2.47 discretizamos la ecuación de la conservación de la masa

$$\nabla \cdot \mathbf{U} \approx \frac{1}{V_i} \sum_f \mathbf{U} \cdot \mathbf{S}_f = 0, \quad (2.69)$$

$$\approx \sum_f \mathbf{U} \cdot \mathbf{S}_f = 0. \quad (2.70)$$

Ahora de la ec. (2.67) despejamos el valor de la velocidad en el centro de la celda

$$\mathbf{U}_p = \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) - \frac{1}{a_p} \nabla p, \quad (2.71)$$

Si ahora reemplazamos la ec. (2.71) en la ec. (2.69) podemos obtener una ecuación para la presión derivada del principio de conservación de la masa

$$\nabla \cdot \left[ \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) - \frac{1}{a_p} \nabla p \right] = 0, \quad (2.72)$$

$$\nabla \cdot \left[ \frac{1}{a_p} \nabla p \right] = \nabla \cdot \left[ \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \right], \quad (2.73)$$

$$\sum_f \left[ \frac{1}{a_p} \nabla p \right]_f \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \left[ \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \right]_f \cdot \mathbf{S}_f. \quad (2.74)$$

Finalmente la forma discretizada de las ecuaciones de N-S es

$$\begin{cases} \sum_f \left[ \frac{1}{a_p} \nabla p \right]_f \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \left[ \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \right]_f \cdot \mathbf{S}_f \\ a_p \mathbf{U}_p = \mathbf{H}(\mathbf{U}) - \sum_f \mathbf{S}(p)_f, \end{cases} \quad (2.75)$$

donde  $\mathbf{S}(p)_f$  es un término fuente dado por el gradiente de la presión.

## 2.2.4 Algoritmo PISO

Para resolver las ecuaciones de N-S vamos a emplear un algoritmo para realizar el acople entre los campos de presión y velocidad. Ya mencionamos que, para flujos incompresibles, no hay una ecuación que permita vincular los campos de presión y velocidad. Como podemos ver en la ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento aparecen tanto el campo de presión como el de velocidad, pero la restricción de continuidad solo se impone estrictamente sobre el campo de velocidad (ver ecs. 2.1 y 2.2). Pero como la velocidad y la presión no pueden estar desacoplados, el campo de presiones debe ser tal que genere un campo de velocidades que cumpla con el principio de conservación de la masa y de la cantidad de movimiento. Vamos a desarrollar el algoritmo PISO (*“Pressure-Implicit Split-Operator”* propuesto originalmente por Issa [65] y desarrollado por numerosos autores [55, 56]. Mediante este algoritmo el sistema de ecuaciones es resuelto hasta que la solución converge a una solución en presión y velocidad.

Para evitar problemas de *“cuadrícula”* (*checkerboarding*) las presiones son resueltas en los centros de las celdas y las velocidades en las caras [48, 49, 55]. Para el desarrollo del algoritmo necesitamos una expresión para la velocidad

en las caras de los elementos, para ello interpolamos la ec. (2.71).

$$\mathbf{U}_f = \left[ \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \right]_f - \left[ \frac{1}{a_p} \nabla p \right]_f. \quad (2.76)$$

Por lo tanto el flujo en las caras estará dado por

$$F = \mathbf{U}_f \cdot \mathbf{S}_f = \left\{ \left[ \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \right]_f - \left[ \frac{1}{a_p} \nabla p \right]_f \right\} \cdot \mathbf{S}_f, \quad (2.77)$$

Concretamente, el algoritmo PISO se compone de los siguientes pasos:

- (a) Obtener una solución aproximada del campo de velocidad mediante la expresión discretizada de la conservación de la cantidad e movimiento, utilizando los valores del paso anterior del gradiente de presión y del flujo para la linealización del término convectivo. Este paso es denominado “predictor” (*momentum predictor*).

$$a_p \mathbf{U}_p = \mathbf{H}(\mathbf{U}) - \sum_f \mathbf{S}(p)_f.$$

- (b) Aproximar el flujo en las caras ( $F_f^*$ ) despreciando el efecto de la presión en la ec. (2.77).

$$F_f \approx F_f^* = \left[ \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \right]_f \cdot \mathbf{S}_f.$$

- (c) Con el campo de velocidad obtenido, resolver la ecuación para la presión.

$$\sum_f \left[ \frac{1}{a_p} \nabla p \right]_f \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \left[ \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \right]_f \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f F_f^*.$$

- (d) Corregir el flujo teniendo en cuenta el efecto de la presión (ec. 2.77), despreciado en el paso (b).

$$F = F_f^* - \left[ \frac{1}{a_p} \nabla p \right]_f \cdot \mathbf{S}_f.$$

- (e) Corregir los valores de velocidad en el centro de la celda debido al nuevo campo de presiones con la ec. (2.71).

$$\mathbf{U}_p = \frac{1}{a_p} \mathbf{H}(\mathbf{U}) - \frac{1}{a_p} \nabla p.$$

- (f) Con este nuevo campo de velocidades, repetir desde el paso (b)  $n$  veces, en OpenFOAM el número de repeticiones se controla con `nCorrectors` y típicamente el bucle se repite dos veces.

## 2.3 Método de los Elementos Discretos – DEM

El Método de los Elementos Discretos (DEM) es un método numérico originalmente desarrollado por Cundall y Strack [66] para aplicaciones de mecánica de suelos. En este método se calcula la trayectoria de cada una de las partículas del sistema respecto de un esquema de referencia Lagrangiano. Una fortaleza del método es el modelado de las colisiones, entre partículas, y entre las partículas y las paredes. Hay tres posibilidades: considerar a las partículas como esferas rígidas que no admiten deformación (*hard spheres*), considerar a las partículas como esferas blandas admitiendo una pequeña deformación (del orden de 0,5 % del diámetro de la partícula) durante la colisión (*soft spheres*), y por último, considerar a las partículas como sólidos deformables durante la colisión (*Finite Discrete Element Method*), para lo cual debe resolverse el campo de tensiones y deformaciones durante cada colisión. El esfuerzo computacional es ascendente desde el modelo de esferas rígidas hasta el de sólidos deformables, normalmente se adopta el enfoque de esferas blandas ya que reproduce satisfactoriamente las fuerzas de interacción con un razonable costo computacional [67]. Consideremos las ecuaciones de movimiento de Newton–Euler para una partícula  $i$

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i + \mathbf{F}_i^f + \mathbf{F}_i^b, \quad (2.78)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \boldsymbol{\tau}_i, \quad (2.79)$$

donde  $\mathbf{F}_i$  es la fuerza resultante de cada contacto partícula-partícula y partícula-pared sobre la partícula  $i$ . La fuerza ejercida por el fluido sobre las partículas  $\mathbf{F}_i^f$  es generalmente expresada como  $\mathbf{F}_i^f = \mathbf{F}_i^d + \mathbf{F}_i^p + \mathbf{F}_i^v$ , donde  $\mathbf{F}_i^d$  es la fuerza de arrastre,  $\mathbf{F}_i^p$  es la fuerza de presión y  $\mathbf{F}_i^v$  es la fuerza de arrastre viscoso actuando en las partículas [68]. Cualquier otra fuerza externa tal como una fuerza gravitacional o electromagnética es tomada en cuenta por  $\mathbf{F}_i^b$ . Finalmente  $m_i$ ,  $I_i$  y  $\boldsymbol{\tau}_i$  son la masa, el momento de inercia y el torque resultante sobre la partícula  $i$ .

Conocidas las fuerzas de interacción sobre cada una de las partículas del sistema, se puede obtener la posición y velocidad de las mismas resolviendo

e integrando las ecuaciones de Newton-Euler para el movimiento de cuerpos rígidos [69].

Las ecuaciones de movimiento para las  $N$  partículas que componen al sistema son resueltas a través de un algoritmo de Verlet con velocidades [70] avanzando pequeños intervalos de tiempo. Para el movimiento de traslación del centro de masa de las partículas tenemos

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \mathbf{a}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2}, \quad (2.80)$$

$$\mathbf{v}(t + \frac{\Delta t}{2}) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}(t)\frac{\Delta t}{2}, \quad (2.81)$$

$$\mathbf{a}(t + \Delta t) = \frac{\sum_k \mathbf{F}_k}{m_p}, \quad (2.82)$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{\mathbf{a}(t + \Delta t)\Delta t}{2}, \quad (2.83)$$

siendo  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{v}$  y  $\mathbf{F}_k$  la posición, la velocidad y la fuerza resultante sobre una determinada partícula. Normalmente las implementaciones de códigos DEM cuentan con un número de técnicas destinadas a incrementar la velocidad de cálculo, tales como: generación de listas de vecinos, paralelización, etc.

### Interacción

Consideremos ahora dos partículas  $i$  y  $j$  de radios  $R_i$  y  $R_j$ , ubicadas en posiciones  $\mathbf{r}_i$  y  $\mathbf{r}_j$  (ver Fig. 2.6), las mismas estarán en contacto si  $\delta^n = R_i + R_j - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > 0$  e interactuarán mediante una fuerza que puede ser expresada en términos de sus contribuciones normal y tangencial [69],

$$\mathbf{F}_{ij} = F_{ij}^n \mathbf{n}_{ij} + F_{ij}^t \mathbf{t}_{ij}, \quad (2.84)$$

siendo  $\mathbf{n}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) / |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  y  $\mathbf{t}_{ij}$  los versores normal y tangencial al punto de contacto. Hay muchos modelos para describir las fuerzas de contacto en las simulaciones DEM. Cada uno de ellos es apropiado para diferentes geometrías de partícula y comportamiento material [69, 71-74]. El modelo más simple para la componente normal es el de Hooke (*linear spring-dashpot*), el cual propone para la fuerza de interacción  $\mathbf{F}_{ij}^n$  (ver Fig. 2.6) una combinación de una componente lineal con el solapamiento  $\delta^n$  y una componente disipativa proporcional a la velocidad relativa normal  $\dot{\delta}^n$  entre las partículas que colisionan [69]. Ahora bien, este modelo lineal predice satisfactoriamente los valores de la fuerza de interacción, pero no sucede lo mismo con los tiempos de interacción. Razón por la cual, para simulaciones en las que las partículas

interactúan con un fluido se aconseja tomar otro modelo de fuerza que replique en mejor grado el tiempo de interacción. Este es el caso del modelo de Hertz [75], el cual considera una relación no lineal entre la fuerza normal y el solapamiento  $F_{ij} \propto (\delta^n)^{3/2}$ . Asumimos entonces un modelo de contacto de Hertz [75] sobre el cual se aplica además una fuerza disipativa que depende de la velocidad relativa normal  $\dot{\delta}^n$  [36, 76]. La componente normal estará dada por

$$F_{ij}^n = k^n (\delta^n)^{3/2} + \gamma^n (\delta^n)^{1/4} \dot{\delta}^n, \quad (2.85)$$

donde  $k^n = \frac{4}{3}E^* \sqrt{R^*}$  es un parámetro que reúne las propiedades elásticas de los materiales que interactúan [69]. La constante de disipación ( $\gamma^n$ ) resulta de la solución de un modelo resorte-amortiguador tipo Hertz  $\gamma^n = -2\sqrt{\frac{5}{3}E^* m^* (R^*)^{1/4} \frac{\ln e}{\sqrt{\ln e^2 + \pi^2}}}$  [77]. La expresión para  $\gamma^n$  considera un coeficiente de restitución  $e$  independiente de la velocidad [36]. El módulo de Young efectivo  $E^*$ , el radio efectivo  $R^*$ , y la masa efectiva  $m^*$  son definidos como  $1/E^* = (1 - \nu_1^2)/E_1 + (1 - \nu_2^2)/E_2$ ,  $1/R^* = 1/R_1 + 1/R_2$  and  $1/m^* = 1/m_1 + 1/m_2$ .  $\nu$  corresponde al coeficiente de Poisson<sup>13</sup> y los subíndices 1 y 2 se refieren a las propiedades de cada una de las dos partículas que interactúan (ver Fig. 2.6) [78].

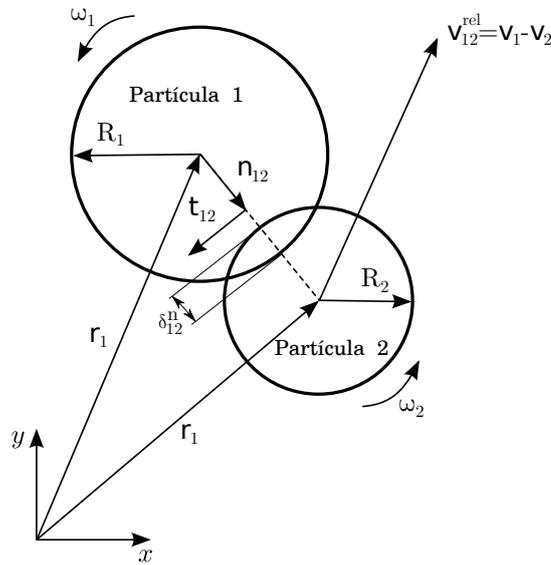


Figura 2.6: Modelo de contacto entre dos partículas esféricas de radios  $R_1$  y  $R_2$ .  $\mathbf{r}_1$  y  $\mathbf{r}_2$  son los vectores posición de las partículas,  $\omega_1$  y  $\omega_2$  son las velocidades angulares de las partículas en colisión.  $\delta_{12}^n$  es el solapamiento o penetración entre las partículas, y  $\mathbf{v}_{12}^{\text{rel}}$  la velocidad relativa entre las partículas.

<sup>13</sup>Normalmente el coeficiente de Poisson se indica con el símbolo  $\nu$ , pero se optó por  $\nu$  dado que  $\nu$  ya se ha utilizado para la viscosidad cinemática del fluido y para el coeficiente de difusión de un escalar  $\phi$ .

En la dirección tangencial al contacto, la fuerza de interacción que usaremos sigue una versión modificada del modelo Cundall y Strack [36, 66, 76]

$$F_{ij}^t = -\text{sign}(v_{ij}^t) \min\left(\left|k^t \delta^t (\delta^n)^{1/2} - \gamma^t \dot{\delta}^t (\delta^n)^{1/4}\right|, \mathcal{M} F_{ij}^n\right), \quad (2.86)$$

donde  $k^t = 8G^* \sqrt{R^*}$  y  $\gamma^t = -4\sqrt{\frac{5}{3}} G^* m^* (R^*)^{1/4} \frac{\ln e}{\sqrt{\ln e^2 + \pi^2}}$  (ver [36, 67, 76]). El módulo de tangencial efectivo  $G^*$  está dado por  $1/G^* = (2 - \nu_1)/G_1 + (2 - \nu_2)/G_2$  (ver [78]). El módulo tangencial para cada partícula puede ser obtenido a partir del módulo de Young a través de  $2G_i = E_i/(1 + \nu_i)$ . La fuerza tangencial de interacción  $F_{ij}^t$  se encuentra limitada por la ley de fricción de Coulomb, siendo  $\mathcal{M}$  el coeficiente de fricción. El “desplazamiento” tangencial depende de la historia del contacto y se calcula como

$$\delta^t(t) = \int_{t_K}^t v_{ij}^t(t') dt, \quad (2.87)$$

siendo  $t_K$  el tiempo en el cual comienza el contacto y  $v_{ij}^t$  la velocidad relativa tangencial en el contacto. [69].

## 2.4 Esquema CFD–DEM

### 2.4.1 Ecuaciones VANS

El esquema CFD–DEM es utilizado para simular flujos multifásicos del tipo fluido-partícula combinando dos métodos de simulación: FVM para la fase fluida [48, 63] y DEM para la fase sólida [66, 69]. Las ecuaciones de gobierno de la fase fluida difieren levemente de las ecuaciones de N–S para flujo incompresible que vimos en la sec. 2.2.1 debido a que ahora además de considerar la fase fluida, debemos tener en cuenta a la fase sólida. Para representar la proporción de una u otra fase dentro de un VC, se incorpora el concepto de fracción volumétrica. En un dado VC, o celda,  $\alpha_f$  representa la fracción de volumen ocupado por fluido [79]. Del mismo modo,  $\alpha_p$  representa el volumen ocupado por las partículas. Dado que no hay otra fase presente, deberá verificarse que  $\alpha_f + \alpha_p = 1$ . Solo la fase fluida estará gobernada por las ecuaciones de N–S, y por esa razón, las mismas se encuentran asociadas a un volumen en el cual es posible definir dicha fracción volumétrica  $\alpha_f$ . Con lo cual, las ecuaciones de gobierno serán válidas para un pequeño volumen lo suficientemente grande para que quepan algunas partículas y pueda definirse  $\alpha_i$ , a diferencia de las ecuaciones de N–S que son válidas para cada

punto del dominio. Estas ecuaciones reciben el nombre de *Volume Averaged Navier-Stokes Equations* (VANS) debido a que son justamente las ecuaciones N-S promediadas sobre el volumen de la celda [79]. A este enfoque se lo conoce en la literatura como *unresolved* [67, 68], en contrapartida con el enfoque *resolved* en el cual se resuelve el flujo alrededor de cada partícula. En estas condiciones, la conservación de la masa y de la cantidad de movimiento toman la forma:

$$\frac{\partial \alpha_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_f \mathbf{U}_f) = 0, \quad (2.88)$$

$$\frac{\partial (\alpha_f \mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_f \mathbf{U}_f \otimes \mathbf{U}_f) = -\alpha_f \nabla \frac{p}{\rho_f} - \mathbf{R}_{pf} + \nabla \cdot (\alpha_f \boldsymbol{\tau}) + \alpha_f \rho_f \mathbf{g}, \quad (2.89)$$

siendo  $\alpha_f$  la fracción volumétrica de fluido,  $\mathbf{U}_f$  la velocidad del fluido,  $\rho_f$  la densidad del fluido,  $\boldsymbol{\tau}$  el tensor de estrés viscoso,  $\mathbf{g}$  la aceleración de la gravedad y  $\mathbf{R}_{pf}$  el intercambio de momento cinético entre el fluido y las partículas. Ahora vemos en las ecs. (2.88) y (2.89) como todos los términos han sido afectados por la fracción volumétrica  $\alpha_f$  dado que sólo la fase fluida responde a la conservación de la cantidad de movimiento en la forma de N-S. Debemos notar que  $\mathbf{R}_{pf}$  está conectado con la fuerza que el fluido ejerce sobre las partículas  $\mathbf{F}_i^f$  (ver sec. 2.3). Sin embargo, esta vinculación no es directa ya que los términos en la ec. (2.89) corresponden dimensionalmente a fuerzas volumétricas y por el contrario  $\mathbf{F}_i^f$  en ec. (2.78) es una fuerza puntual. Para obtener  $\mathbf{R}_{pf}$  debe realizarse un mapeo (ver sec. 2.4.2).

Al margen de  $\alpha_i$  y  $\mathbf{R}_{pf}$ , las ecuaciones VANS tienen la misma forma que las ecuaciones de N-S que ya vimos en la sec. 2.2.1. Las mismas son resueltas empleando el mismo algoritmo basado en presión PISO [56, 65] que vimos en la sec. 2.2.4 pero considerando a un nuevo término fuente  $\mathbf{R}_{pf}$  y un campo escalar  $\alpha_f$ .

## 2.4.2 Acople

Como ya mencionamos en la sección anterior, el acople entre el fluido y las partículas se realiza mediante un término de intercambio de momento lineal. Para calcular la fuerza de intercambio fluido-partícula, debe realizarse un mapeo (*Lagrange-Eulerian mapping*). El intercambio de momento entre fases se modela como

$$\mathbf{R}_{pf} = K_{pf} (\mathbf{U}_f - \langle \mathbf{v} \rangle), \quad (2.90)$$

siendo  $\langle \mathbf{v} \rangle$  la velocidad promedio de las  $N_{p_i}$  partículas presentes en la celda  $i$  dada por  $\langle \mathbf{v} \rangle = \sum_{i=1}^{N_{p_i}} \frac{\mathbf{v}_i}{N_{p_i}}$ . El factor  $K_{\text{pf}}$  establece la conexión entre  $\mathbf{R}_{\text{pf}}$  y la fuerza de arrastre sobre cada partícula en el VC  $\mathbf{F}_i^d$  según la expresión:

$$K_{\text{pf}} = \frac{\left| \sum_{i=1}^{N_{p_i}} \mathbf{F}_i^d \right|}{V_i |\mathbf{U}_f - \langle \mathbf{v} \rangle|}. \quad (2.91)$$

Las fuerzas  $\mathbf{F}_i^d$  han sido sumadas sobre las  $N_{p_i}$  partículas presentes en la celda de volumen  $V_i$ . Las contribuciones de la fuerza debido al gradiente de presión y el término viscoso ya se encuentran incluidas dentro del tensor de estrés  $\tau$  (ver [32] y [68] para más detalles).

### 2.4.3 Modelos de arrastre

Hay muchas aproximaciones para modelar la fuerza de arrastre fluido-partícula. Nosotros utilizamos la correlación de Di Felice [80, 81] en la cual la fuerza de arrastre fluido-partícula está dada por

$$\mathbf{F}_i^d = \frac{1}{2} \rho_f (\mathbf{U}_f - \mathbf{v}_i) |\mathbf{U}_f - \mathbf{v}_i| C_d \frac{\pi d_p^2}{4} \alpha_f^{2-\beta}, \quad (2.92)$$

siendo  $\mathbf{v}_i$  la velocidad de la partícula  $i$ ,  $C_d$  el coeficiente de arrastre y  $\beta$  un parámetro del modelo. Estos últimos coeficientes están dados por:

$$C_d = \left( 0,63 + \frac{4,8}{Re_p} \right)^2, \quad (2.93)$$

$$\beta = 3,7 - 0,65 \exp \left[ -\frac{(1,5 - \log Re_p)^2}{2} \right]. \quad (2.94)$$

El número de Reynolds de la partícula  $Re_p$  está dado por:

$$Re_p = \frac{\rho_f d_p \alpha_f |\mathbf{U}_f - \mathbf{v}_i|}{\mu_f}, \quad (2.95)$$

siendo  $\mu_f$  la viscosidad dinámica del fluido.

## 2.5 Herramientas de software utilizadas

Para el desarrollo del trabajo de tesis se empleó software libre y de código abierto. A continuación se describen brevemente cada una de las herramientas utilizadas.

### 2.5.1 CFDEM

El código utilizado es el denominado CFDEM<sup>®14</sup> [82] y fue desarrollado inicialmente en el Departamento de Modelado de Flujo de Partículas de la Universidad Johannes Kepler (*Department of Particulate Flow Modelling, Johannes Kepler Universität, Linz, Austria*). Hoy en día es desarrollado principalmente por DCS Computing en colaboración con Stefan Radl de la Universidad Técnica de Graz (*Technische Universität, Graz, Austria*). Pese a ser un desarrollo relativamente nuevo cuenta con una comunidad activa y creciente, que organiza reuniones y conferencias específicas. CFDEM realiza el acople de dos códigos, uno para la fase fluida (OpenFOAM) y otro para la fase sólida (LIGGGHTS), para resolver el problema de flujo multifásico fluido-partícula.

### 2.5.2 OpenFOAM

OpenFoam<sup>15</sup> es una biblioteca en C++ para la resolución de problemas de mecánica del continuo por el FVM. Principalmente se la utiliza para resolver problemas de fluidodinámica, pero también puede empleársela para resolver problemas de la mecánica del sólido. Es el principal software libre para el modelado fluidodinámico y cuenta con una gran comunidad de usuarios y desarrolladores.

### 2.5.3 LIGGGHTS

LIGGGHTS<sup>®</sup> (*LAMMPS improved for general granular and granular heat transfer simulations*)<sup>16</sup> [67] es un código libre que utiliza el Método de los Elementos Discretos para la resolución de problemas de dinámica granular. Fue desarrollado por DCS computing en base a LAMMPS (*Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator*), un código de dinámica molecular desarrollado en los laboratorios SANDIA. LIGGGHTS hereda de LAMMPS

<sup>14</sup><https://www.cfdem.com>

<sup>15</sup><http://openfoam.org>

<sup>16</sup><http://www.cfdem.com/liggghts-open-source-discrete-element-method-particle-simulation-code>

la capacidad de trabajar en paralelo a través del método de descomposición en subdominios, asociando a cada procesador una región determinada del espacio.

## Comentario

OpenFOAM tiene librerías propias para realizar seguimiento lagrangeano de partículas utilizadas para realizar modelos de spray y también para modelar partículas incluyendo colisiones. Sin embargo los modelos de colisión implementados son limitados. Solamente dispone de un modelo de arrastre implementado. Además, el algoritmo de detección de contactos es apropiado para modelar flujos diluidos (pocas partículas) donde la interacción partícula-partícula no es de gran importancia. Por el contrario, en CFDEM hay múltiples modelos de contacto y fuerzas de interacción fluido-partícula disponibles y además posee un esquema de listas de vecinos orientado a modelar sistemas de partículas muy densos.

## Capítulo 3

# Validaciones Numéricas

Para verificar el correcto funcionamiento del esquema CFD-DEM adoptado, se realizaron una serie de simulaciones con el fin de validar los resultados, algunas de las cuales han podido contrastarse con expresiones teóricas o experimentales. Se estudió la sedimentación de una única partícula esférica en un fluido en reposo, la caída de presión cuando un fluido atraviesa una cama de granos y finalmente un modelo de transporte de AS en una fractura plana recientemente publicado por otros autores.

### 3.1 Decantación de una partícula en un recinto

En primer lugar se optó por modelar la decantación de una esfera en un fluido en reposo, pudiendo contrastarse los resultados con la solución de la ecuación de Boussinesq-Basset-Osen (BBO) simplificada [83].

Considerando la fuerza de arrastre y la de Arquímedes la ecuación de BBO toma la siguiente forma:

$$m \frac{dv}{dt} = mg \left( 1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) - \frac{1}{8} \pi d_p^2 \rho_p C_D v^2, \quad (3.1)$$

siendo  $v$  la velocidad de la partícula,  $\rho_p$  la densidad material de la partícula,  $d_p$  el diámetro de la partícula,  $\rho_f$  la densidad del fluido,  $g$  la aceleración de la gravedad y  $C_D$  el coeficiente de arrastre de la partícula. Para este último usaremos el coeficiente de Schiller-Naumman:

$$C_D = \frac{24}{Re} \left( 1 + 0,15 Re^{0,687} \right). \quad (3.2)$$

Para el desarrollo de esta validación modelamos la caída de una partícula de un diámetro  $d_p = 1 \times 10^{-4}$  m y una densidad  $\rho_p = 3000$  kg/m<sup>3</sup> en un recinto prismático de 0,06 m de lado y una altura de 0,12 m en el cual se encuentra un fluido newtoniano de viscosidad dinámica  $\mu = 1$  cP y densidad

$\rho_f = 1000 \text{ kg/m}^3$ , tal como se ve en la Fig. 3.1. En estas condiciones, el flujo es laminar ( $Re \approx 17$ ) por lo que no es necesario incluir el modelado de la turbulencia (ver Fig. 3.2c). La altura del recinto se ha elegido lo suficientemente

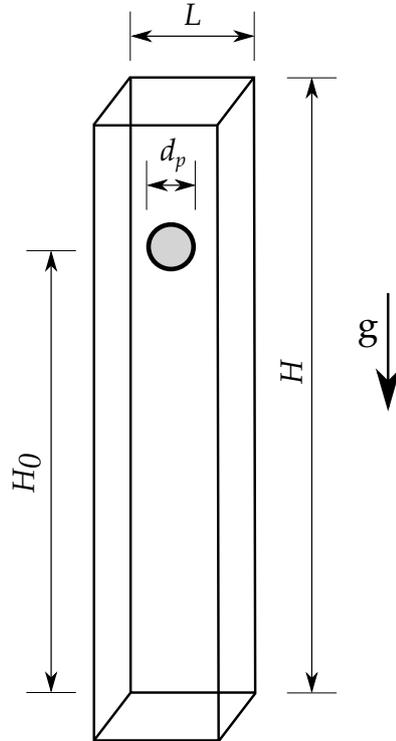


Figura 3.1: Esquema del dominio para simular la decantación de una partícula en un recipiente con fluido en reposo.

grande de modo tal que la partícula pueda desarrollar su velocidad terminal antes de llegar al fondo del mismo. El dominio se ha discretizado con una malla regular, utilizando un elemento de  $m_s = 0,00004 \text{ m}$ . Demás parámetros tales como los pasos de simulación para la fase sólida y fluida ( $\Delta t_{\text{DEM}}$  y  $\Delta t_{\text{CFD}}$  respectivamente), el intervalo de acoplamiento (CI) y las propiedades mecánicas y de contacto de las partículas ( $E$ ,  $\nu$ ,  $e$  y  $\mathcal{M}_p$ ) se reúnen en la tabla 3.1.

Para  $t = 0 \text{ s}$ , la partícula se encuentra a una altura de  $0,09 \text{ m}$ . El fluido se encuentra inicialmente en reposo y las 6 caras del dominio son tratadas como paredes físicas.

En la Fig. 3.2a podemos ver la condición inicial de la simulación, y en 3.2b podemos ver la evolución para  $t = 0,2 \text{ s}$ . En la Fig. 3.2c se adjunta una comparación entre la solución analítica correspondiente a la solución de la Ec. 3.1. Vemos que los resultados obtenidos por simulación reproducen satisfactoriamente la solución analítica.

Parámetro	Valor
$d_p$	$1 \times 10^{-4}$ [m]
$\rho_p$	3000 [kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_f$	1000 [kg/m <sup>3</sup> ]
$\mu_f$	1 [cP]
$L$	0,12 [m]
$H$	0,06 [m]
$H_0$	0,09 [m]
$\Delta t_{\text{DEM}}$	0,00001 [s]
$\Delta t_{\text{CFD}}$	0,0001 [s]
CI	10 [-]
$m_s$	0,0004 [m]
$E$	$5 \times 10^{-6}$ [Pa]
$\mathcal{V}$	= 0,55 [-]
$e$	= 0,3 [-]
$\mathcal{M}_p$	= 0,5 [-]

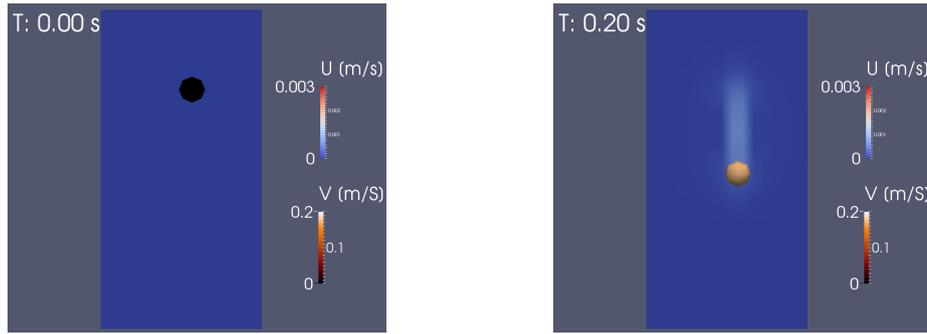
Cuadro 3.1: Parámetros de simulación para la decantación de una partícula esférica en un recinto de fluido.

## 3.2 Fluidización de una cama granular

Se modeló la caída de presión que sufre un flujo ascendente al atravesar una cama de partículas. Esta caída de presión puede calcularse según una expresión analítica desarrollada por Ergun al realizar un gran número de ensayos experimentales bajo distintas condiciones de flujo [84]. La ecuación de Ergun establece que la caída de presión a lo largo de una cama granular está dada por

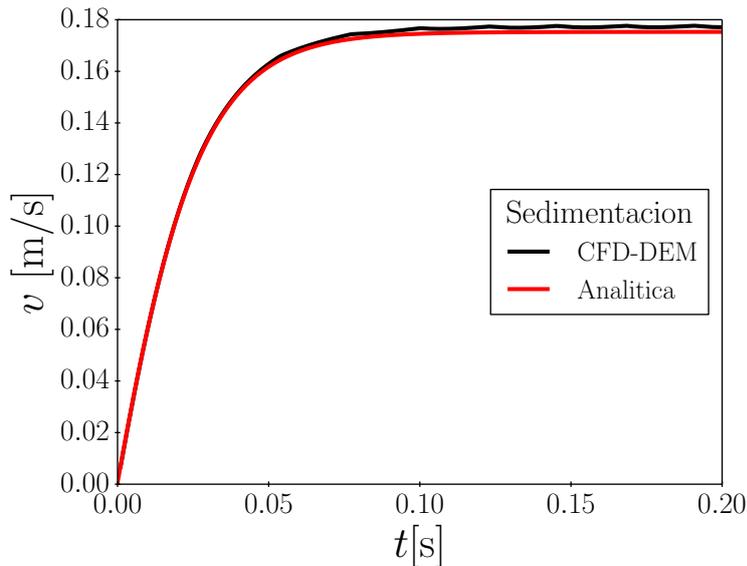
$$\frac{\Delta p}{H} = \frac{150\mu_f (1 - \epsilon)^2}{d_p^2 \phi_p^2 \epsilon^3} v_s + \frac{1,75\rho_f (1 - \epsilon)}{d_p \phi_p \epsilon^3} v_s^2, \quad (3.3)$$

siendo  $H$  la altura de la cama granular,  $\mu_f$  la viscosidad dinámica del fluido,  $\rho_f$  su densidad,  $v_s$  la velocidad superficial del fluido en la cama,  $d_p$  el diámetro de las partículas,  $\phi_p$  su esfericidad y  $\epsilon$  la porosidad de la cama granular. La velocidad superficial  $v_s$  es la velocidad con la que el fluido atraviesa a la cama granular a través del espacio intergranular. Si la cama granular de porosidad  $\epsilon$  y sección transversal  $A$  es atravesada por un caudal  $Q$ , la velocidad superficial del fluido se determina como  $v_s = Q/(A\epsilon)$ . La porosidad  $\epsilon$  es simplemente la fracción de volumen que no es ocupado por partículas presente en la cama granular. Dado que la expresión de Ergun no limita el



(a) Condición inicial para  $t = 0$  s.

(b) Solución para  $t = 0,2$  s.



(c) Evolución de la velocidad de la partícula a lo largo del tiempo. La curva roja corresponde a la solución de la ecuación BBO mientras que la curva negra corresponde a los resultados obtenidos por simulación mediante CFD-DEM.

Figura 3.2: Resultados obtenidos para la decantación de una partícula en un fluido en reposo. En las Figs. 3.2a y 3.2b el mapa de colores azul-rojo corresponde a la magnitud de la velocidad del fluido ( $U$ ), el mapa de colores-negro-blanco corresponde a la magnitud de la velocidad de la partícula  $v$ .

estudio a partículas puramente esféricas, se utiliza la esfericidad  $\phi_p$  que corresponde al cociente entre el área superficial de una esfera, que tiene igual volumen que la partícula y el área superficial de la partícula.

Cuando la caída de presión a lo largo de la cama granular equipara al peso de la columna se obtiene la condición mínima para obtener fluidización.

$$\frac{\Delta p}{H} = (1 - \epsilon) (\rho_f - \rho_o) g, \quad (3.4)$$

Igualando las Ecs. 3.3 y 3.4 podemos determinar la velocidad mínima para la fluidificación  $U_{mf}$  de la cama granular. De dicho proceso se obtiene

una ecuación cuadrática cuyas soluciones para  $U_{mf}$  son

$$U_{mf} = \begin{cases} \frac{d_p^2(\rho_p - \rho_f)g}{150\mu_f} \left( \frac{\epsilon^3 \phi_p^2}{1 - \epsilon} \right) & 20 < Re < 1000 \\ \frac{d_p(\rho_p - \rho_f)g}{1,75\rho_f} \epsilon^3 \phi_p & Re \geq 1000 \end{cases}, \quad (3.5)$$

De esta forma se podrá determinar la caída de presión a través de la cama granular antes y después de la fluidización.

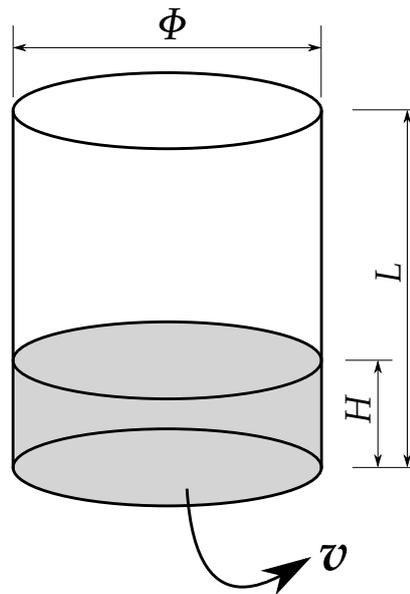


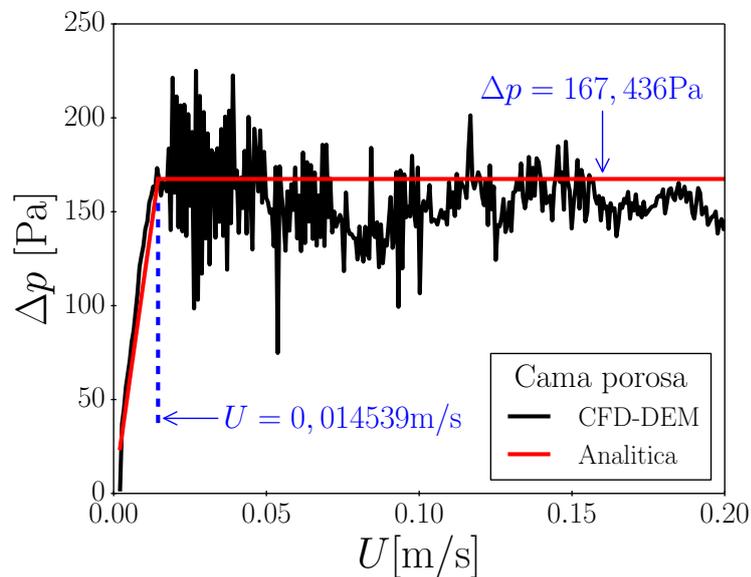
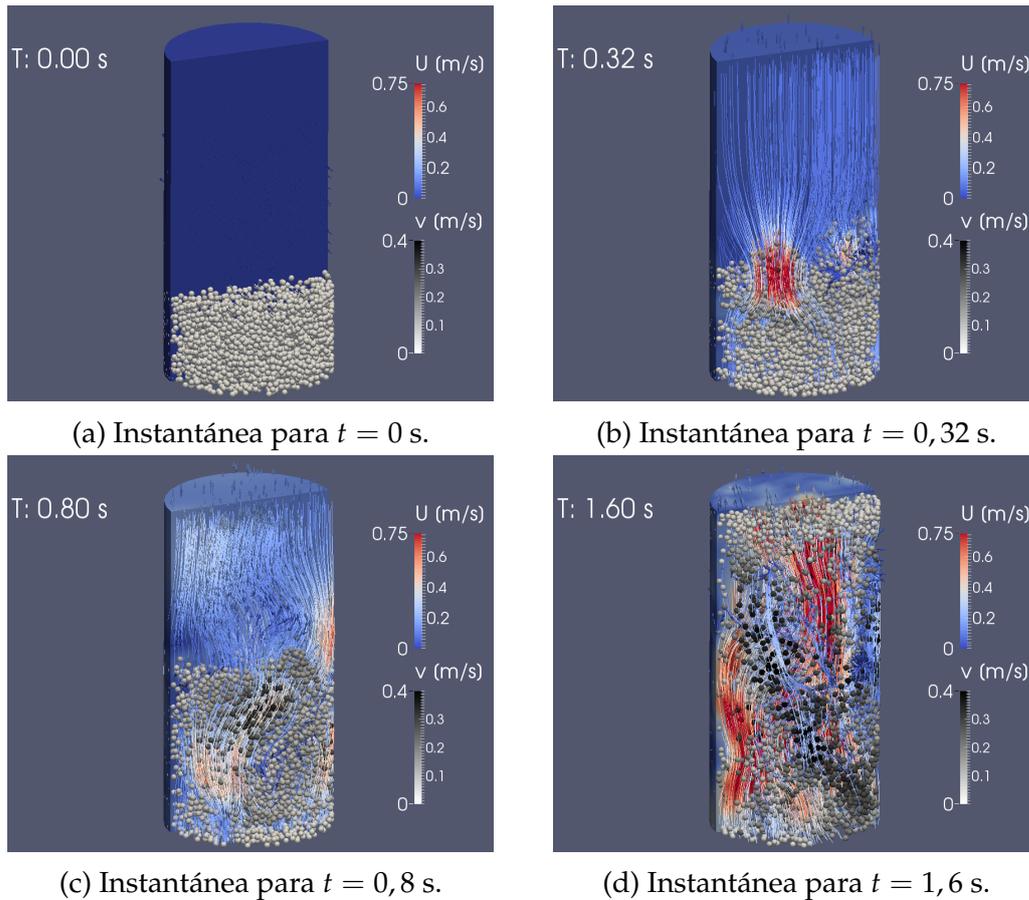
Figura 3.3: Esquema del dominio para simular la caída de presión a lo largo de una cama granular.

En la tabla 3.2 se reúnen los parámetros usados para la simulación CFD-DEM. Sobre la cara inferior del sistema se impondrá una velocidad que variará linealmente entre 0,002 m/s y 0,32 m/s a lo largo de 1,6 s. En estas condiciones, el flujo es laminar ( $Re \approx 60$ ) por lo que no fue necesario incluir el modelado de la turbulencia.

En las Figs. 3.4a-3.4d vemos instantáneas a lo largo de distintos tiempos de simulación, desde la condición inicial hasta la fluidización completa. En la Fig. 3.4e vemos que los resultados obtenidos por simulación para la caída de presión antes y luego de la fluidización (curva negra) son consistentes la solución analítica de Ergun (curva roja). Se reprodujo satisfactoriamente el inicio de la fluidización ( $U_{mf} = 0,014539$  m/s) y la caída de presión a lo largo de la cama en dicha condición ( $\Delta p_{mf} = 167,436$  Pa).

Parámetro	Valor
$d_p$	0,001 [m]
$N_p$	10000 [-]
$\phi_p$	1
$\rho_p$	2000 [kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_f$	10 [kg/m <sup>3</sup> ]
$\mu_f$	1,5 [cP]
$U$	0,002-0,32 [m/s]
$H$	0,01156 [m]
$\Phi$	0,0277 [m]
$L$	0,0553 [m]
$\epsilon$	0,451335
$\Delta t_{DEM}$	0,00001[s]
$\Delta t_{CFD}$	0,0001 [s]
CI	100 [-]
$m_s$	$\approx 0,0025$ [m]
$E$	$5 \times 10^{-6}$ [Pa]
$\mathcal{V}$	= 0,45 [-]
$e$	= 0,3 [-]
$\mathcal{M}_p$	= 0,5 [-]

Cuadro 3.2: Parámetros de simulación para la caída de presión a lo largo de una cama granular.



(e) La curva roja corresponde la solución de Ergun, mientras que la curva negra corresponde a los resultados obtenidos por simulación CFD-DEM.

Figura 3.4: Las Figs 3.4a-3.4d son instantáneas de la simulación del flujo a través de una cama porosa, en la Fig. 3.4e se representa la caída de presión a lo largo de la cama granular.

### 3.3 Reproducción de resultados de transporte de AS de otros autores

Para completar las pruebas del esquema numérico adoptado se decidió reproducir los resultados reportados por Zhang *et al.*[41], ya que luego de revisar la bibliografía se determinó que era uno de los artículos en donde se proveía de forma más detallada la metodología y parámetros utilizados. Como ya mencionamos anteriormente, a pesar de que el modelo y la gran mayoría de los parámetros de simulación están especificados, algunos parámetros tuvieron que ser estimados de los resultados que los autores reportaron. El modelo simulado es una celda de 0,3 m de largo, una altura de 0,09 m (ver Fig. 3.5) y un ancho igual a un diámetro de partícula. El dominio de simulación para el fluido es estrictamente 2D, de modo que el plano anterior y posterior de la celda (ver Fig. 3.5) no son paredes físicas. Para las partículas, el plano anterior y posterior de la celda conforman paredes físicas y por ende restringen el movimiento de las mismas a un plano 2D a pesar de que las partículas sean en efecto esferas y no discos. Esta situación genera empaquetamientos más elevados de los esperados, por ese motivo en nuestras simulaciones de la sección 4.1 utilizamos un ancho de celda igual a 1.5 veces el diámetro de las partículas. El sistema es resuelto con el mismo enfoque CFD-DEM *unresolved* que se utilizó para el desarrollo de esta tesis pero mediante el software comercial Particle Flow Code PFC2D desarrollado por Itasca.<sup>1</sup>

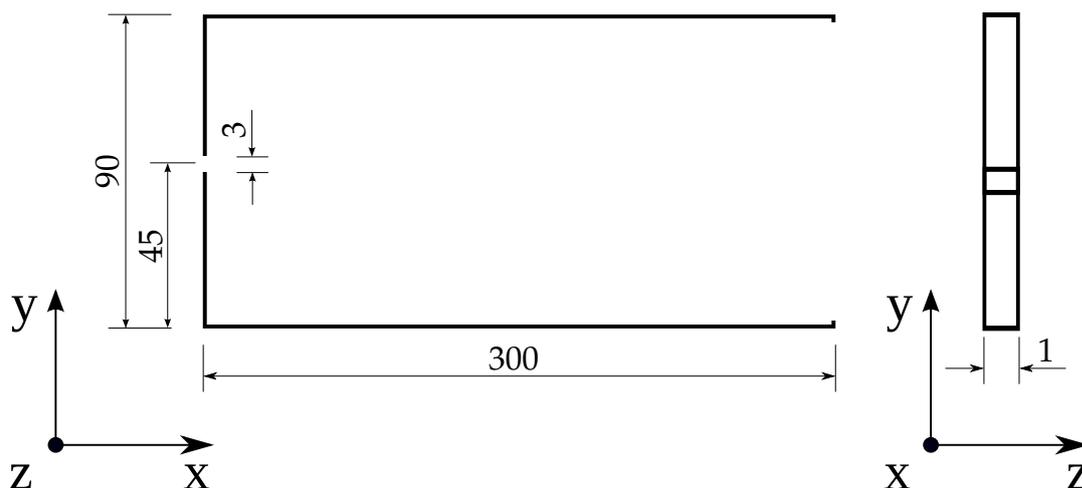


Figura 3.5: Esquema del sistema utilizado por Zhang *et al.*. Las dimensiones están expresadas en mm.

<sup>1</sup><https://www.itascacg.com/software/PFC>

Dentro de la celda un fluido de densidad  $\rho_f = 1000 \text{ kg/m}^3$  y viscosidad  $\nu = 10^{-2} \text{ Pa}\cdot\text{s}$  es inyectado a  $0,5 \text{ m/s}$  a través de un punto de inyección ubicado en el medio del extremo izquierdo de la celda (ver Fig. 3.5). La dimensión del punto de inyección no está claramente especificada, sin embargo se menciona en el trabajo que es del orden de tres diámetros de partícula. Definimos entonces que el orificio de inyección está formado por un rectángulo de altura  $3d_p$  y ancho  $d_p$ . Las partículas tienen un diámetro de  $1 \text{ mm}$  y una densidad  $\rho_p = 3200 \text{ kg/m}^3$ . Para el modelado de la turbulencia, se ha adoptado el modelo  $k - \epsilon$ .

Respecto a las propiedades elásticas, debemos mencionar que en su trabajo Zhang *et al.* [41] emplean un modelo de fuerza lineal y nosotros empleamos un modelo no-lineal de Hertz, por motivos ya mencionados en la sec. 2.3. Por ende las constantes elásticas  $K_n$  y  $K_s$  reportadas en [41] no son de directa aplicación dentro de nuestro esquema numérico. El módulo de Young, para nuestro modelo, se estimó haciendo un ajuste del modelo lineal usado por Zhang *et al.* a la componente no-lineal de Hertz. En esas condiciones obtenemos  $E = 1,7 \times 10^7 \text{ Pa}$ . Dicho ajuste se realizó dentro de un pequeño rango de deformaciones pequeñas, justamente las que son esperables en una simulación DEM ( $\sim 0,1 d_p$ ). Cabe aclarar que en este tipo de simulaciones fluido-partícula el modelo de fuerza para las partículas no es determinante. Ya veremos en el cap. 5 que, al menos en las condiciones exploradas en este trabajo de tesis, el problema se encuentra fuertemente gobernado por la fluidodinámica. Por ende, el impacto de usar un modelo lineal (como en Zhang *et al.*) o usar uno no-lineal, es despreciable, especialmente en el régimen fluidodinámico explorado y dado los bajos niveles de deformación que se verifican durante las colisiones del sistema granular (como máximo del orden de  $0,1 \% d_p$ ). El coeficiente de restitución se fijó en  $e = 0,5$  y el coeficiente de Poisson en  $\nu = 0,5$ . Zhang *et al.* exploran varios coeficientes de fricción partícula-partícula y partícula-pared. Decidimos enfocarnos en los casos donde el coeficiente de fricción entre las partículas y la pared ( $\mathcal{M}_w$ ) y entre partícula y partícula ( $\mathcal{M}_p$ ) son iguales ( $\mathcal{M}_w = \mathcal{M}_p = 0,65$ ), debido principalmente a que son los resultados analizados con mayor detalle por Zhang *et al.*. En el trabajo de referencia, no se han reportado ni la tasa de inyección ni el número total de partículas inyectadas, de modo que tuvieron que ser estimadas de las imágenes publicadas.

En la Fig. 3.6 vemos parte de los resultados reportados por Zhang *et al.*. En la Fig. 3.6a vemos que al inyectar fluido junto con partículas en la celda

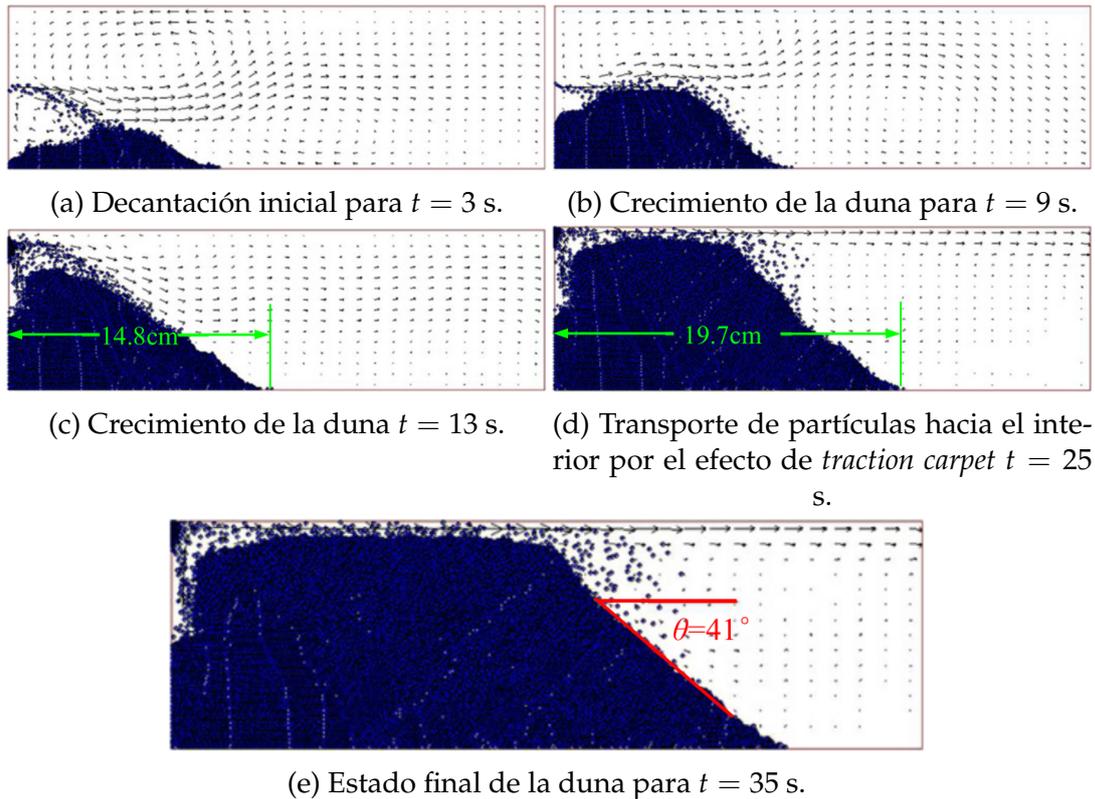


Figura 3.6: Instantáneas de una simulación CFD-DEM reportada por Zhang *et al.* para  $t = 3, 9, 13, 25$  y  $35$  s.[41] Los puntos azules representan a las partículas. El flujo del fluido es de izquierda a derecha como lo indican los vectores de velocidad de fluido. El punto de inyección de fluido y partículas se encuentra en el extremo izquierdo de la celda.

se desarrolla un vórtice de sentido antihorario y en consecuencia las partículas se decantan en una zona cercana a los puntos de inyección. Luego, con la posterior inyección de partículas dentro del dominio, la duna inicialmente formada empieza a crecer en altura (ver Fig. 3.6b) hasta que prácticamente alcanza la parte superior de la celda (ver Fig. 3.6c). Sin embargo, hasta este punto la duna se mantiene relativamente en la misma posición respecto del punto de inyección. Luego debido a la disminución del espacio libre entre la duna y la parte superior de la celda se produce el efecto de *traction carpet* (ver Fig. 3.6d). Por último, con la subsiguiente inyección, las partículas sobrepasan la duna y son transportadas hacia el interior de la celda alcanzando el estadio final reportado (ver Fig. 3.6e). En estas condiciones, puede verse que luego de 35 s de simulación aproximadamente un 60% de la celda se encuentra llena con partículas. Dado que conocemos las dimensiones del dominio, podemos estimar que una tasa de inyección de aproximadamente 366 partículas por segundo tuvo que ser usada. Adoptamos este valor en nuestro

modelo ya que el mismo no ha sido reportado en el trabajo de Zhang *et al.* [41].

En la Fig.3.7 presentamos los resultados de nuestra simulación simultáneamente con los perfiles de duna extraídos de los resultados reportados por Zhang *et al.* Hemos graficado instantáneas de la simulación mostrando el campo de velocidad y la posición de las partículas a lo largo de los mismos instantes de tiempo mostrados en el grupo de Figs. 3.6. Es claro que los resultados están en buen acuerdo no solo cualitativo sino que también cuantitativo. Al igual que en la Fig. 3.6a, en la Fig.3.7a vemos que cuando las partículas son inyectadas en la celda se desarrolla un vórtice anti-horario y las partículas tienden a asentarse cerca del punto de inyección. Durante esta etapa inicial se comienza a formar una duna con las primeras partículas que decantaron. Posteriormente esa duna inicial comienza a crecer en tamaño gracias al flujo de partículas que sigue ingresando en la celda. En la Fig. 3.7b hemos representado la duna en  $t = 9$  s. Vemos que la duna ha crecido tanto en ancho como en alto, pero al igual que lo visto en las Figs. 3.6b y 3.6c la duna se encuentra todavía cerca del punto de inyección. Podemos ver que a los 3 s la duna que obtuvimos es un tanto menor a la duna reportada por Zhang *et al.* pero sin embargo la forma es similar. No obstante, a los 9 s, obtenemos una duna un tanto más alta, tal es así que en este instante ya se comienza a desarrollar el efecto de *traction carpet*. El mismo se produce debido al menor espacio libre entre la duna y la parte superior de la celda. Dado que el caudal permanece constante la velocidad en esta región debe crecer. Velocidades mayores tienen mayor capacidad de transportar partículas y consecuentemente se verifica un crecimiento en ancho de la duna. Debido a este efecto, para  $t = 13$  s, la duna ha crecido hasta los 0,117 m como podemos ver en la Fig. 3.7c. Aquí también vemos que el valor que obtuvimos es un tanto menor que los 0,148 m reportados por Zhang *et al.* Al igual que vimos en la Fig. 3.6d, para  $t = 25$  s el efecto de *traction carpet* se vuelve predominante y se convierte en el efecto que controla el transporte de partículas en la simulación. En estas condiciones la duna ha alcanzado un ancho de 0,177 m (ver Fig. 3.7d). Este valor también es ligeramente menor al reportado por Zhang *et al.* (0,197 m). Vemos que sistemáticamente hemos obtenido anchos de duna inferiores a los reportados en [41]. Esto puede atribuirse al hecho de que la tasa de inyección de partículas tuvo que ser estimada de los resultados y es probable que la misma difiera levemente de la realmente utilizada por Zhang *et al.* Es probable que una tasa de inyección ligeramente mayor produzca resultados más cercanos a los reportados por Zhang *et al.* Sin embargo, se considera que

los resultados obtenidos se encuentran en acuerdo con los publicados, sobre todo teniendo en cuenta el grado de incertidumbre a la hora de especificar algunos de los parámetros utilizados. Finalmente, a los 35 s, mostramos el ángulo de reposo obtenido cuando la duna se ha asentado por completo. Se obtuvo en nuestra simulación un ángulo de reposo  $\theta = 49^\circ$  mientras que Zhang reportó un ángulo de reposo  $\theta = 41^\circ$  (ver Figs. 3.6e y 3.7e). Esta última discrepancia podemos atribuirla a los distintos modelos de fuerza utilizados, ya que como vimos en la sec. 2.3 el modelo de fuerza normal impacta en la componente tangencial. Siendo ésta la responsable en gran medida del ángulo de reposo.

En este capítulo concluimos que la técnica CFD-DEM que utilizamos es confiable y reproduce satisfactoriamente resultados de diferentes casos relacionados con el transporte de AS.

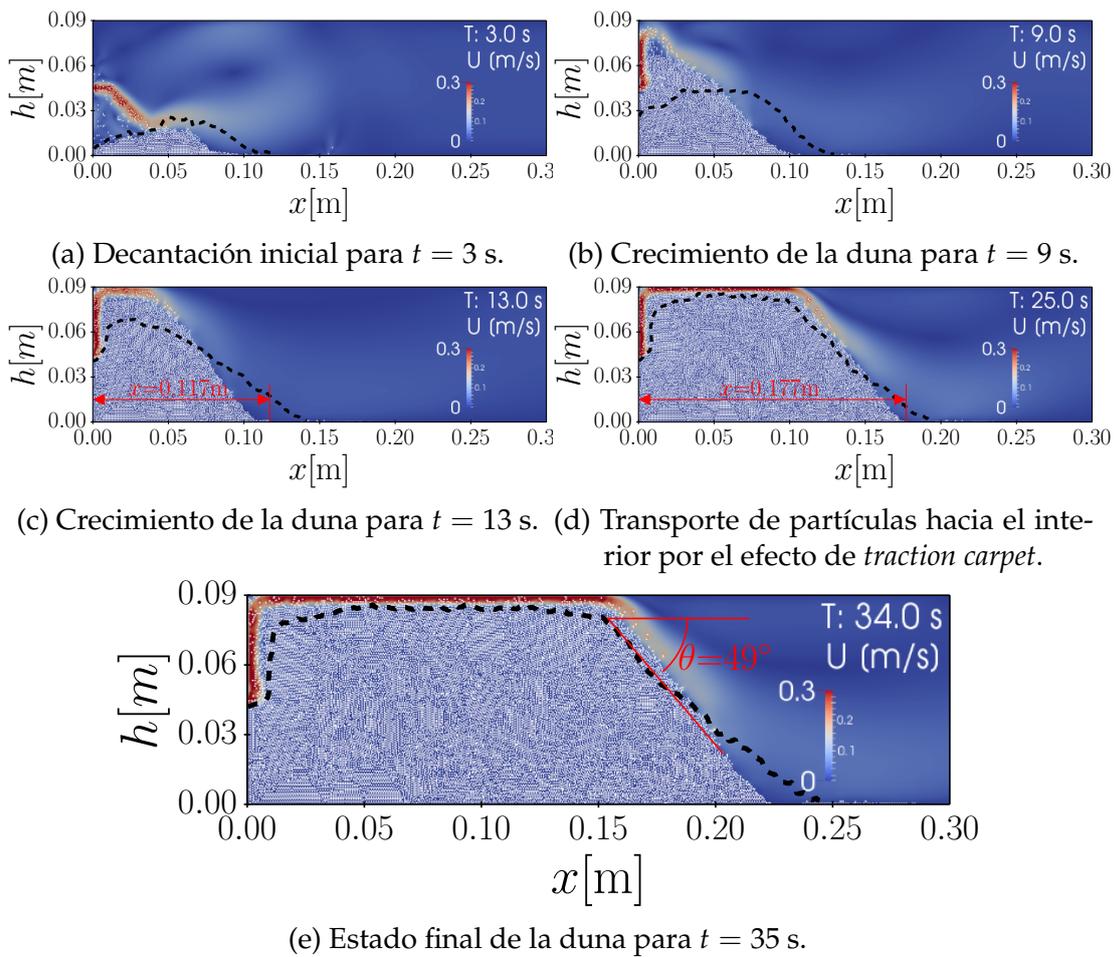


Figura 3.7: Instantáneas de nuestra simulación CFD-DEM para  $t = 3, 9, 13, 25$  y  $35$  s. Los puntos blancos representan a las partículas. El mapa de colores representa el módulo de la velocidad en m/s. Las líneas punteadas negras son el perfil de duna reportado por Zhang *et al* para el mismo instante de tiempo durante la inyección.

## Capítulo 4

# Transporte de agente de sostén en una celda plana

### 4.1 Modelo numérico

Para desarrollar las simulaciones hemos adoptado un modelo de celda plana tipo *Hele-Shaw* [85]. Es un modelo en el cual se considera que el flujo se verifica en 2D y es el enfoque adoptado en la gran mayoría de los trabajos de otros autores, ver por ejemplo [9, 40-42]. Si bien a priori parece un enfoque sumamente simplificado, resulta razonable dado que como ya comentamos en la sec. 1.1 la fractura hidráulica se propaga a lo largo del plano perpendicular a la dirección donde se presenta el menor esfuerzo en el subsuelo. Una fractura hidráulica típica tiene dimensiones del orden de metros (fractura de referencia: 40 m de alto y 80 m de largo, ver sec. 4.2), en contraste con los esfuerzos geostáticos que se verifican a escala regional. Entonces, dadas las dimensiones esperadas de una fractura hidráulica, es razonable considerar en dicha dimensión a los esfuerzos geostáticos como constantes. Dado que principalmente los esfuerzos geostáticos son los que controlan la propagación de la fractura hidráulica<sup>1</sup>, resulta razonable considerar que la misma se desarrollará en un plano. Como mencionamos, el razonamiento anterior es válido siempre y cuando no se verifiquen variaciones locales en el campo de tensiones. Podemos mencionar por ejemplo el efecto de *stress shadow*, en el cual la presencia de una etapa de fractura altera localmente el campo de tensiones en una zona en la cual han de realizarse ulteriores etapas de fractura [86]. Dicha alteración, consecuentemente modifica el crecimiento de fracturas que han de realizarse dentro de la zona afectada. El *stress shadow* típicamente

---

<sup>1</sup>También otros factores como la presencia de interfaces débiles, fracturas naturales, propiedades del fluido, regímenes de bombeo, etc. afectan el crecimiento de las fracturas obtenidas por estimulación hidráulica

se manifiesta como el curvado de las fracturas, con lo cual en estas condiciones la suposición de una fractura plana deja de ser apropiada.

En la Fig. 4.1 vemos un esquema del modelo que hemos utilizado. Se trata de una celda de 800mm de alto, 1600 mm de largo y un ancho  $1,5d_p$  siendo  $d_p$  el diámetro de las partículas (ver sec. 4.2). La celda posee 4 orificios de 5 mm en el extremo izquierdo y 10 orificios de la misma dimensión ubicados equiespaciadamente a lo largo del extremo derecho. Por los orificios del extremo izquierdo se inyectan las partículas junto con el fluido, y por los orificios del extremo derecho egresa solo el fluido. Solo se permite al fluido salir del dominio para no perder partículas de AS durante la simulación, lo cual puede suceder con altas velocidades de inyección o para determinadas posiciones de los puntos de inyección. En el esquema de la Fig. 4.1 los orificios de inyección se encuentran ubicados en el extremo inferior izquierdo, sin embargo también hemos utilizado otras dos geometrías en las cuales los orificios se ubican en el centro y en la parte superior del borde izquierdo de la celda. Esto permite estudiar el efecto que tiene la variación del posicionamiento de los puntos de inyección (ver cap. 5).

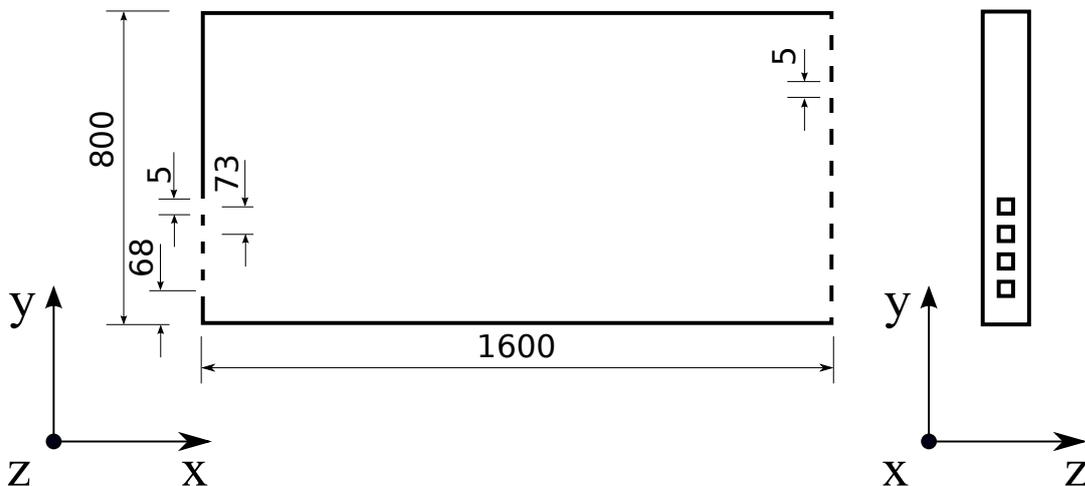


Figura 4.1: Esquema de la celda de simulación, todas las dimensiones están expresadas en mm. La celda tiene un espesor de  $1,5d_p$  en la dirección  $z$ . Solo la configuración denominada “inferior” ha sido representada, las otras dos configuraciones posibles (“media” y “superior”) solo difieren en la posición de los puntos de inyección. (a) Vista frontal del plano sobre el que se produce el movimiento 2D del fluido. (b) Vista lateral del extremo por el que se inyecta el fluido y las partículas.

Como vimos en la sec. 2.4.2, para el desarrollo de la simulación deben resolverse dos problemas de forma acoplada, cada uno sobre un dominio distinto. Para el fluido, las simulaciones son estrictamente 2D, de modo que

en la dirección perpendicular al plano de la celda la malla sólo posee un elemento de volumen.

Como mencionamos antes (sec. 3.3), si se realizara una simulación 2D para las partículas (celda con un espesor de un diámetro de partícula como hacen otros autores [41]) se obtendrían empaquetamientos muy ordenados cuando todas las partículas son esferas del mismo diámetro.

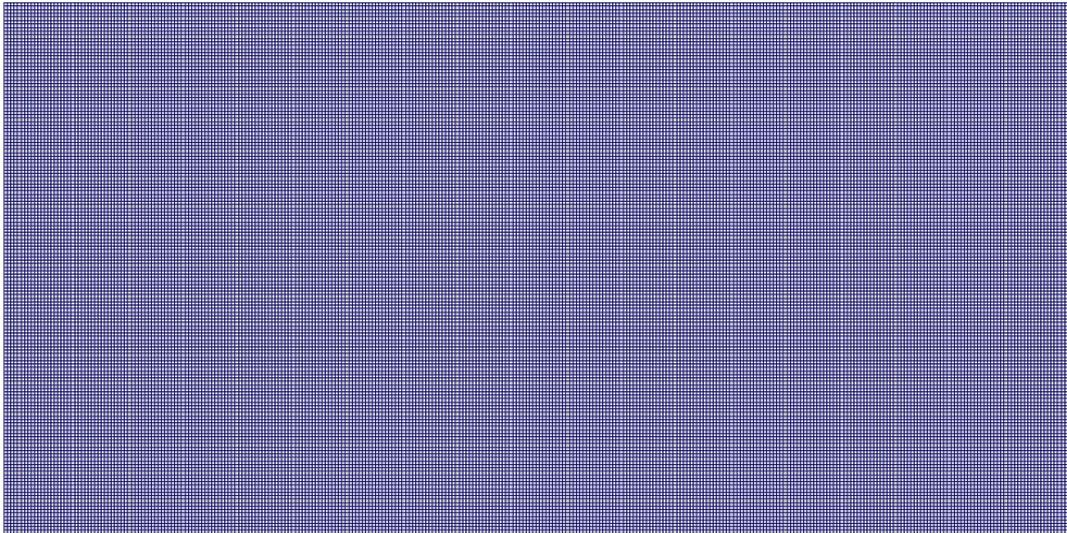
El grado de empaquetamiento se mide a través de la fracción de empaquetamiento o *packing fraction*, la misma se define como la relación entre el volumen que ocupan una serie de partículas y el volumen del recinto que las circunscribe.

$$\eta = \frac{N_p V_{\text{part}}}{V_{\text{rec}}}, \quad (4.1)$$

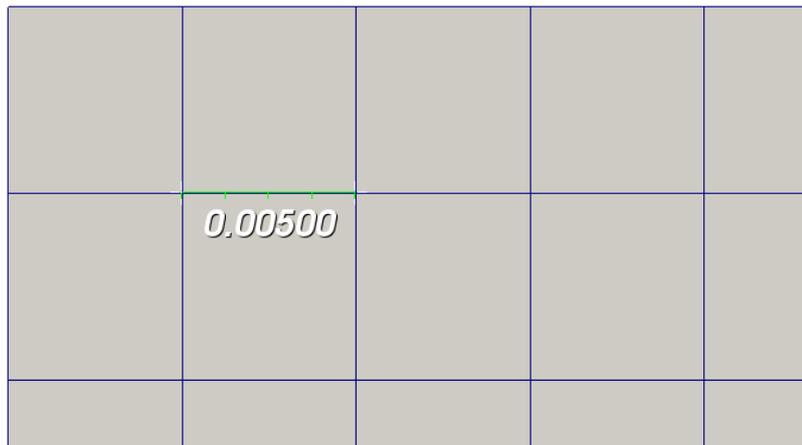
siendo  $N_p$  el número de partículas,  $V_{\text{part}} = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{d_p}{2}\right)^3$  el volumen de una partícula y  $V_{\text{rec}}$  el volumen del recinto que circunscribe a las partículas. Al margen de los límites teóricos para sistemas sumamente ordenados, puede asumirse que  $\eta$  es de alrededor de 57~64%, para una cama de granos iguales y esféricos donde los efectos por la presencia de bordes es despreciable.

Por esta razón, la dimensión perpendicular del dominio a los efectos del movimiento de las partículas de AS es  $1,5d_p$ . Esto permite que las partículas se distribuyan a través del espesor de la celda y se obtengan empaquetamientos más desordenados y similares a los esperados en la realidad.

En la sec. 2.4.2 mencionamos que para que las ecuaciones VANS sean válidas, las celdas de fluido deben ser lo suficientemente grandes como para que dentro de las mismas quepan un par de partículas y pueda definirse  $\alpha_f$ . En la práctica se establece como recomendación que  $\Delta x \geq 3d_p$ , siendo  $\Delta x$  el tamaño del elemento de volumen [68]. Siguiendo la recomendación anterior, el cálculo de  $\alpha_f$  es la relación entre el volumen de las partículas y el elemento de volumen. Si el problema lo requiere, pueden realizarse mallas en las cuales  $\Delta x \approx d_p$ . En estas condiciones, se utilizan los elementos de volumen que rodean a la partícula para calcular  $\alpha_f$ . Vemos que tamaño mínimo de los elementos de malla se encuentra condicionado por el tamaño de las partículas presentes en la simulación. Pese a ser un condicionante fuerte, pueden obtenerse mallas lo suficientemente refinadas como para producir resultados confiables. Más adelante, en la sec. 5.2 veremos el efecto que tiene la utilización de mallas de distinto nivel de refinamiento sobre el posicionamiento de la duna y la dinámica del proceso de transporte de AS.



(a) Vista general del dominio.



(b) Detalle de los elementos.

Figura 4.2: Malla estructurada con nivel de refinamiento bajo utilizada para las simulaciones CFD-DEM, en el panel superior se muestra una vista general y en el inferior un detalle de los elementos.

Las mallas se han realizado con GMSH<sup>2</sup>, un programa de software libre para la generación de mallas de elementos finitos. Como se ve en la Fig. 4.2, hemos procurado obtener mallas estructuradas dada la simplicidad del dominio. La malla correspondiente a la Fig. 4.2 posee elementos regulares de 5mm de lado en el plano  $x - y$ . Dado que la resolución del fluido es 2D, la dimensión normal de los elementos es igual al espesor de la celda.

<sup>2</sup>Las mallas producidas con GMSH (<http://gmsh.info>) deben convertirse al formato utilizado OpenFOAM con la herramienta `gmshToFoam`, que es parte de las bibliotecas de OpenFOAM.

## 4.2 Análisis dimensional

Para reproducir el transporte del agente de sostén en una fractura real, hemos escalado una fractura típica de campo garantizando semejanza cinemática y dinámica tanto como sea posible. El escalado de este tipo de experimentos ya ha sido discutido por otros autores [25].

Como referencia del campo, consideramos una fractura vertical plana realizada en una formación de muy baja permeabilidad (por ejemplo una formación de tipo *shale*). Debemos mencionar que esta configuración corresponde a un pozo vertical, actualmente utilizados mayormente como pozos de exploración ya que para producción se ha migrado a la realización de pozos horizontales con múltiples etapas de fractura. La fractura de referencia posee una altura  $h$  de 40 m, un largo  $L$  de 80 m y un espesor  $t$  de 6 mm. Para realizar nuestro modelo, solo consideraremos media ala de fractura (ver Fig. 1.2a). Asumimos que el fluido es bombeado a un caudal  $Q$  constante de  $0,1 \text{ m}^3/\text{s}$  (aproximadamente 40 bpm) y que dicho caudal se divide uniformemente hacia cada media ala de fractura. Por ende, con las dimensiones de la fractura podemos determinar la velocidad media en la fractura ( $\langle U \rangle_{\text{frac}}$ ) como,

$$\langle U \rangle_{\text{frac}} = \frac{1}{2} \frac{Q}{A} = \frac{1}{2} \frac{Q}{ht'} \quad (4.2)$$

siendo  $A$  el área transversal de la fractura (ver Fig. 4.3). Entonces la velocidad media del fluido en la fractura de referencia es  $0,21 \text{ m/s}$ .

En la Fig. 4.3 también asumimos que la inyección se realiza a través de cuatro *clusters* de punzado a lo alto del pozo. En la práctica, cada uno de estos *clusters* de punzado están conformados por una serie de orificios arreglados de forma helicoidal sobre la camisa del pozo. Lo estándar es que estos *clusters* tengan una longitud de 1 m y que posean 30 orificios por pie. Esos orificios típicamente poseen un diámetro de 8 mm. De modo que en un *cluster* de punzados de 1 m de longitud el área efectiva a través de la cual ingresa el fluido a la fractura es de  $1500 \text{ mm}^2$ . En nuestro modelo cada *cluster* se representa como una simple perforación efectiva.

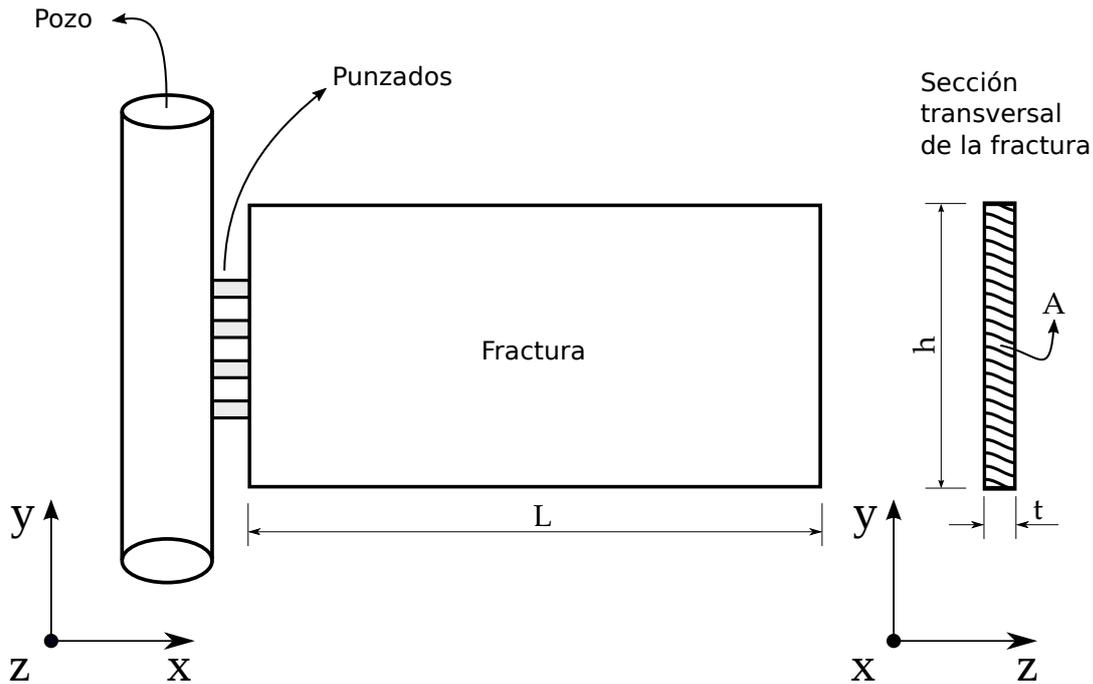


Figura 4.3: Esquema de la fractura de referencia.  $L$  es el largo de la fractura,  $h$  su altura,  $t$  el espesor y  $A = ht$  el área transversal. Hemos representado esquemáticamente no a escala 4 punzados por los cuales ingresa fluido y agente de sostén.

El número de Reynolds de una partícula ( $Re_{\text{part}}$ ) en un fluido Newtoniano se define como<sup>3</sup>

$$Re_{\text{part}} = \frac{\rho_f v d_p}{\mu}, \quad (4.3)$$

siendo  $\rho_f$  la densidad del fluido,  $d_p$  el diámetro de la partícula y  $v$  la velocidad de la misma con respecto al fluido.

Las partículas del AS en nuestro modelo tienen el mismo tamaño que las partículas usadas en el campo. También, el fluido de nuestro modelo tiene la misma densidad y viscosidad del fluido utilizado en el campo. Por lo tanto, para lograr el mismo  $Re_{\text{part}}$  que se verifica en el campo, simplemente debemos lograr la misma velocidad  $v$ . Por ello, el caudal del modelo debe ser fijado de forma tal que la velocidad media del fluido en la celda sea la misma que la velocidad media en la fractura real de referencia ( $\langle U \rangle_{\text{frac}} = 0,21 \text{ m/s}$ ). Esto es consistente con estimaciones previas [25].

El número de Reynolds para cualquier perforación del *cluster* ( $Re_{\text{perf}}$ ) se

<sup>3</sup>El número de Reynolds de la partícula lo vimos en la ec. 2.95. Aquella expresión parece distinta porque se encuentra afectada por  $\alpha_f$  y además la velocidad relativa ha sido expresada como  $|\mathbf{U}_f - \mathbf{v}_i|$ . En esta sección, el número de Reynolds de la partícula está definido considerando que la partícula se desplaza en el seno de un fluido en reposo, de modo que la velocidad relativa es simplemente la velocidad de la partícula (ver ec. (4.2)).

obtiene considerándola como un tubo, para un fluido newtoniano  $Re_{\text{perf}}$  está dado por

$$Re_{\text{perf}} = \frac{\rho_f U d_{\text{perf}}}{\mu}, \quad (4.4)$$

siendo  $d_{\text{perf}}$  el diámetro de la perforación. Por lo tanto, para obtener valores comparables del número de Reynolds, el modelo debe conservar el producto  $U d_{\text{perf}}$ . Para nuestra fractura de referencia, cada cluster de perforación tiene una sección transversal de  $1500 \text{ mm}^2$  y el caudal es  $0,1 \text{ m}^3/\text{s}$  (a través de dos medias alas de fractura con cuatro *clusters* cada una), de modo que la velocidad en cada *cluster* de perforaciones es de aproximadamente  $8.0 \text{ m/s}$ . Entonces, en la fractura de referencia  $Re_{\text{perf}}^{\text{ref}} = 6,4 \times 10^5$ , mientras que para el modelo  $Re_{\text{perf}}^{\text{mod}} = 4 \times 10^5$ . Esta diferencia del  $Re_{\text{perf}}$  para el modelo y la fractura de referencia se debe a que en el modelo la perforación representa a un clúster de punzados completo.

Debemos mencionar que la mayoría de los trabajos de simulación anteriores consideran velocidades en la perforación considerablemente menores que los valores sugeridos por el escalado. Típicamente se han utilizado velocidades de inyección de entre  $0,15$  y  $0,5 \text{ m/s}$  en cada punto de inyección ([9, 40, 41]). Además, otros estudios en lugar de considerar la inyección concentrada en puntos, consideran una inyección homogénea a lo largo de todo el alto de la fractura sin considerar el patrón complejo de flujo que se da en una inyección localizada ([87, 88]).

Nuestro modelo numérico ha sido escalado 1:50 dimensionalmente, tanto en la dirección horizontal como en la vertical con respecto a la fractura de referencia. Por lo tanto, el caudal deberá ser 100 veces más pequeño que en el campo para conservar la misma velocidad media del fluido en la celda. Recordemos que sólo simulamos media ala de fractura. Esto garantiza que los números de Reynolds son equivalentes a aquellos en el campo, y que la fractura del modelo y la del campo son dinámicamente semejantes. Por ejemplo, la relación entre la velocidad en dos puntos (campo y modelo) es siempre la misma. En nuestro caso, esta relación es 1. Como consecuencia, las escalas de tiempo  $[T] = [L]/[V]$  son reducidas 50 veces con respecto a la operación de campo. Esto significa que una operación completa que demora unos 100 min en el campo se corresponderá con una simulación de 2 min en el modelo. Las simulaciones que hemos realizado tienen una duración típica de unos 15 s, equivalente a una operación de 12 min en el campo.

## Capítulo 5

# Resultados

En este capítulo presentamos los resultados obtenidos para el transporte de agente de sostén en la celda plana definida en el cap. 4, de acuerdo a las condiciones de escalado descritas en el mismo capítulo. Parte de los resultados de este capítulo han sido publicados en la referencia [47].

### 5.1 Parámetros del modelo numérico

#### 5.1.1 Celda de estudio

Como ya vimos en la sec. 4.1, modelamos una fractura vertical plana mediante una celda de 800 mm de alto y 1600 mm de largo (ver Fig. 4.1). Esto corresponde a 1/50 de la dimensión lineal de la fractura de referencia según vimos en la sec. 4.2. La celda tiene un espesor de 1,5 veces el diámetro de partícula ( $d_p$ ) para evitar un alto ordenamiento bidimensional de las partículas (ver sec. 3.3). Aunque en el campo se obtienen fracturas de mayor espesor, dependiendo de las propiedades geomecánicas de la formación y de los fluidos de fractura, también pueden obtenerse fracturas más angostas e inclusive llegar al límite en el cual una monocapa de partículas mantiene a la fractura abierta. Se podría esperar que, dado el espesor de la celda, el modelo exacerbe el efecto de arenamiento (*screenout*), el cual hace referencia al atascamiento de las partículas en la fractura durante el bombeo que impide el avance del agente de sostén dentro de la formación. Sin embargo, Barree y Conway [89] demostraron que en celdas de caras paralelas usualmente no se crean arcos estables de AS, inclusive para anchos muy pequeños como los que hemos simulado aquí.

Como ya vimos en la sec. 4.1, la celda tiene 4 puntos de inyección en el borde izquierdo, cuyos centros están separados una distancia de 73 mm. Cada punto de inyección está conformado como una sección rectangular de 5

mm de alto y  $1,35 d_p$  de ancho. Estos puntos de inyección pueden posicionarse a tres diferentes alturas a lo largo del lado de inyección de la celda: (**inferior**) 68 mm, (**media**) 287 mm y (**superior**) 508 mm medidos desde la base de la celda hasta el punto de inyección más bajo. En el extremo derecho, se ubican 10 orificios de salida que poseen la misma dimensión que los orificios de entrada y permiten al fluido (pero no a las partículas) salir del dominio.

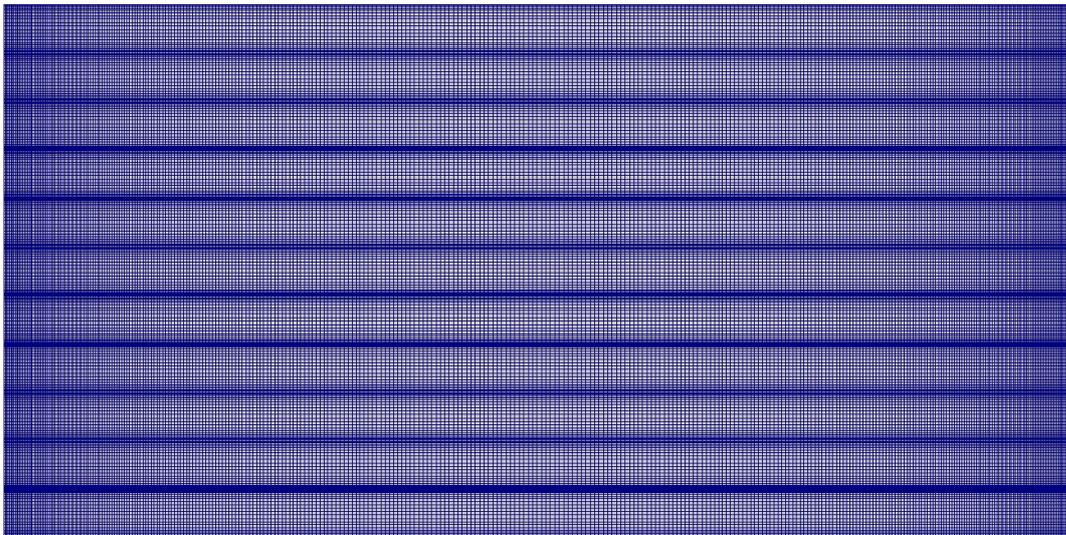
### 5.1.2 Condiciones de contorno

Respecto a las condiciones de contorno para el fluido, sobre los orificios de entrada se prescribe el valor de la velocidad ( $u = 8 \text{ m/s}$ ,  $v = 0$  y  $w = 0$ ) y se fija una condición de gradiente de presión nulo en la dirección normal a la superficie de los orificios<sup>1</sup> ( $\frac{\partial p}{\partial x} = 0$ ). Respecto a los orificios de salida se establece presión nula ( $p = 0$ ) y gradiente de velocidad nulo en la dirección normal a los orificios ( $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ ). Sobre el perímetro de la celda (sin los orificios de entrada y salida) se impone una condición de no deslizamiento ( $u, v$  y  $w = 0$ ). Los planos anterior y posterior poseen condiciones de simetría.

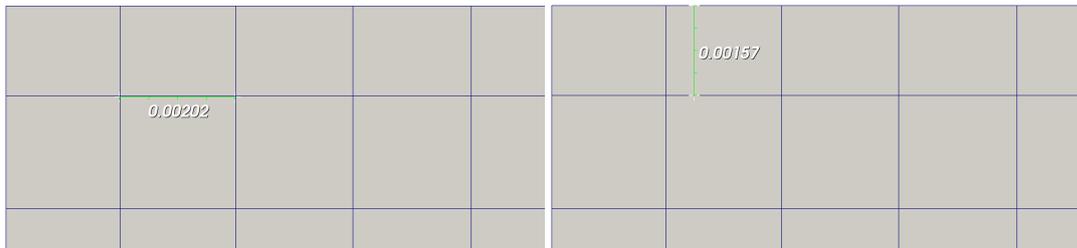
### 5.1.3 Discretización del dominio

El dominio de la celda plana es discretizado mediante elementos de volumen hexahédricos en dos niveles: una malla gruesa con 20090 elementos, y una fina con 205502 elementos. La malla fina se obtuvo subdividiendo los puntos de inyección y las zonas cercanas a las paredes físicas. En la Fig. 5.1 puede verse un detalle de la misma. La malla gruesa es usada en la mayoría de las simulaciones y la malla fina es sólo utilizada para validar los resultados. La malla utilizada es la representada en la Fig. 4.2, la misma posee elementos regulares cuya dimensión es 5 mm, lo cual se ajusta a las recomendaciones respecto la relación entre el tamaño de los elementos de malla y el diámetro de partícula  $d_p$ .

<sup>1</sup>La dirección normal a los orificios de entrada es la dirección dada por el eje  $x$ , de modo que  $\frac{\partial p}{\partial n} = \frac{\partial p}{\partial x} = 0$ .



(a) Vista general del dominio.



(b) Detalle de los elementos.

(c) Detalle de los elementos.

Figura 5.1: Malla estructurada con nivel de refinamiento alto utilizada para las simulaciones CFD-DEM, en el panel superior se muestra una vista general y en los inferiores un detalle de los elementos.

#### 5.1.4 Parámetros del fluido

El paso de tiempo para la simulación CFD ( $\Delta t_{\text{CFD}}$ ) varió entre  $1 \times 10^{-4}$  s y  $2,5 \times 10^{-4}$  s dependiendo de la malla utilizada, con el propósito de satisfacer la condición de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) y mantener la estabilidad numérica [50]. Para un problema 1D, la condición CFL se define como  $\text{CFL} = \frac{U \Delta t_{\text{CFD}}}{\Delta x}$ , donde  $U$  es la velocidad del fluido,  $\Delta t_{\text{CFD}}$  es el paso de tiempo y  $\Delta x$  es el tamaño de malla. Conceptualmente la condición de CFL puede comprenderse en 1D como una restricción en  $\Delta t$  para que una magnitud convectada no avance más de un paso de malla  $\Delta x$  por cada paso de tiempo. Siguiendo recomendaciones de otros autores, se procuró mantener al CFL debajo de 0,5 para mejorar la estabilidad y convergencia [90]. El fluido tiene una densidad  $\rho_f = 1000 \text{ kg/m}^3$  y una viscosidad dinámica  $\mu_f = 1 \text{ cP}$ .

### 5.1.5 Parámetros del acople

En simulaciones CFD-DEM, el valor de  $\Delta t_{\text{CFD}}$  se encuentra también limitado por el intervalo de acoplamiento (CI) entre la fase fluida y la fase sólida. Debe verificarse la condición  $\Delta t_{\text{CFD}} \leq \text{CI} \Delta t_{\text{DEM}}$ , donde  $\Delta t_{\text{DEM}}$  es el paso de tiempo usado para la resolución de las ecuaciones de movimiento de las partículas. El CI controla cuan acopladas se desarrollan ambas simulaciones, si  $\text{CI} = 1$  las simulaciones corren totalmente acopladas y en la medida que CI aumenta el grado de acoplamiento disminuye. Durante los pasos de simulación en los cuales no se calculan el intercambio de cantidad de movimiento entre las dos fases, cada una utiliza los valores correspondientes a la última actualización (ver sec 2.4.2). Idealmente las fases deberían acoplarse en cada paso de tiempo, de modo que  $\text{CI} = 1$ , pero ello volvería a la simulación muy lenta. En la práctica se recomienda utilizar un CI de entre 50 y 100 [68, 90]. Para el desarrollo de las simulaciones presentadas aquí se ha seleccionado  $\text{CI} = 50$ .

### 5.1.6 Parámetros de las partículas

El valor del paso de tiempo de la simulación DEM ( $\Delta t_{\text{DEM}}$ ) se fijó en  $5 \times 10^{-5}$  s para obtener valores aceptables de los tiempos críticos de Raleigh y Hertz.<sup>2</sup> El paso de tiempo crítico según Raleigh puede ser determinado mediante la expresión  $\Delta t_{\text{R}} = \frac{\pi R^*}{0,8766 + 0,163 \mathcal{V}} \sqrt{\frac{\rho_{\text{p}}}{G}}$  [91], siendo  $\rho_{\text{p}}$  la densidad de la partícula,  $G$  el módulo transversal o de cizalla,  $\mathcal{V}$  el coeficiente de Poisson y  $R^*$  el radio efectivo de contacto (ver sec. 2.3). No hay una expresión analítica para calcular el paso de tiempo crítico según Hertz a priori, pero puede estimarse durante la simulación para verificar que el valor de  $\Delta t_{\text{DEM}}$  sea apropiado mediante la expresión  $\Delta t_{\text{H}} = 2,87 \left( \frac{m^{*2}}{R^* E^{*2} V_{\text{max}}} \right)^{1/5}$ , siendo  $V_{\text{max}}$  la velocidad máxima observada durante una colisión. Se recomienda elegir un  $\Delta t_{\text{DEM}}$  no mayor al 10% de los tiempos críticos de Raleigh y Hertz para modelar apropiadamente las interacciones partícula-partícula y partícula-pared [92]. El valor elegido de  $\Delta t_{\text{DEM}}$  se mantuvo constante en todas las simulaciones, dado que la variación en las propiedades no requirió el uso de distintos  $\Delta t_{\text{DEM}}$  para los distintos tipos de AS.

<sup>2</sup>Las ondas de Rayleigh son un tipo de onda de superficial que viaja lo largo de la superficie de los sólidos. El tiempo crítico de Rayleigh se define como el tiempo de paso una onda de Rayleigh a lo largo de un grano. El tiempo crítico de Hertz, es el tiempo que dura una colisión entre dos partículas si solo se tiene en cuenta la parte conservativa de la interacción entre las partículas.

Cuatro tipos distintos de partículas fueron considerados: partículas de dos diámetros diferentes ( $d_p = 0,6$  y  $0,8$  mm) y de dos densidades diferentes ( $\rho_p = 2600$  kg/m<sup>3</sup> y  $3600$  kg/m<sup>3</sup>). Los diámetros de partícula seleccionados corresponden al diámetro medio de dos tamaños de tamiz: 20/40 (0,6 mm) y 16/30 (0,8 mm). Las densidades de partícula corresponden a valores típicos para arena (2600 kg/m<sup>3</sup>) y material cerámico (3600 kg/m<sup>3</sup>). Los diferentes tipos de AS usados son entonces: arena 20/40, arena 16/30, cerámico 20/40 y cerámico 16/30. Los parámetros de contacto  $k^n$ ,  $\gamma^n$ ,  $k^t$  y  $\gamma^t$  se determinaron con las propiedades mecánicas de ambos materiales mediante las expresiones que se mostraron en la sec. 2.3. Debido al hecho de que el fluido domina la dinámica del sistema, hemos elegido propiedades mecánicas promedio para ambos materiales (módulo de Young  $E = 5 \times 10^6$  Pa, relación de Poisson  $\nu = 0,5$ , coeficiente de restitución  $e = 0,7$  y coeficiente de fricción  $\mathcal{M} = 0,5$ ). El módulo de Young elegido es menor que los valores típicos para la arena o el cerámico. Esto es para obtener valores razonables de  $\Delta t_{DEM}$  y reducir el tiempo de cálculo. Debemos mencionar que se ha demostrado que esta práctica no tiene un impacto significativo en los resultados obtenidos para el modelado de flujos granulares (sin fluido) mediante DEM [93]. Es de esperar que el impacto sea aún menor en simulaciones CFD-DEM, como las nuestras, donde el fluido gobierna el proceso. La interacción de las partículas con las paredes del dominio está caracterizada con los mismos parámetros de interacción que corresponden a la interacción partícula-partícula. Debemos mencionar que particularmente para el coeficiente de restitución  $e$  hicimos un análisis de sensibilidad debido a que en la bibliografía encontramos autores que utilizan valores disímiles (ver sec. 5.2).

### 5.1.7 Protocolos de inyección

Realizamos cuatro simulaciones para cada posición del *cluster* de inyección (inferior, media y superior), una por cada posible combinación de tamaño de partícula y material (arena 16/30, arena 20/40, cerámico 16/30 y cerámico 20/40). En las entradas, el fluido es inyectado incrementando linealmente la velocidad desde 0 a 8 m/s en 1 s. Luego, durante 4 s, la inyección de fluido es mantenida a 8 m/s mientras un total de  $3 \times 10^5$  partículas de AS son inyectadas simultáneamente por los cuatro orificios de entrada. La inyección de partículas se realiza creando partículas justo delante de cada entrada de fluido a una tasa de inyección determinada. Finalmente, la velocidad del fluido de inyección es reducida a 0 m/s en 1 s. Luego de que la

inyección de fluido ha cesado se deja que la simulación avance lo suficiente a para que las partículas de AS se sedimenten en la celda. Esto toma alrededor de 10 s, dependiendo del tipo de AS y de la posición del *cluster* de inyección. El volumen promedio ocupado por las partículas de mayor tamaño es aproximadamente 77 % mayor que el volumen ocupado por las partículas más pequeñas, porque a pesar de que el espesor de la celda se ha escalado con el diámetro de la partícula ( $1,5 \times d_p$ ), la relación de volumen ocupado (o de superficie cubierta) sigue la relación  $r_1^2/r_2^2$ , siendo  $r_1$  y  $r_2$  los radios de partícula para cada tamaño de malla.

Por otro lado, se realizaron tres simulaciones adicionales inyectando dos tipos de AS del mismo calibre (tamiz), pero diferente material, uno luego del otro y también simultáneamente como una mezcla. En una simulación, se inyecta AS cerámico luego de que toda la arena ha sido inyectada dentro de la celda y en otra simulación la arena es inyectada luego de que todo el AS cerámico ha sido inyectado. Finalmente, ambos tipos de AS son inyectados simultáneamente. Para todas las simulaciones,  $1,5 \times 10^5$  partículas de cada tipo son inyectadas con la misma tasa de inyección.

## 5.2 Análisis de sensibilidad

Para verificar que el tamaño de malla CFD es apropiado, desarrollamos un análisis de sensibilidad del modelo numérico. Se utilizaron dos niveles de refinamiento como ya vimos en la sec. 5.1. Los resultados fueron comparados visualizando el campo de velocidades y graficando el perfil de duna luego de la decantación en ambos casos. El perfil de duna es extraído de las coordenadas de las partículas decantadas, dividiendo la longitud de la celda en pequeños volúmenes (*bins*) tal como se describe en el apéndice A.

En la Fig. 5.2a, podemos ver la duna final para dos simulaciones usando la arena 16/30 inyectada para la posición media del *cluster* de inyección obtenida con los dos niveles de refinamiento de malla. Es claro que los perfiles de duna obtenidos en ambas simulaciones son muy similares, y que una malla de mayor refinamiento no es requerida para el propósito de este estudio. No hemos observado diferencias cualitativas o cuantitativas en los patrones de flujo entre la malla fina y la malla gruesa, sugiriendo de nuevo que los resultados obtenidos son independientes de la malla.

Dado que las partículas no pueden salir del dominio, hemos realizado simulaciones usando una celda un 50 % más larga (2400 mm en lugar de 1600 mm) para evaluar el efecto de la longitud del dominio en la deposición de AS.

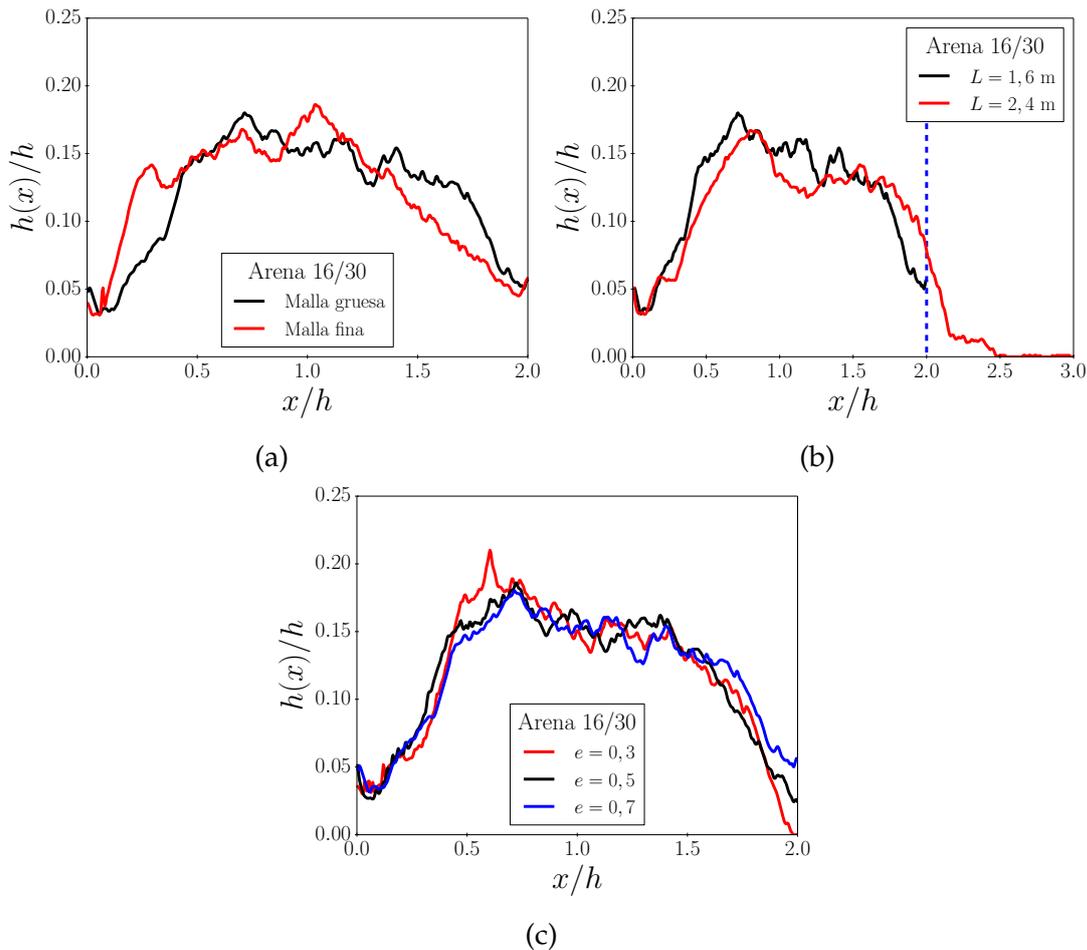


Figura 5.2: Perfiles de duna luego de la sedimentación del AS con el *cluster* de inyección en la zona media de la celda usando arena 16/30. Las longitudes se encuentran normalizadas por la altura de la celda  $h = 0,8$  m. (A) Negro corresponde al perfil obtenido con la malla gruesa y rojo al obtenido con la refinada; (B) En negro el perfil obtenido con la celda de 1600 mm de longitud y en rojo el obtenido con la celda de 2400 mm. La línea vertical punteada indica la frontera para la celda de 1.6 m de largo; (C) El perfil rojo se obtuvo para  $e = 0,3$ , el negro para  $e = 0,5$  y el azul para  $e = 0,7$ .

El dominio se ha discretizado en 205502 elementos, manteniendo el mismo nivel de refinamiento utilizado en la celda original. En la Fig. 5.2b, mostramos la duna decantada para la arena 16/30 obtenida con la misma configuración utilizada en sec. 5.5 excepto por la longitud de la celda. Podemos ver que al utilizar una celda más larga obtenemos dunas muy similares. Esto indica que la forma de la duna depositada es bastante insensible a la longitud de la celda, al menos para longitudes mayores a 1600 mm.

El coeficiente de restitución utilizado en las simulaciones fué seleccionado en base a la literatura. En nuestro caso adoptamos un valor ( $e = 0,7$ )

intermedio al que varios autores reportan. Tanto Tsuji *et al.* [36] como Xu *et al.* [37] usaron un coeficiente de restitución ligeramente mayor ( $e = 0,9$ ), mientras que Zeng *et al.* [44] utilizaron uno un tanto menor ( $e = 0,5$ ). Experimentalmente, Mack *et al.* [19] han medido el coeficiente de restitución para AS en dos condiciones: seco y mojado; y obtuvo reducciones significativas para  $e$  cuando las partículas están inmersas en un fluido. Nosotros adoptamos un valor representativo para ambos materiales “en seco”, dado que el efecto del fluido está tenido en cuenta justamente por el acople. Sin embargo, utilizando diferentes coeficientes de restitución, hemos encontrado que este parámetro de la interacción partícula–partícula tiene un impacto muy bajo en la geometría final de la duna (ver Fig. 5.2(c)).

Se concluye finalmente que la longitud de la celda de simulación y el coeficiente de restitución no son parámetros a los que el transporte de AS sea particularmente sensible. De modo que en el resto de la tesis se utilizará  $e = 0,7$  y  $L = 1600$  mm. Tampoco se ve que el tamaño de malla tenga un impacto importante para el transporte del AS, por lo que en el resto de la tesis se utilizará solo la malla con 120090 elementos.

### 5.3 Efecto de la velocidad de inyección

Si bien no es el enfoque principal del presente trabajo estudiar el efecto de la velocidad de inyección del AS, se decidió explorar el efecto que tiene dicha variación sobre la duna final. Se tomó como base el caso escalado respecto de una operación de campo y se incrementó y disminuyó la velocidad de inyección un 50%. Se obtuvieron así tres simulaciones que solo difieren en la velocidad de inyección del agente de sostén  $u = 4, 8$  y  $12$  m/s. En la Fig. 5.3 vemos los perfiles de duna obtenidos luego del asentamiento. Como es esperable, la velocidad de inyección tiene un fuerte efecto sobre la forma final de la duna. Cuando  $u = 4$  m/s la duna se posiciona cerca de los puntos de inyección debido a que el fluido no tiene la suficiente capacidad de transporte para depositar el AS en el interior de la duna. Cuando  $u = 8$  m/s la duna se posiciona en el centro de la celda dado que en estas condiciones el fluido tiene la suficiente capacidad para transportar el AS hacia el interior de la celda. Finalmente, para  $u = 12$  m/s vemos que el AS forma una duna hacia el extremo derecho de la celda dado que el flujo es tan intenso que las partículas del AS alcanzan el final del dominio donde finalmente sedimentan. El comportamiento anteriormente descrito se alinea con resultados reportados por otros autores. Por ejemplo Liu reporta una gran dependencia de la

posición inicial de la duna con el caudal de bombeo [94]. Sin embargo también muestra que la forma y posición de la misma puede modificarse con un posterior bombeo a caudales elevados. En un trabajo realizado mediante CFD-DEM, Wang *et al.* muestran esta dependencia utilizando velocidades de inyección de entre 0,1 y 0,4 m/s en celdas pequeñas (0,5 m de largo y 0,08 m de alto) utilizando partículas de AS de 2 mm de diámetro [95]. Debido a las bajas velocidades utilizadas, la duna se ve afectada principalmente en su posición y no tanto en su forma final. Finalmente, Sahai *et al.* demostraron que el caudal controla fuertemente el posicionamiento de la duna de AS tanto en celdas experimentales simples, como en celdas complejas con bifurcaciones [25].

Si bien en las operaciones de campo usualmente el caudal de inyección, y por ende la velocidad, no es un parámetro que se modifique con frecuencia, el mismo podría considerarse para un posterior estudio dado que altera sustancialmente los perfiles de duna obtenidos.

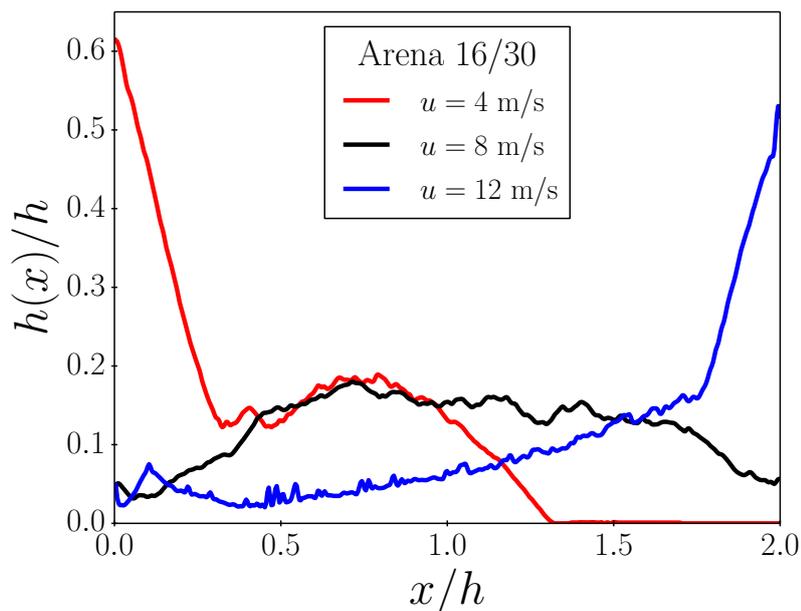


Figura 5.3: Perfiles de duna luego de la sedimentación del AS con el cluster de inyección en la zona media de la celda usando arena 16/30. Las longitudes se encuentran normalizadas por la altura de la celda  $h = 0,8$  m. Resultados para diferentes valores de velocidad de inyección:  $u = 4$  m/s (rojo),  $u = 8$  m/s (negro) y  $u = 12$  m/s (azul).

## 5.4 Efecto de la viscosidad del fluido

En la actualidad, por cuestiones de costo, la mayoría de las operaciones se realizan utilizando *slickwater* como fluido de fractura. No obstante, resulta de interés explorar que efecto tiene sobre la duna del AS la viscosidad del fluido de fractura. Al igual que en la sección anterior, se tomó como base el caso escalado respecto de una operación de campo. Se afectó a dicha viscosidad por un factor 10, de modo que se obtuvieron tres casos idénticos que solo difieren en la viscosidad del fluido  $\mu = 0,1, 1$  y  $10$  cP. En la Fig. 5.4 vemos los perfiles de duna obtenidos luego del asentamiento, como es de esperar, la viscosidad tiene un fuerte efecto sobre la posición final de la duna. Cuando  $\mu = 0,1$  cP la duna se posiciona cerca de los puntos de inyección debido a que el fluido no tiene la suficiente capacidad de transporte para depositar el AS en el interior de la duna. Cuando  $\mu = 1$  cP la duna se posiciona en el centro de la celda dado que en estas condiciones el fluido tiene la suficiente capacidad para transportar el AS hacia el interior de la celda. Finalmente, para  $\mu = 10$  cP vemos que el AS forma una duna hacia el extremo derecho de la celda dado que el flujo es tan intenso que las partículas de AS alcanzan el final del dominio donde finalmente sedimentan. El efecto de la viscosidad sobre la forma de la duna también ha sido reportado previamente. Por ejemplo, Brannon *et al.* analizaron el efecto que tiene la viscosidad sobre la duna formada sobre distintos AS. Inyectaron fluidos de distintas viscosidades (de 1 a 30 cp) utilizando un rango de velocidades de entre 0,1 y 0,8 m/s en una celda (4,8 de largo y 0,56 m de alto) sobre la cual analizaron la duna final depositada en estado de equilibrio [96]. Utilizando *slickwater* obtuvieron dunas considerables, mientras que al bombear los fluidos más viscosos (30 cp) registraron un barrido casi completo de la duna. Este efecto se incrementaba en AS de menor tamaño o densidad. Debemos mencionar que si bien el rango de viscosidad estudiado es acotado, se observa el efecto esperado sobre el posicionamiento de la duna del AS. Valores más extremos acentuarían el efecto y no han sido explorados debido principalmente a dos inconvenientes: problemas de inestabilidad numérica al utilizar viscosidades muy bajas o elevadas y tiempos de simulación muy elevados requeridos para modelar la decantación en fluidos muy viscosos[40].

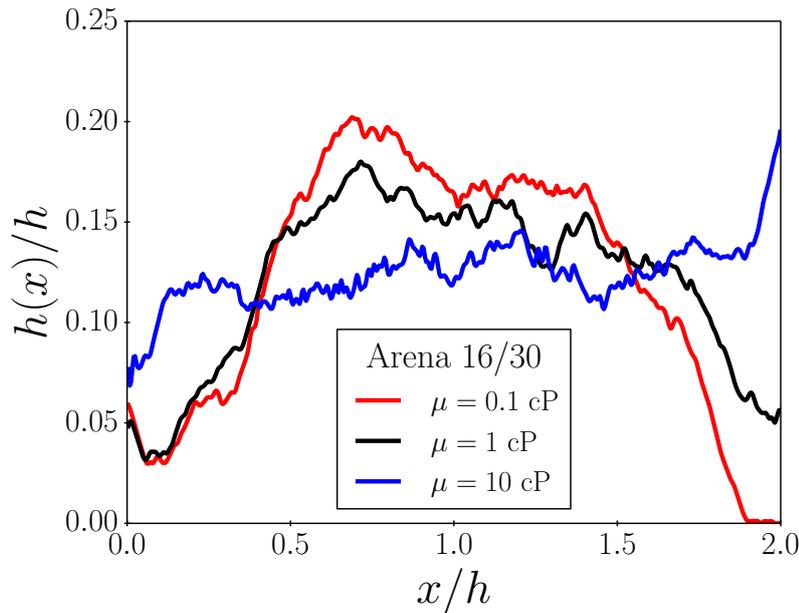


Figura 5.4: Perfiles de duna luego de la sedimentación del AS con el cluster de inyección en la zona media de la celda usando arena 16/30. Las longitudes se encuentran normalizadas por la altura de la celda  $h = 0,8$  m. Resultados par diferentes valores de viscosidad del fluido:  $\mu = 0,1$ cp (rojo),  $\mu = 1$ cp (negro) y  $\mu = 10$ cp (azul).

## 5.5 Efecto de la posición de los *clusters* de inyección

En la Fig. (5.5), mostramos diferentes instantáneas de las simulaciones con arena 16/30 para las tres posiciones diferentes del *cluster* de inyección. La columna izquierda corresponde a la inyección inferior, la central a la inyección media y la derecha a la inyección superior. Para los tres tipos de inyección, durante esta etapa inicial, vemos que el transporte del AS se encuentra dominado por dos mecanismos: la decantación de las partículas y el arrastre del fluido en la zona de los punzados (ver primer fila de la Fig. (5.5)). La inyección inferior (ver columna izquierda de Fig. (5.5)) produce un vórtice de transporte antihorario relativamente pequeño. Las partículas tienden inicialmente a depositarse en una duna de forma triangular cerca de los puntos de inyección. En una etapa posterior, el proppant es transportado hacia el interior de la celda. La punta de la duna se posiciona finalmente dentro de la primer mitad de la celda.

La inyección media crea una corriente de partículas central que produce una duna más homogénea a lo largo de la longitud de la celda (ver columna central de Fig. (5.5)).

La inyección superior induce un vórtice de transporte horario también produciendo un decantamiento homogéneo a lo largo de la celda (ver columna derecha de Fig. (5.5)). Estos resultados se encuentran en línea con aquellos reportados por Zhang *et al.* [40]. En líneas generales, Zhang *et al.* reportaron que una inyección posicionada en la zona baja produce una duna cerca del pozo (zona de inyección), mientras que una inyección en la zona superior deriva en una duna más homogénea que se deposita más lejos en la fractura.

Además de la diferencia en el posicionamiento y la forma de la duna final entre los tres tipos de inyección, vemos que la posición de los puntos de inyección tiene un efecto en la dinámica del proceso. En la inyección inferior las partículas comienzan a asentarse en el fondo de la celda en el inicio del proceso de bombeo. Por el contrario, tanto en la inyección media como en la superior, las partículas se encuentran suspendidas en la etapa inicial (ver primer fila de Fig. (5.5)). Este comportamiento se mantiene a lo largo de toda la inyección. Podemos ver a los 2,5 s que, en el caso de la inyección superior, las partículas no se han depositado todavía, sin embargo en la inyección inferior ya se ha comenzado a formar una duna y en la inyección media las partículas comienzan a depositarse en el fondo (ver segunda fila de Fig. (5.5)). A los 5 s finaliza el proceso de inyección, con lo cual para finalizar el proceso solo falta que las partículas que se encuentran en suspensión sedimenten. El caso de la inyección inferior es la que en esta instancia produce la duna de mayor tamaño debido a que un menor número de partículas se encuentran en suspensión. Por el contrario, para la inyección superior la mayoría de las partículas se encuentran en suspensión, habiéndose depositado sólo algunas (ver tercer fila de Fig. (5.5)). Finalmente para  $t = 35$  s vemos que todas las partículas han decantado. Para la inyección inferior las partículas se han depositado formando una duna que es más alta en la primera mitad de la celda. Los resultados obtenidos para la inyección media y superior muestran una capa casi homogénea de partículas a lo largo de toda la celda (ver cuarta fila de Fig. (5.5)).

Los resultados anteriormente descritos están en acuerdo cualitativo con los resultados reportados por varios autores, pese a que los sistemas y/o condiciones difieran significativamente. Wang *et al.* han reportado una dinámica similar sobre celdas pequeñas (0,5 m de largo y 0,15 m de alto) mediante simulación CFD-DEM. Cuando inyectan AS en el extremo superior de la celda, las partículas de AS se depositan cerca de los orificios de inyección. Luego, sobre dicha duna inicial, se sedimentan el resto de las partículas inyectadas. Sin embargo, dado que utilizan velocidades de inyección bajas (0,5 m/s) el

efecto de decantación tiene mayor preponderancia en el proceso que el que se observa en nuestras simulaciones (Fig. (5.5)). En otro trabajo, también basado en CFD-DEM, Zhang *et al.* utilizaron una celda pequeña (0,3 m de largo y 0,09 m de alto) y una velocidad de inyección baja (0,5 m/s) tal como vimos en la sec. 3.3. Pese a las diferencias mencionadas, pero la dinámica del flujo y el transporte de partículas son consistentes al menos en la etapa inicial cuando una duna considerable ya se ha formado [41]. Igualmente, pese a la concordancia en los resultados, debemos mencionar que no obtenemos el desarrollo de una duna dual en la etapa inicial. Esta diferencia es probablemente debido al hecho de que este modelo cuenta con cuatro puntos de inyección en lugar de solo uno. Esto cambia el modo en que la corriente principal de transporte se desarrolla. En nuestro caso, los cuatro puntos de inyección producen una corriente de transporte más ancha que la reportada por Zhang [41], lo que induce una duna más homogénea. Los resultados presentados en la Fig. (5.5) también se alinean con los resultados experimentales reportados por Liu [94]. A pesar de que la celda utilizada por Liu tiene una longitud que duplica nuestra celda (3 m) y la velocidad de inyección es realmente baja (0,4 m/s), la duna depositada y la dinámica de flujo están en acuerdo cualitativo. Los resultados experimentales de Liu muestran que, en una etapa inicial, el AS se sedimenta cerca de los puntos de inyección. Posteriormente, el subsiguiente ingreso de partículas produce la formación de la duna propiamente dicha hasta alcanzar instancias donde el proceso es gobernado por la *traction carpet*.

El hecho de que en la etapa inicial la dinámica de las partículas se encuentra gobernada por dos mecanismos (arrastre del fluido y decantación) ya ha sido reportado anteriormente. Alotaibi *et al.* ha analizado las distintas etapas que gobiernan el proceso de transporte de AS utilizando celdas experimentales simples y con bifurcaciones. Describen que el proceso inicia con una decantación, seguida por un proceso de crecimiento de la duna en altura y luego en extensión [24]. Liu ha reportado procesos equivalentes también mediante celdas experimentales de la misma naturaleza pero de mayor dimensión [94]. Por último debemos mencionar otro estudio de Zhang *et al.* en el cual se hace una descripción de la micromecánica del transporte de AS detallando cuales son los mecanismos de transporte preponderantes en las distintas etapas [9].

En la Fig. (5.6), mostramos los resultados para AS cerámico de malla 16/30. Vemos una dinámica de transporte de partículas similar a la obtenida en la Fig. (5.5). Sin embargo, dado que el cerámico es más denso que la

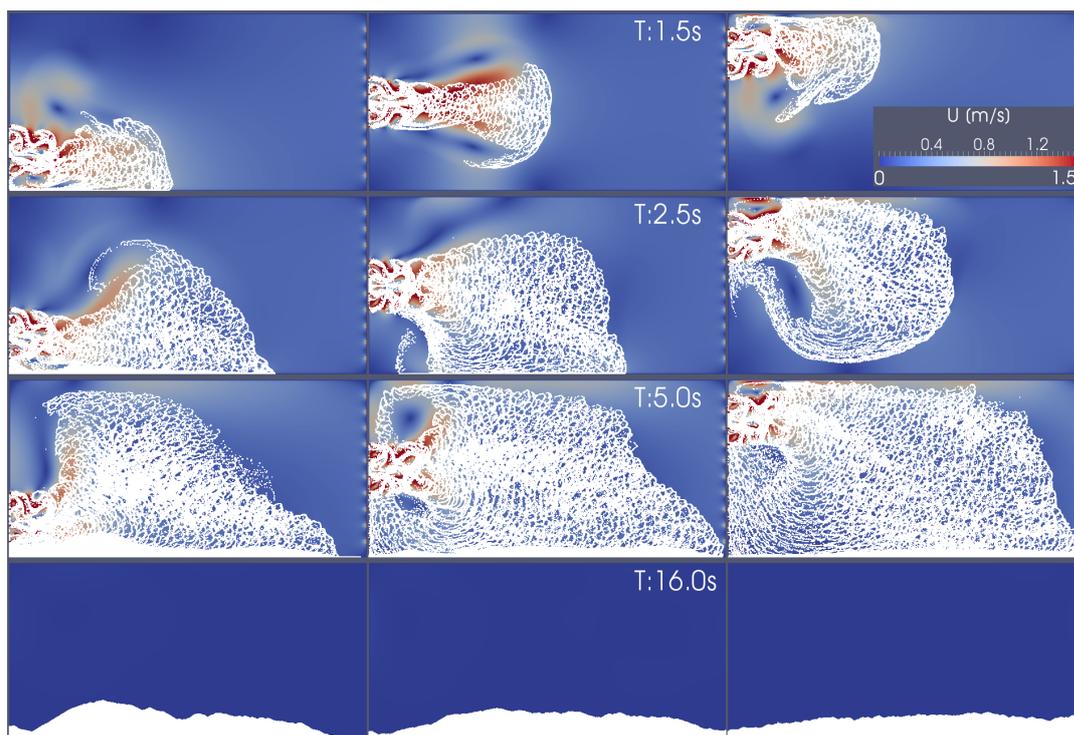


Figura 5.5: Instantáneas de la simulación para la inyección inferior (columna izquierda), media (columna media) y superior (columna derecha) a diferentes tiempos durante la inyección de arena 16/30. Cada fila corresponde a un tiempo indicado en las imágenes de la columna central. La escala de color corresponde a la magnitud de la velocidad del fluido en m/s. Los puntos blancos representan las partículas del AS.

arena ( $3600 \text{ kg/m}^3$  y  $2600 \text{ kg/m}^3$ , respectivamente), las partículas cerámicas sedimentan con mayor rapidez razón por la cual para  $t = 16 \text{ s}$  la duna no alcanza el extremo derecho de la celda. Como es de esperar, en el caso del AS cerámico, para todas las posiciones del *cluster* de inyección (inferior, media y superior) la duna se posiciona más cerca a los puntos de inyección y no alcanza el extremo derecho de la celda. Estos resultados son consistentes con los publicados por varios autores [25, 40, 41, 95, 96]. En líneas generales, reportaron que las partículas más grandes (o más pesadas) del AS tienden a depositarse cerca del pozo en la etapa inicial. En contraste, partículas más pequeñas o más livianas pueden ser arrastradas más profundo dentro de la fractura. Esto se ha verificado inyectando arena de diferentes mallas dentro de una celda experimental y detectando que los granos de mayor tamaño sedimentaban cerca de la zona de inyección y los granos más pequeños fueron transportados por el fluido más allá de los límites del dispositivo experimental [25]. El mismo efecto se ha reportado en simulaciones CFD-DEM analizando el efecto que tiene sobre la duna sedimentada tanto el tamaño como

la densidad de las partículas inyectadas [40, 41, 95]. Por último, también Brannon *et al.* han analizado la altura de equilibrio que posee una duna en una celda experimental cuando se utilizan distintos tipos de AS, como es de esperarse, cuando se utilizan partículas de baja densidad la altura de la duna disminuye debido a que el fluido erosiona la capa exterior de la duna [96].

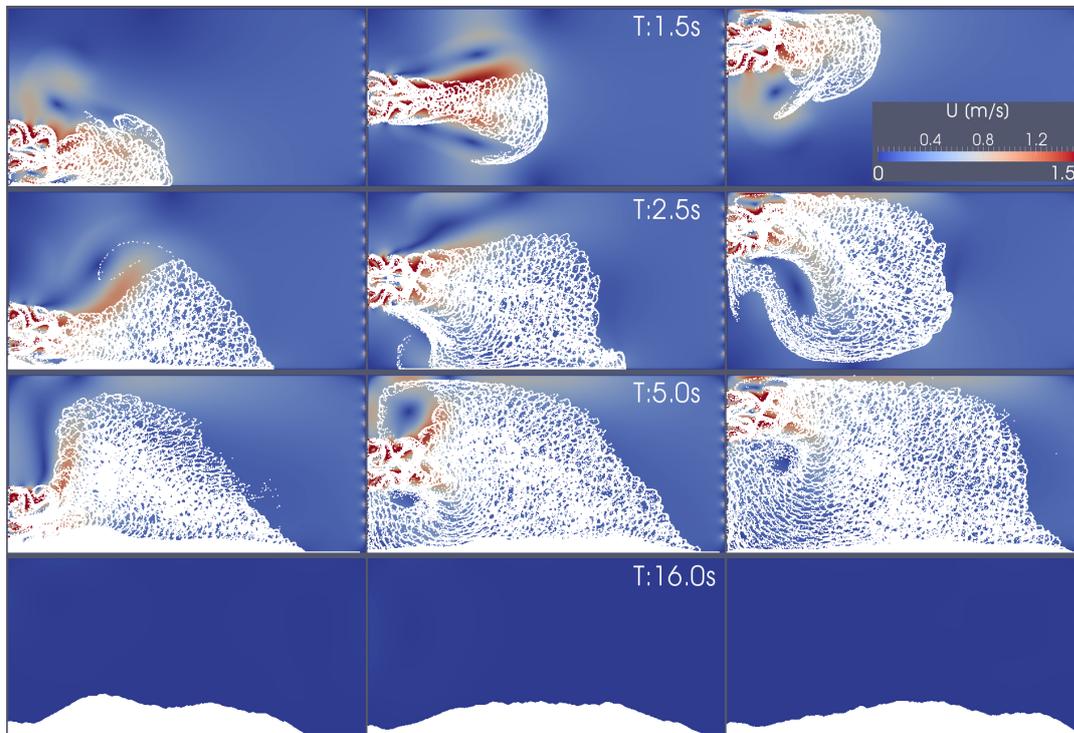


Figura 5.6: Instantáneas de la simulación para la inyección inferior (columna izquierda), media (columna media) y superior (columna derecha) a diferentes tiempos durante la inyección de AS cerámico 16/30. Cada fila corresponde a un tiempo indicado en las imágenes de la columna central. La escala de color corresponde a la magnitud de la velocidad del fluido en m/s.

Los puntos blancos representan las partículas del AS.

Para comparar los resultados cuantitativamente, hemos extraído los perfiles finales de la duna (ver apéndice A). En la Fig. (5.7a) podemos ver el perfil de duna para arena 16/30 utilizando las tres posiciones del *cluster* de inyección. Es claro de estas curvas que la inyección inferior produce una duna cerca de los puntos de inyección y que las inyecciones media y superior generan una deposición homogénea de proppant a lo largo de la celda. En la Fig. (5.7b) vemos los mismos perfiles para AS cerámico de malla 16/30. Como ya vimos en la Fig. (5.6), la inyección inferior produce, también para el AS cerámico, una duna más cerca a los puntos de inyección de lo que producen las inyecciones media y superior.

Entre las Figs. (5.7c) y (5.7e) vemos el efecto de la densidad de AS en el perfil final de duna. Para las tres posiciones del *cluster* de inyección, aumentar la densidad del AS resulta en una duna ubicada más cerca de la entrada de la celda. Sin embargo, este efecto es un tanto sutil.

Finalmente, repetimos la simulación de las tres posiciones de inyección para la malla de AS 20/40 utilizando ambos materiales. Los perfiles de duna pueden verse en la Fig. (5.8). Vemos que para ambos casos, arena o AS cerámico, sólo la inyección inferior produce un claro pico en la duna. Luego, con la inyección media y superior, para ambos materiales, se obtiene una capa más bien plana de partículas en el fondo de la celda. Esto resulta razonable dado que las partículas más pequeñas tienden a sedimentar más lento, de modo que se da más tiempo a que las partículas se distribuyan homogéneamente a lo largo de la celda.

## 5.6 Inyección de mezclas

El efecto de inyectar arena o AS cerámico de malla 16/30 para la posición media en diferentes etapas puede verse en las instantáneas de la Fig. (5.9). Inyectando ambos tipos de AS simultáneamente se produce una mezcla homogénea de partículas a lo largo de la celda (ver columna izquierda de la Fig. (5.9)). La inyección de AS cerámico primero conduce a una capa de partículas cerámicas en el fondo de la celda sobre la cual una capa de arena es depositada (ver columna central de la Fig. (5.9)). A su vez, inyectando arena primero (práctica habitual en el campo) conduce a la situación opuesta. Una capa homogénea de arena en el fondo de la celda sobre la cual las partículas cerámicas se depositan (ver columna derecha de la Fig. (5.9)). En la condición final podemos ver, dada su menor densidad, que las partículas de arena pueden ser transportadas con mayor facilidad hacia el interior de la celda, creando un depósito mayor en el extremo derecho de la celda (comparar las áreas de arena y AS cerámico en la columna central y derecha de la Fig. (5.9)). Debido a la dinámica del flujo, algunas de las partículas inyectadas primero permanecen en suspensión y luego al sedimentar crean una segunda capa de material sobre la duna original de arena o AS cerámico (ver columna central y derecha de la Fig. (5.9) a los 16 s). Un comportamiento similar al que puede observarse en la Fig. (5.9) ha sido reportado por Hu *et al.* [97]. Si bien los autores han utilizado velocidades muy bajas (0,05 – 0,2 m/s) y dos tipos de partículas considerablemente más grandes (3 y 6 mm), han observado que

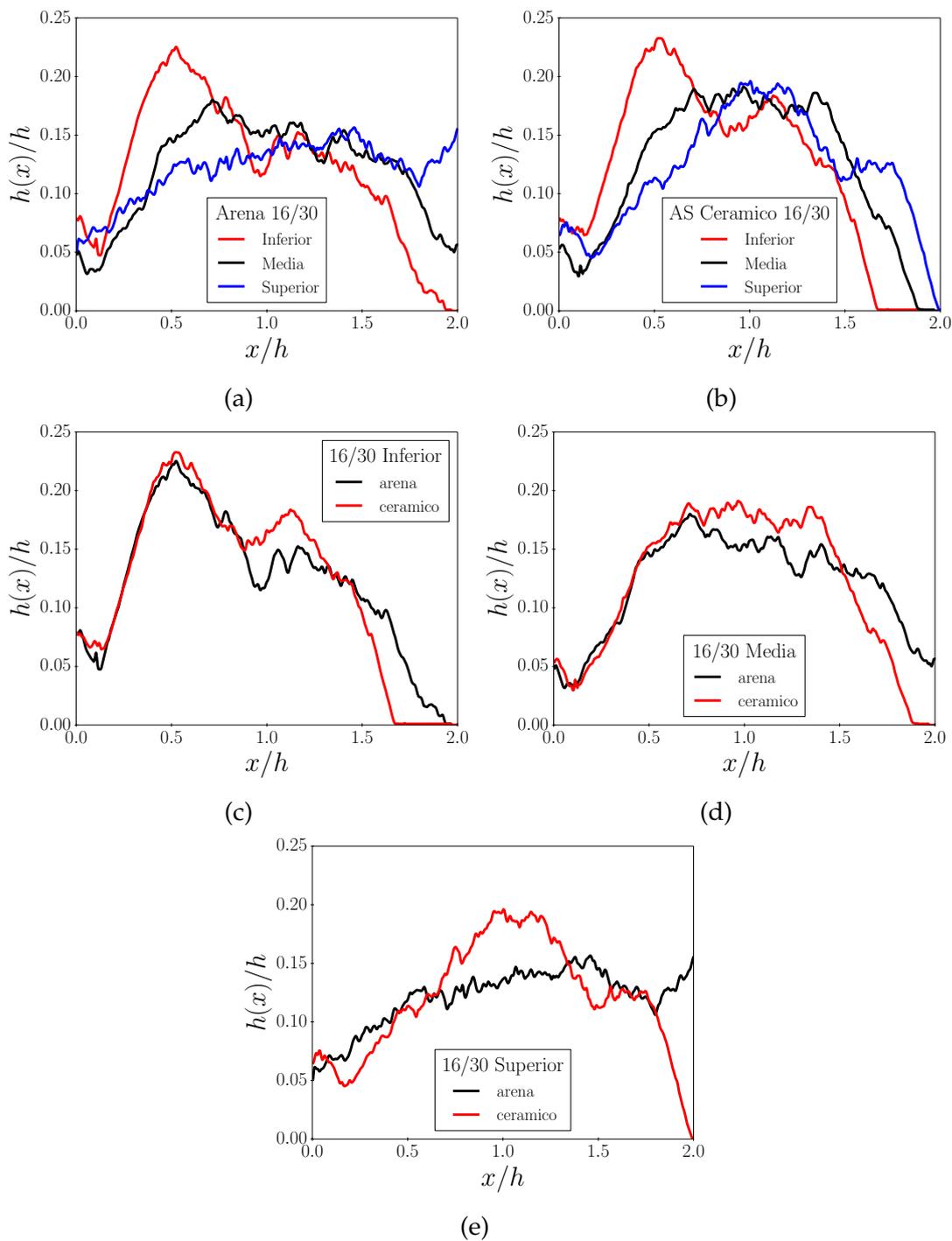


Figura 5.7: Perfiles de duna obtenidos para AS de ambos materiales y malla 16/30 usando las tres posiciones posibles del *cluster* de inyección. (a)–(b) Posiciones del *cluster* de inyección: inferior (rojo), media (negro) y superior (azul). Estos perfiles corresponden a las instantáneas de la fila inferior mostradas en las Fig. (5.5) y (5.6). (c)–(e) Comparación entre arena (rojo) y cerámico (negro) para la inyección inferior, media y superior, respectivamente. Las longitudes se encuentran escaladas con la altura de la celda  $h = 0,8$  m.

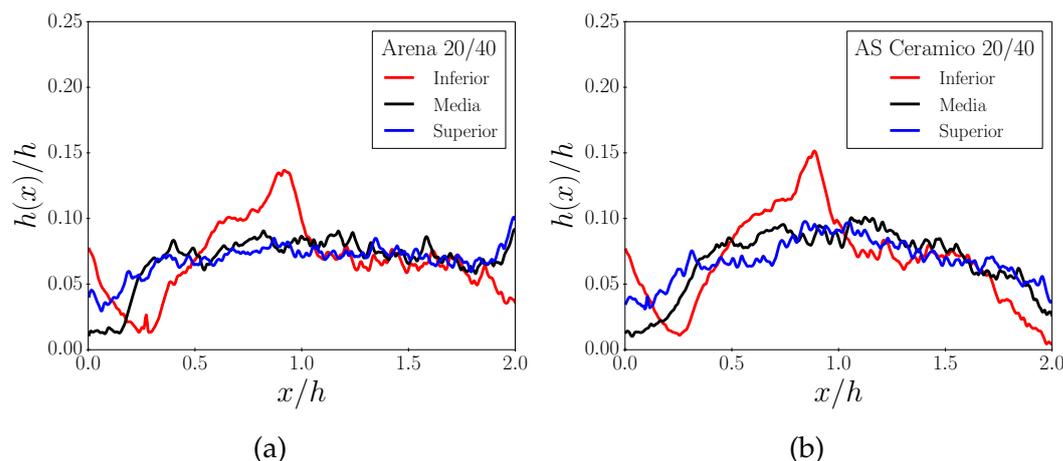


Figura 5.8: Perfiles de duna para arena (a) y AS cerámico (b) para las tres posiciones del *cluster* de inyección y malla 20/40: inyección inferior (rojo), media (negro) y superior (azul). Las longitudes se encuentran escaladas con la altura de la celda  $h = 0,8$  m.

cuando las partículas de más pequeñas son inyectadas primero, la duna alcanza posiciones más alejadas de los puntos de inyección. En otro trabajo, Wang *et al.* analizaron mediante simulaciones CFD-DEM la segregación producida cuando AS de distinto diámetro o densidad son inyectados en una celda. Concluyeron que la segregación es producida por la decantación y es más acentuada cuando las partículas son más disímiles. [95].

En la Fig. (5.10) podemos ver que el perfil de duna obtenido para diferentes protocolos de inyección (inyección simultánea, cerámico–arena y arena–cerámico) es bastante similar. La diferencia más significativa se obtiene cuando la arena es inyectada antes que el AS cerámico. En este caso, la arena se deposita más hacia el interior de la fractura. Podemos decir que bajo estas condiciones, cambiar el protocolo de inyección sólo modifica el grado de mezcla y distribución de los distintos tipos de agente de sostén y no el perfil de la duna.

Para medir el grado de mezcla de los distintos tipos de agente de sostén, usamos el concepto de entropía de mezcla ( $S$ ) [45], el cual permite medir cuantitativamente en una región del espacio cuan mezclados se encuentran dos o más tipos de partículas. La entropía de mezcla puede parecer un método complejo para medir el grado de mezcla cuando solo hay dos tipos de partículas, sin embargo puede ser muy poderoso en casos con más generales con un mayor tipo de partículas. En el apéndice B se presenta la definición de entropía de mezcla y el proceso mediante el cual se obtuvieron los perfiles de entropía a lo largo de la longitud de la celda. Para una región determinada, la

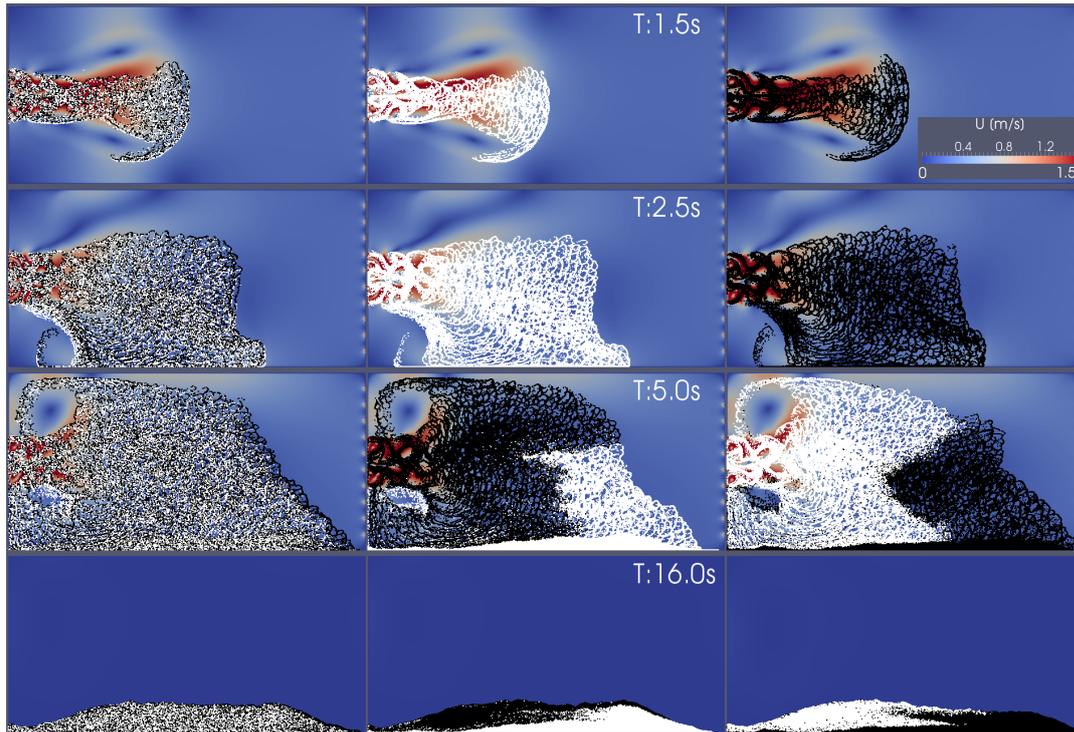


Figura 5.9: Instantáneas de la simulación para la inyección media usando tres estrategias de mezclado distintas de arena 16/30 (puntos negros) y proppant cerámico 16/30 (puntos blancos): inyección simultánea (columna izquierda), proppant cerámico primero y luego arena (columna central) y arena primero seguida de proppant cerámico (columna derecha). La escala de colores corresponde a la magnitud de la velocidad del fluido en m/s.

entropía de la mezcla será máxima cuando haya igual número de partículas de cada tipo. Si solo hay partículas de un solo tipo, la entropía de la mezcla será cero. Los valores reportados de entropía  $S$  se han normalizado con el valor de entropía máxima  $S_{\max}$ , de modo que  $0 \leq S \leq 1$ .

En la columna izquierda de la Fig. (5.11) podemos ver los mapas normalizados de  $S$  a lo largo de toda la duna. Como se espera, el caso de inyección simultánea (Fig. (5.11a)) presenta un alto valor de entropía de mezcla en toda la duna. Esto coincide con las instantáneas de la Fig. (5.9), donde se aprecia que con la inyección simultánea ambos tipos de partículas se encuentran suamemente mezcladas. Por el contrario, para los otros procedimientos de inyección (Fig. (5.11c) y 5.11e) se obtiene entropía baja a lo largo de la mayor parte de la duna, salvo en las interfaces entre un tipo y otro de AS. En la columna derecha de la Fig. (5.11) se han representado los perfiles de entropía a lo largo de la celda, los mismos están en línea con el grado de mezcla aparente observado a simple vista en las instantáneas de la simulación (ver

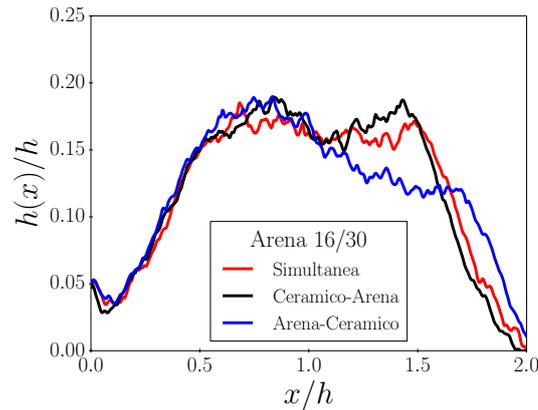


Figura 5.10: Perfiles de duna para la inyección media usando tres estrategias diferentes de mezclado de arena y AS cerámico de malla 16/30. La curva roja corresponde a la inyección simultánea de ambos tipos de AS, negro corresponde a la inyección cerámico-arena y azul corresponde a la inyección arena-cerámico. Las longitudes se encuentran escaladas con la altura de la celda  $h = 0,8$  m.

Fig. (5.9)) y también en los mapas de entropía de la columna izquierda.

Junto con los perfiles de entropía hemos graficado la concentración de cada tipo de AS calculada como  $x_i = N_i/N_T$ , siendo  $N_i$  el número de partículas de tipo  $i$  y  $N_T$  el número total de partículas en una dada región del sistema. Vemos que cuando se inyecta simultáneamente ambos tipos de partículas se obtiene una alta entropía de mezcla a lo largo de toda la celda, que solamente disminuye hacia el extremo derecho. Es por esto que las fracciones ( $x_i$ ) se mantienen alrededor de 0,5 a lo largo de gran parte de la celda, sólo mostrando segregación en el extremo derecho, donde la mayoría de las partículas son de arena. Para la inyección cerámico-arena, vemos una pequeña región cerca de la entrada de la celda con una alta entropía de mezcla. Luego, vemos un decaimiento relativamente continuo a lo largo de la celda excepto por un pico a  $x/h = 1,25$ , donde se obtiene una mezcla más o menos homogénea de partículas. También vemos que en el extremo derecho de la celda hay un incremento en la cantidad de material cerámico, lo cual hace disminuir el valor de la entropía de mezcla. Esto se debe a que el AS cerámico fue inyectado primero (ver columna central de la Fig. (5.9)). Cuando se inyecta arena primero, se obtiene un valor alto de entropía cerca de la entrada. Luego vemos un decaimiento seguido de un incremento alrededor de  $x/h = 1,0$ . En el extremo derecho de la celda la fracción de arena alcanza el máximo debido a que la arena fue inyectada primero (ver columna derecha de la Fig. (5.9)) y consecuentemente la entropía de la mezcla cae a cero.

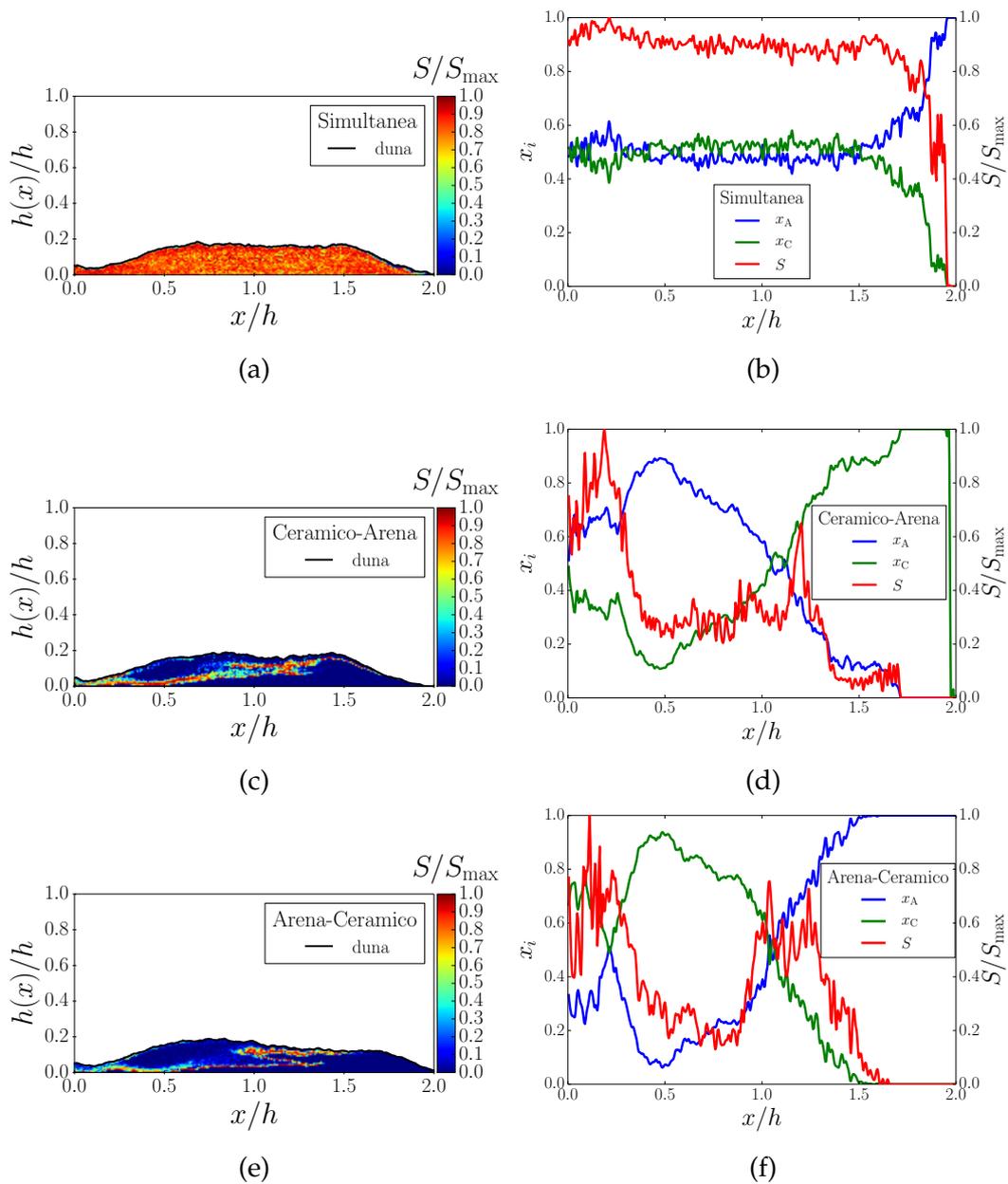


Figura 5.11: Mapa de colores para la entropía de mezcla  $S$  correspondiente a las dunas mostradas en la Fig.( 5.9). En la columna izquierda se representa el valor de  $S$  normalizado a  $S_{\max}$ . En la columna derecha se muestran los perfiles de entropía de mezcla y concentración de las dunas depositadas ( $x_A$  : concentración de arena,  $x_C$  : concentración de AS cerámico). (A) y (B): Inyección simultánea de ambos tipos de AS, (C) y (D): AS cerámico seguido de arena, (E) y (f): Arena seguida de AS cerámico. Las longitudes se escalaron con la altura de la celda  $h = 0,8$  m.

## 5.7 Discusión de los resultados

Es importante discutir hasta que punto los resultados obtenidos en las sec. 5.5 y 5.6 pueden ser extrapolados a operaciones de campo. Como anteriormente mencionamos, la celda considerada ha sido escalada para representar una fractura de campo estimulada efectivamente. Los puntos de inyección y el espesor de la fractura son similares a los valores de campo. La tasa de inyección ha sido seleccionada para obtener una velocidad media del fluido en la celda del mismo orden a la obtenida en el campo. Dado que las propiedades del fluido son las del agua, se espera que el número de Reynolds en operaciones con *slickwater* sea similar.

Las partículas de proppant utilizadas en las simulaciones son algo mayores a las usadas en operaciones de campo. Una práctica común es usar arena de malla 70 y superior (diámetros de partícula  $< 0,2$  mm) durante la etapa inicial del proceso de estimulación. Durante la última fase generalmente se bombea proppant cerámico de malla 16/30 (diámetros entre 0,4 mm y 1,2 mm). Sin embargo, hemos elegido mallas más grandes (16/30 y 20/40) para llenar una porción considerable de la celda utilizando un número manejable de partículas, sin la necesidad de utilizar mucho tiempo de cómputo. Estas simulaciones tomaron alrededor de 10 días en una workstation utilizando 4 procesadores en paralelo. También debemos mencionar que en las operaciones de campo, típicamente el AS cerámico no se bombea con *slickwater*. En su lugar se utiliza un gel activado cross-linkado con un fuerte comportamiento no-Newtoniano, generalmente de tipo *shear-thinning*.

Aunque la posición de los puntos de inyección tiene un efecto importante en la ubicación del agente de sostén, uno podría preguntarse si realmente puede controlarse la posición relativa entre la fractura y los puntos de inyección. Esto podría ser controlado colocando a los *clusters* de punzado cerca de barreras geológicas, en el caso de que existan, con la habilidad de limitar el crecimiento de la fractura en la dirección vertical. Esta situación puede ofrecer una oportunidad para tener un mejor control sobre la ubicación del agente de sostén.

Finalmente, hay que tener en cuenta que los resultados mostrados corresponden a la inyección de la parte inicial de todo el AS que usualmente es inyectado en una operación de campo. El bombeo posterior podría cambiar la forma de la duna, eventualmente alcanzando la formación de la *traction carpet* y el consecuente llenado de la celda aguas abajo [23, 41, 44], como vimos durante la reproducción de resultados publicados en la sec. 3.3. Un estudio

del llenado completo de la celda para diferentes posiciones de los puntos de inyección y diferentes tipos de agentes de sostén requeriría simulaciones más demandantes. Sin embargo, estas no están fuera del alcance si se cuenta con recursos computacionales mayores.

A pesar de los temas particulares discutidos aquí, la distribución de agente de sostén que observamos es consistente con resultados previos tanto experimentales [25, 94] como de simulación numérica [9, 40, 41, 44]. Las simulaciones CFD-DEM de celdas escaladas están sujetas a las mismas aproximaciones y escalado aplicados en el escalado de dispositivos experimentales. Por lo tanto, las conclusiones y extrapolaciones válidas para estudios experimentales deberían también serlo para estudios realizados por simulaciones CFD-DEM.

Otros autores [41, 44] ya probaron la ventaja del esquema CFD-DEM a la hora de modelar transporte del agente de sostén. Este trabajo pone énfasis en la importancia de la posición de los *clusters* de inyección y el efecto de inyectar diferentes tipos de agentes de sostén simultáneamente o en etapas.

## Capítulo 6

# Conclusiones

### 6.1 Conclusiones y perspectivas

En el presente trabajo de tesis hemos enfocado nuestra atención sobre la metodología de estimulación hidráulica usada en reservorios no convencionales, enfatizando el papel que juega el transporte del agente de sostén en el efectivo tratamiento y el impacto que tiene en la posterior explotación de este tipo de reservorios.

Para el desarrollo del trabajo presentamos el esquema numérico CFD-DEM. Para verificar el correcto funcionamiento de la implementación utilizada realizamos validaciones modelando sistemas conocidos y replicando resultados presentes en la bibliografía. Luego definimos un modelo numérico de estudio mediante escalado de una fractura de campo típica correspondiente a los reservorios argentinos.

Se verificó el efecto de incrementar un 50 % la longitud de la celda. Los resultados sobre el perfil de duna son similares, lo cual sugiere que dispositivos experimentales o modelos numéricos que utilicen celdas de una longitud un tanto limitada no tenga un impacto importante en la distribución final de la duna de agente de sostén. También, comparamos simulaciones usando una discretización del dominio de la fase fluida más refinada. Los resultados son similares a los producidos usando la malla más gruesa, sugiriendo que el nivel de discretización generado por la malla gruesa es suficiente para reproducir la dinámica del sistema.

Sobre el modelo definido se estudió la inyección de diferentes tipos de AS, posicionando de distinta forma los *clusters* de inyección. También se inyectaron dos tipos de AS de forma simultánea o en etapas. Los resultados son consistentes con resultados previos tanto experimentales como de simulación.

Se mostró que inyectando agente de sostén en la parte superior de la celda resulta, en general, en una duna plana en comparación con los resultados

obtenidos al inyectar en la parte inferior de la celda. La inyección en la zona inferior produce un vórtice de convección que favorece la deposición cerca del punto de inyección de la celda.

La práctica usual de inyectar AS de baja densidad (arena), seguido de un agente de sostén más denso y de mayor diámetro (cerámico) tiene el efecto de dejar una capa uniforme de partículas más livianas en la base de la celda, sobre la cual se deposita una segunda capa de partículas más pesadas. Esto lo observamos para un *cluster* de inyección posicionado en la zona media de la celda. La inyección de dos tipos de AS simultáneamente genera una duna muy bien mezclada, mientras que para la inyección en etapas se obtiene una duna segregada. Finalmente, se vió que para los tres protocolos de inyección utilizados, podemos decir que se obtiene aproximadamente el mismo perfil de duna. Hemos medido el grado de mezcla obtenido al inyectar agentes de sostén distintos mediante el concepto de entropía de mezcla. Este parámetro parece ser una forma simple y apropiada para medir el grado de mezcla observado en la duna. Esto ayuda a detectar la medida en la que los AS de distinto tipo permanecen segregados en la celda. Dunas bien mezcladas tienen menor conductividad cuando un pozo es puesto en producción, por lo que dunas bien segregadas son deseadas.

## 6.2 Trabajos futuros

En la bibliografía no se encuentra aún una comparación directa de experimentos a escala con simulaciones numéricas. Esto puede deberse en parte a que los grupos de investigación que trabajan con simulaciones numéricas no poseen la capacidad para realizar experimentos y viceversa. En nuestro caso en particular, recientemente contamos con un equipo diseñado para analizar el transporte de partículas en una celda de dimensiones similares a la descrita en esta tesis. Actualmente se está trabajando en esta línea para realizar comparaciones directas y así validar los resultados obtenidos por CFD-DEM.

Por otro lado, no se encuentra en la bibliografía trabajos numéricos en los que se modelen fracturas complejas con bifurcaciones en lugar de un único plano de flujo. En ese sentido, es valioso estudiar este tipo de sistemas en los cuales resulta de interés conocer la distribución de agente de sostén tanto en una fractura principal como en sus ramificaciones. Debe notarse que el hecho de considerar una bifurcación, imposibilita el tratamiento 2D para la fase fluida. Por tal motivo se deberá utilizar un modelo que contemple una sección del plano perpendicular al plano de propagación.

Se prevé que el uso de simulaciones CFD-DEM será particularmente adecuado para el estudio de configuraciones complejas que son difíciles de realizar experimentalmente, como es el caso del estudio de fracturas con ramificaciones y el análisis de la estabilidad del AS durante el *flowback* [98].

## Apéndice A

### Perfiles de duna

Para extraer el perfil de la duna partimos de los resultados de simulación con las partículas totalmente decantadas. En primer lugar procedemos a dividir la celda en pequeños volúmenes (denominados *bins*), cada uno de ancho fijo  $\Delta x = 1,0$  cm, una altura igual al alto de la celda  $h = 0,8$  m y un espesor igual al de la celda de simulación, tal como podemos ver en la Fig. A.1.

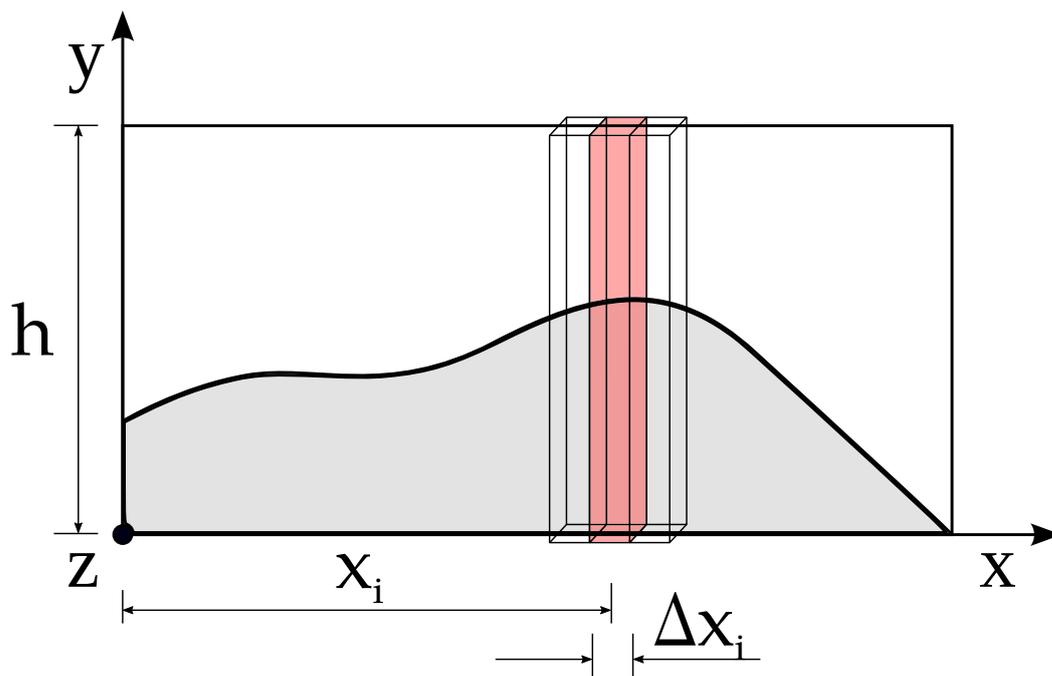


Figura A.1: División de la celda en *bins* de ancho  $\Delta x = 0,1$  m y alto  $h = 0,8$  m.

El  $i$ -ésimo *bin* está ubicado en la posición  $x_i$ , de modo tal que se considera dentro de ese *bin* a las partículas cuya coordenada  $x_j$  verifique la condición  $x_i - \frac{1}{2}\Delta x \leq x_j \leq x_i + \frac{1}{2}\Delta x$  (ver Fig. A.2).

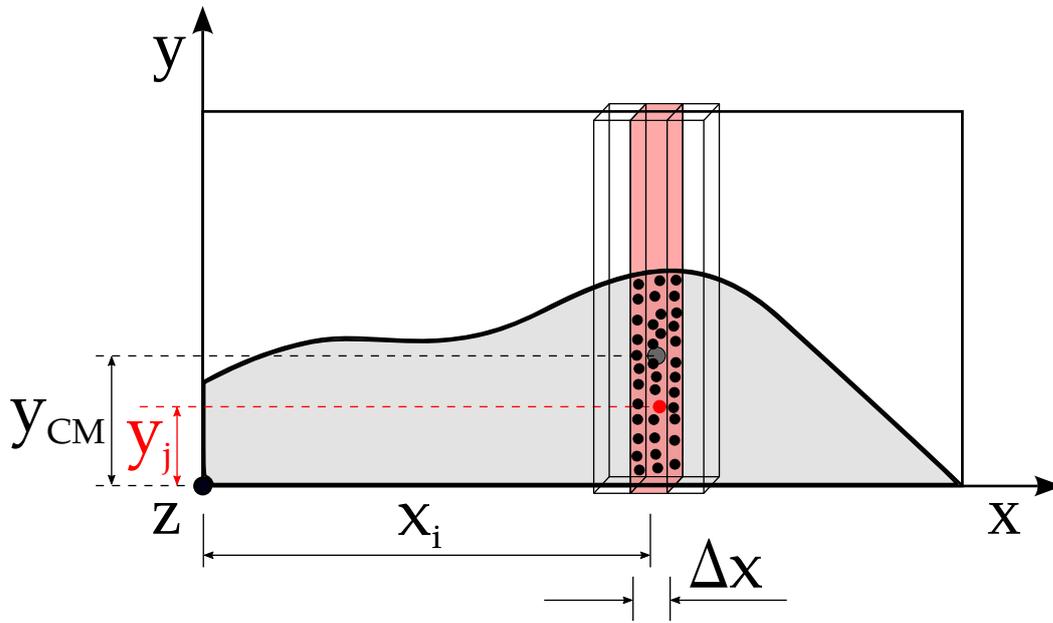


Figura A.2: Posición del centro de masa  $y_{CM}$  y de las partículas dentro del  $i$ -ésimo.

Luego se calcula la coordenada vertical del centro de masa ( $y_{CM}$ ) del grupo de partículas en el  $i$ -ésimo *bin* (ver Fig. A.2).

$$y_{CM} = \frac{\sum_{j=1}^{N_i} y_j}{N_i}, \quad (A.1)$$

siendo  $N_i$  el número total de partículas en el  $i$ -ésimo *bin* y  $y_j$  la coordenada vertical de cada partícula.

Luego de calcular la coordenada vertical del centro de masa ( $y_{CM}$ ), asumiendo que la fracción volumétrica es aproximadamente constante a lo largo de la columna de partículas, la posición de la superficie libre ( $h(x)$ ) en un *bin* determinado se puede estimar como  $h(x) = 2y_{CM}$ . Para los casos analizados, la suposición de fracción volumétrica es correcta y se mantiene dentro de un 1% de error.

El perfil completo de la duna se obtiene calculando para cada *bin* el par de puntos  $[x_i; h(x_i)]$ .

## Apéndice B

# Entropía de mezcla

Para medir el grado de mezcla de los distintos tipos de agente de sostén, usamos el concepto de entropía de mezcla (ver por ejemplo [45] para una aplicación en mezclado de partículas). Consideremos una región en el espacio que posee una mezcla binaria de partículas conformada por  $N_I$  partículas de tipo I y  $N_{II}$  partículas de tipo II (ver Fig. B.1 )

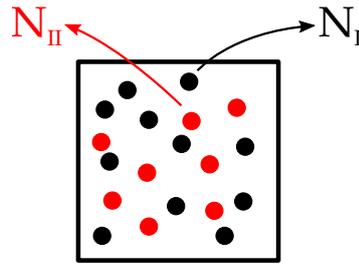


Figura B.1: Región del espacio con una mezcla binaria de  $N_I$  partículas de tipo I y  $N_{II}$  partículas de tipo II.

Por lo tanto en la región habrá una fracción  $x_I = \frac{N_I}{N_I + N_{II}}$  de partículas de tipo I, y una fracción  $x_{II} = \frac{N_{II}}{N_I + N_{II}}$  de partículas de tipo II, verificándose que  $x_I + x_{II} = 1$ . En estas condiciones, la entropía de mezcla  $S$  para una mezcla binaria se define como [45]

$$S = x_I \ln x_I + x_{II} \ln x_{II}. \quad (\text{B.1})$$

Para un volumen vacío ( $x_I = x_{II} = 0$ ) o para un volumen que sólo posee partículas de un solo tipo ( $x_I = 1 \wedge x_{II} = 0$  ó  $x_I = 0 \wedge x_{II} = 1$ ), la entropía de la mezcla es igual a cero.

$$S = 0 \begin{cases} x_I = x_{II} = 0 \\ x_I = 1 \wedge x_{II} = 0 \\ x_I = 0 \wedge x_{II} = 1 \end{cases} . \quad (\text{B.2})$$

Para un volumen con igual número de partículas de cada tipo ( $x_I = x_{II} = 0,5$ ), la entropía de la mezcla es máxima.

$$S = S_{\max} \left\{ x_I = x_{II} = 0,5 \right. \quad . \quad (B.3)$$

Esta medida es aplicada a pequeñas celdas a lo largo del dominio para crear un mapa de colores y representar el grado de mezcla del sistema. La celda en estudio en particular se ha dividido en 120 celdas en la dirección vertical y 240 celdas en la dirección horizontal. Luego se calculó la entropía de la mezcla  $S_{ij}$  en cada celda según los índices  $ij$ , correspondiendo  $i$  al posición horizontal y  $j$  al vertical. Normalmente se normalizan los valores de  $S_{ij}$  con  $S_{\max}$  de modo que en el mapa de colores  $0 \leq S \leq 1$ .

Para obtener un perfil de entropía promedio a lo largo de la longitud de la celda debe obtenerse la entropía de cada columna  $i$  sumando la entropía de cada celda  $j$  de esa columna. De acuerdo a Wen [45].

$$S_i = \sum_{j=1}^{n_y} N_{ij} S_{ij}, \quad (B.4)$$

siendo  $N_{ij}$  el número total de partículas en la celda  $ij$  y  $n_y$  el número de celdas en la dirección vertical. Debe notarse que la entropía de mezcla sumada de un grupo de celdas es diferente a la entropía de mezcla del mismo volumen considerado como una única celda (ver Fig. B.2). De modo que la entropía de la mezcla es sensible al tamaño de celda utilizado, el cual debe ser lo suficientemente grande como para que quepan algunas partículas.

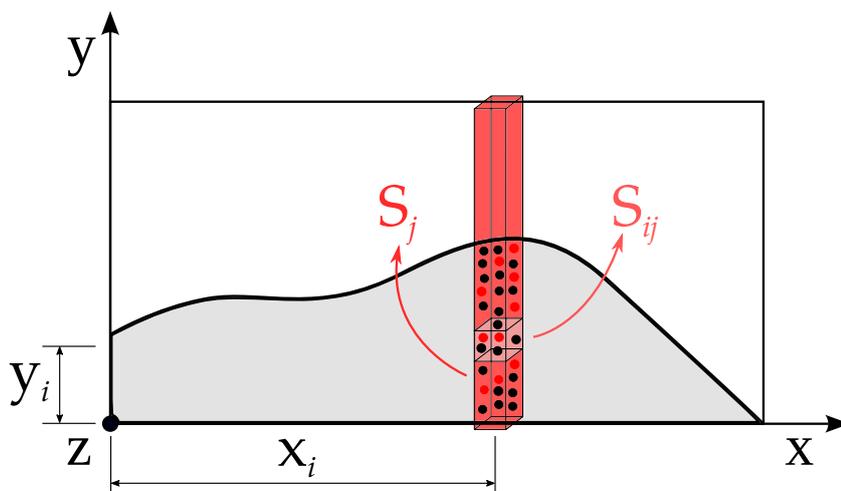


Figura B.2: Diferencia entre la entropía de celda  $ij$  ( $S_{ij}$ ) y la entropía de la columna  $j$  ( $S_j$ ) referida a un volumen formado por todas las celdas para esa columna.

# Bibliografía

- [1] L. B. Magoon y W. G. Dow. *The petroleum system*. AAPG Special Volumes, 1994.
- [2] L. Riavitz, L. Stinco, R. Caligari, M. Hirschfeldt, M. Hernández, R. Sarandón, E. A. Pigretti y V. Bronstein. *Recursos hidrocarbúricos no convencionales shale y el desarrollo energético de la Argentina: caracterización, oportunidades, desafíos*. 1.<sup>a</sup> ed. Fundación YPF, 2015.
- [3] A. I. Levorsen. *Geología del petróleo*. Editorial Universitaria de Buenos Aires, 1973.
- [4] S. Holditch. "The increasing role of unconventional reservoirs in the future of the oil and gas business". *Journal of petroleum technology* 55.11 (2003).
- [5] R. Aguilera. *Naturally fractured reservoirs*. Petroleum Publishing Company, 1980.
- [6] M. J. Economides y K. G. Nolte. *Reservoir Stimulation*. John Wiley & Sons, 2000.
- [7] M. D. Zoback. *Reservoir geomechanics*. Cambridge University Press, 2010.
- [8] E. M. Anderson. *The Dynamics of Faulting and Dyke Formation with Applications to Britain*. Oliver y Boyd, 1951.
- [9] G. Zhang, M. Gutierrez y M. Li. "Numerical simulation of transport and placement of multi-sized proppants in a hydraulic fracture in vertical wells". *Granular Matter* 19.2 (2017).
- [10] A. Reinicke. "Mechanical and hydraulic aspects of rock-proppant systems: laboratory experiments and modelling approaches". Tesis doct. Universität Potsdam, Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät, 2009.
- [11] D. Milton-Taylor, C. Stephenson y M. I. Asgian. "Factors affecting the stability of proppant in propped fractures: results of a laboratory study". *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers. 1992.

- [12] N. R. Warpinski. "Stress amplification and arch dimensions in proppant beds deposited by waterfracs". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference*. Society of Petroleum Engineers. 2009.
- [13] L. J. Volk, C. J. Raible, H. B. Carroll y J. S. Spears. "Embedment of high strength proppant into low-permeability reservoir rock". *SPE/DOE Low Permeability Gas Reservoirs Symposium*. Society of Petroleum Engineers. 1981.
- [14] T. T. Palisch, R. J. Duenckel, L. W. Bazan, J. H. Heidt y G. A. Turk. "Determining realistic fracture conductivity and understanding its impact on well performance-theory and field examples". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference*. Society of Petroleum Engineers. 2007.
- [15] T. T. Palisch, M. Vincent y P. J. Handren. "Slickwater fracturing: food for thought". *SPE Production & Operations* 25.03 (2010), págs. 327-344.
- [16] R. C. Tomson, P. Guraieb, S. Graham, C. Yan, N. Ghorbani, T. Hanna y C. Cooper. "Development of a Universal Ranking for Friction Reducer Performance". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers. 2017.
- [17] M. Ba Geri, A. Imqam y R. Flori. "A critical review of using high viscosity friction reducers as fracturing fluids for hydraulic fracturing applications". *SPE Oklahoma city oil and gas symposium*. Society of Petroleum Engineers. 2019.
- [18] Y. T. Hu, D. Fisher, P. Kurian y R. Calaway. "Proppant Transport by a High Viscosity Friction Reducer". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers. 2018.
- [19] M. Mack, J. Sun y C. Khadilkar. "Quantifying proppant transport in thin fluids: theory and experiments". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference*. Society of Petroleum Engineers. 2014.
- [20] API 19C. *Recommended practice for measurement of and specifications for proppants used in hydraulic fracturing and gravel-packing operations*. Standard. Washington, DC: American Petroleum Institute, 2006.
- [21] API 19D. *Recommended Practice for Measuring the Long-Term Conductivity of Proppants*. Standard. Washington, DC: American Petroleum Institute, 2008.
- [22] V.A. Kuuskraa, S.H. Stevens y K. Moodhe. *EIA/ARI World Shale Gas and Shale Oil Resource Assessment*. Inf. téc. U.S. Energy Information Administration, U.S. Department of Energy, jun. de 2013.

- [23] L. R. Kern, T. K. Perkins y R. E. Wyant. "The mechanics of sand movement in fracturing". *Journal of Petroleum Technology* 11.07 (1959).
- [24] M. A. Alotaibi y J. L. Miskimins. "Slickwater proppant transport in complex fractures: new experimental findings & scalable correlation". *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers. 2015.
- [25] R. Sahai, J. L. Miskimins y K. E. Olson. "Laboratory results of proppant transport in complex fracture systems". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference*. Society of Petroleum Engineers. 2014.
- [26] N. A. Patankar, D. D. Joseph, J. Wang, R. D. Barree, M. Conway y M. Asadi. "Power law correlations for sediment transport in pressure driven channel flows". *International Journal of Multiphase Flow* 28.8 (2002).
- [27] J. Wang, D. D. Joseph, N. A. Patankar, M. Conway y R. D. Barree. "Bi-power law correlations for sediment transport in pressure driven channel flows". *International Journal of Multiphase Flow* 29.3 (2003).
- [28] T. R. Woodworth y J. L. Miskimins. "Extrapolation of laboratory proppant placement behavior to the field in slickwater fracturing applications". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference*. Society of Petroleum Engineers. 2007.
- [29] W. L. Medlin, J. H. Sexton y G. L. Zumwalt. "Sand transport experiments in thin fluids". *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers. 1985.
- [30] T. B. Anderson y R. Jackson. "Fluid mechanical description of fluidized beds. Equations of motion". *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 6.4 (1967), págs. 527-539.
- [31] A. Settari y H. S. Price. "Simulation of hydraulic fracturing in low-permeability reservoirs". *Society of Petroleum Engineers Journal* 24.02 (1984).
- [32] Z. Y. Zhou, S. B. Kuang, K. W. Chu y A. B. Yu. "Discrete particle simulation of particle–fluid flow: model formulations and their applicability". *Journal of Fluid Mechanics* 661 (2010).
- [33] E. V. Dontsov y A. P. Peirce. "Slurry flow, gravitational settling and a proppant transport model for hydraulic fractures". *Journal of Fluid Mechanics* 760 (2014).
- [34] E. V. Dontsov y A. P. Peirce. "Proppant transport in hydraulic fracturing: crack tip screen-out in KGD and P3D models". *International Journal of Solids and Structures* 63 (2015).

- [35] D. M. Snider. "An incompressible three-dimensional multiphase particle-in-cell model for dense particle flows". *Journal of Computational Physics* 170.2 (2001).
- [36] Y. Tsuji, T. Kawaguchi y T. Tanaka. "Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed". *Powder Technology* 77.1 (1993).
- [37] B. H. Xu y A. B. Yu. "Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics". *Chemical Engineering Science* 52.16 (1997).
- [38] N. A. Patankar y D. D. Joseph. "Modeling and numerical simulation of particulate flows by the Eulerian-Lagrangian approach". *International Journal of Multiphase Flow* 27.10 (2001), págs. 1659-1684.
- [39] K. Tsai, E. Fonseca, E. Lake y S. Degaleesan. "Advanced computational modeling of proppant settling in water fractures for shale gas production". *Society of Petroleum Engineers Journal* 18.01 (2012).
- [40] G. Zhang, M. Li y M. Gutierrez. "Numerical simulation of proppant distribution in hydraulic fractures in horizontal wells". *Journal of Natural Gas Science and Engineering* 48 (2017).
- [41] G. Zhang, M. Gutierrez y M. Li. "A coupled CFD-DEM approach to model particle-fluid mixture transport between two parallel plates to improve understanding of proppant micromechanics in hydraulic fractures". *Powder Technology* 308 (2017).
- [42] I. Tomac y M. Gutierrez. "Numerical study of horizontal proppant flow and transport in a narrow hydraulic fracture". *47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*. American Rock Mechanics Association. 2013.
- [43] C. A. J. Blyton, D. P. Gala y M. M. Sharma. "A comprehensive study of proppant transport in a hydraulic fracture". *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers. 2015.
- [44] J. Zeng, H. Li y D. Zhang. "Numerical simulation of proppant transport in hydraulic fracture with the upscaling CFD-DEM method". *Journal of Natural Gas Science and Engineering* 33 (2016).
- [45] Y. Wen, M. Liu, B. Liu e Y. Shao. "Comparative Study on the Characterization Method of Particle Mixing Index Using DEM Method". *Procedia Engineering* 102 (2015).

- [46] A. C. Ortiz, D. E. Hryb, J. R. Martínez y R. A. Varela. "Hydraulic Fracture Height Estimation in an Unconventional Vertical Well in the Vaca Muerta Formation, Neuquen Basin, Argentina". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference*. Society of Petroleum Engineers. 2016.
- [47] M. Baldini, C. M. Carlevaro, L. A. Pugnaroni y M. Sánchez. "Numerical simulation of proppant transport in a planar fracture. A study of perforation placement and injection strategy". *International Journal of Multiphase Flow* 109 (2018).
- [48] H. K. Versteeg y W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson Education, 2007.
- [49] J. H. Ferziger y M. Peric. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, 2012.
- [50] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows: The fundamentals of computational fluid dynamics*. Butterworth-Heinemann, 2007.
- [51] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. v. 6. Elsevier, 1987.
- [52] H. Schlichting. *Boundary layer theory*. Vol. 960. Springer, 1960.
- [53] S. M. Karim y L. Rosenhead. "The Second Coefficient of Viscosity of Liquids and Gases". *Rev. Mod. Phys.* 24 (2 1952), págs. 108-116.
- [54] G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press, 2000.
- [55] F. Moukalled, L. Mangani y M. Darwish. *The finite volume method in computational fluid dynamics. An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab*. Springer, 2016.
- [56] H. Jasak. "Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows." Tesis doct. University of London, Imperial College of Science, Technology y Medicine, 1996.
- [57] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows. Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. 1990.
- [58] ANSYS Inc. "ANSYS FLUENT 12.0 User's Guide". *Southpointe 275 Technology Drive, Canonsburg, PA 15317, USA* (2009).
- [59] ANSYS Inc. "ANSYS Fluent 15.0 Theory Guide". *Southpointe 275 Technology Drive, Canonsburg, PA 15317, USA* (2013).
- [60] I. Demirdžić y S. Muzaferija. "Finite volume method for stress analysis in complex domains". *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 37.21 (1994).

- [61] H. Jasak y H. G. Weller. "Application of the finite volume method and unstructured meshes to linear elasticity". *International journal for numerical methods in engineering* 48.2 (2000).
- [62] Ž. Tuković, A. Ivanković y A. Karač. "Finite-volume stress analysis in multi-material linear elastic body". *International journal for numerical methods in engineering* 93.4 (2013).
- [63] S. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. CRC press, 1980.
- [64] S. M. Damián. "An extended mixture model for the simultaneous treatment of short and long scale interfaces". Tesis doct. Universidad Nacional Del Litoral, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, 2013.
- [65] R. I. Issa. "Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting". *Journal of computational physics* 62.1 (1986).
- [66] P. A Cundall y O. D. L. Strack. "A discrete numerical model for granular assemblies". *Geotechnique* 29.1 (1979).
- [67] C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, S. Amberger y S. Pirker. "Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM". *Progress in Computational Fluid Dynamics* 12.2-3 (2012), págs. 140-152.
- [68] A. Hager. "CFD-DEM on multiple scales: An extensive investigation of particle-fluid interactions". Tesis doct. Johannes Kepler Universität Linz, Technisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, 2014.
- [69] T. Pöschel y T. Schwager. *Computational granular dynamics: models and algorithms*. Springer, 2005.
- [70] K. Mao, M. Y. Wang, Z. Xu y T. Chen. "DEM simulation of particle damping". *Powder Technology* 142.2-3 (2004), págs. 154-165.
- [71] J. Schäfer, S. Dippel y D. E. Wolf. "Force schemes in simulations of granular materials". *Journal de physique I* 6.1 (1996).
- [72] H. Kruggel-Emden, E. Simsek, S. Rickelt, S. Wirtz y V. Scherer. "Review and extension of normal force models for the discrete element method". *Powder Technology* 171.3 (2007).
- [73] H. Kruggel-Emden, S. Wirtz y V. Scherer. "A study on tangential force laws applicable to the discrete element method (DEM) for materials with viscoelastic or plastic behavior". *Chemical Engineering Science* 63.6 (2008).
- [74] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J. M. Hertzsch y T. Pöschel. "Model for collisions in granular gases". *Physical review E* 53.5 (1996).

- [75] H. Hertz. "Über die Berührung fester elastischer Körper". *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 92 (1882).
- [76] G. Hu, Z. Hu, B. Jian, L. Liu y H. Wan. "On the determination of the damping coefficient of non-linear spring-dashpot system to model Hertz contact for simulation by discrete element method". *WASE International Conference on Information Engineering*. Vol. 3. Institute of Electrical y Electronics Engineers. 2010.
- [77] D. Antypov y J. A. Elliott. "On an analytical solution for the damped Hertzian spring". *EPL (Europhysics Letters)* 94.5 (2011).
- [78] A. Di Renzo y F. P. Di Maio. "An improved integral non-linear model for the contact of particles in distinct element simulations". *Chemical engineering science* 60.5 (2005).
- [79] H. R. Norouzi, R. Zarghami, R. Sotudeh-Gharebagh y N. Mostoufi. *Coupled CFD-DEM modeling: formulation, implementation and application to multiphase flows*. John Wiley & Sons, 2016.
- [80] R. Di Felice. "The voidage function for fluid-particle interaction systems". *International Journal of Multiphase Flow* 20.13 (1994).
- [81] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang y A. B. Yu. "Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments". *Chemical Engineering Science* 62.13 (2007).
- [82] C. Goniva, C. Kloss, N. G. Deen, J. A. M. Kuipers y S. Pirker. "Influence of rolling friction on single spout fluidized bed simulation". *Particology* 10.5 (2012).
- [83] R. Nouri, D. D. Ganji y M. Hatami. "Unsteady sedimentation analysis of spherical particles in Newtonian fluid media using analytical methods". *Propulsion and Power Research* 3.2 (2014), págs. 96-105.
- [84] S. Ergun y A. A. Orning. "Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds". *Industrial & Engineering Chemistry* 41.6 (1949).
- [85] P. G. Saffman y G. I. Taylor. "The penetration of a fluid into a porous medium or Hele-Shaw cell containing a more viscous liquid". *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 245.1242 (1958), págs. 312-329.
- [86] N. B. Nagel, F. Zhang, M. A. Sanchez-Nagel y B. Lee. "Evaluation of Stress Changes Due to Multi-Stage Hydraulic Fracturing—Consideration of Field Results". *ISRM International Symposium, EUROCK*. International Society for Rock Mechanics y Rock Engineering. 2013.

- [87] D. Basu, K. Das, K. Smart y G. Ofoegbu. "Comparison of Eulerian-Granular and discrete element models for simulation of proppant flows in fractured reservoirs". *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*. American Society of Mechanical Engineers. 2015.
- [88] S. Tong y K. K. Mohanty. "Proppant transport study in fractures with intersections". *Fuel* 181 (2016).
- [89] R. D. Barree y M. W. Conway. "Proppant holdup, bridging, and screenout behavior in naturally fractured reservoirs". *SPE Production and Operations Symposium*. Society of Petroleum Engineers. 2001.
- [90] S. Mondal, C. H. Wu y M. M. Sharma. "Coupled CFD-DEM simulation of hydrodynamic bridging at constrictions". *International Journal of Multiphase Flow* 84 (2016).
- [91] Y. Li, Y. Xu y C. Thornton. "A comparison of discrete element simulations and experiments for 'sandpiles' composed of spherical particles". *Powder Technology* 160.3 (2005).
- [92] K. Washino, E. L. Chan, K. Miyazaki, T. Tsuji y T. Tanaka. "Time step criteria in DEM simulation of wet particles in viscosity dominant systems". *Powder Technology* 302 (2016).
- [93] D. Ertas, G. S. Grest, T. C. Halsey, D. Levine y L. E. Silbert. "Gravity-driven dense granular flows". *EPL Europhysics Letters* 56.2 (2001).
- [94] Y. Liu. "Settling and hydrodynamic retardation of proppants in hydraulic fractures". Tesis doct. University of Texas, 2006.
- [95] X. Wang, J. Yao, L. Gong, H. Sun, Y. Yang, L. Zhang, Y. Li y W. Liu. "Numerical simulations of proppant deposition and transport characteristics in hydraulic fractures and fracture networks". *Journal of Petroleum Science and Engineering* 183 (2019), pág. 106401.
- [96] H.D. Brannon, W. D. Wood y R. S. Wheeler. "Large scale laboratory investigation of the effects of proppant and fracturing fluid properties on transport". *SPE International Symposium and Exhibition on Formation Damage Control*. Society of Petroleum Engineers. 2006.
- [97] X. Hu, K. Wu, G. Li, J. Tang y Z. Shen. "Effect of proppant addition schedule on the proppant distribution in a straight fracture for slickwater treatment". *Journal of Petroleum Science and Engineering* 167 (2018), págs. 110-119.

- 
- [98] R. J. Shor y M. M. Sharma. "Reducing proppant flowback from fractures: Factors affecting the maximum flowback rate". *SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference*. Society of Petroleum Engineers. 2014.